



HAL
open science

Modélisation, Analyse et Approximation numérique en mécanique des fluides

Franck Boyer

► **To cite this version:**

Franck Boyer. Modélisation, Analyse et Approximation numérique en mécanique des fluides. Mathématiques [math]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2006. tel-00104532

HAL Id: tel-00104532

<https://theses.hal.science/tel-00104532>

Submitted on 6 Oct 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Provence
U.F.R. de Mathématiques, Informatique et Mécanique

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Discipline : Mathématiques Appliquées

Modélisation, Analyse et Approximation numérique en mécanique des fluides

présentée par

Franck BOYER

le 3 octobre 2006

Après avis des rapporteurs :

Mr	B. DESJARDINS	Directeur de Recherches	CEA, Bruyères-le-Châtel
Mr	M. FEISTAUER	Professeur	Université Charles, Prague
Mr	T. GALLOUET	Professeur	Université de Provence, Marseille

Devant la commission d'examen composée de

Mr	S. CORDIER	Professeur	Université d'Orléans
Mr	B. DESJARDINS	Directeur de Recherches	CEA, Bruyères-le-Châtel
Mr	P. FABRIE	Professeur	Université Bordeaux 1
Mr	T. GALLOUET	Professeur	Université de Provence, Marseille
Mr	E. GRENIER	Professeur	ENS Lyon
Mme	R. HERBIN	Professeur	Université de Provence, Marseille

Et que faudrait-il faire ?
Chercher un protecteur puissant, prendre un patron,
Et comme un lierre obscur qui circonvient un tronc
Et s'en fait un tuteur en lui léchant l'écorce,
Grimper par ruse au lieu de s'élever par force ?
Non, merci. Dédier, comme tous ils le font,
Des vers aux financiers ? Se changer en bouffon
Dans l'espoir vil de voir, aux lèvres d'un ministre,
Naître un sourire, enfin, qui ne soit pas sinistre ?
Non, merci . . .

⋮

. . . Non, merci ! Mais ... chanter,
Rêver, rire, passer, être seul, être libre,
Avoir l'œil qui regarde bien, la voix qui vibre,
Mettre, quand il vous plaît, son feutre de travers,
Pour un oui, pour un non, se battre – ou faire un vers !
Travailler sans souci de gloire ou de fortune,
A tel voyage, auquel on pense, dans la lune !
N'écrire jamais rien qui de soi ne sortit,
Et modeste d'ailleurs, se dire mon petit,
Soit satisfait des fleurs, des fruits, même des feuilles,
Si c'est dans ton jardin à toi que tu les cueilles !
Puis, s'il advient d'un peu triompher, par hasard,
Ne pas être obligé d'en rien rendre à César,
Vis-à-vis de soi-même en garder le mérite,
Bref, dédaignant d'être le lierre parasite,
Lors même qu'on n'est pas le chêne ou le tilleul,
Ne pas monter bien haut, peut-être, mais tout seul !

Cyrano de Bergerac, Acte II, Scène 8
EDMOND ROSTAND

Remerciements

J'ai tendance à faire mienne la philosophie de vie de Cyrano de Bergerac telle qu'elle est décrite dans la scène ci-contre. Néanmoins, je me dois d'être honnête et de reconnaître qu'en réalité, même si on essaie de *ne pas être un lierre parasite* et de *monter [...] tout seul*, il y a bien souvent des personnes qui, consciemment ou pas, nous font la courte échelle ou nous remettent le pied à l'étrier dans les moments difficiles. Les quelques phrases qui suivent leur sont dédiées.

Mes premiers mots sont dirigés vers Pierre Fabrie. C'est lui bien sûr, en tant que directeur de thèse, qui m'a initié au monde de la recherche et qui m'a aidé à développer mon goût pour tous les aspects du travail d'un mathématicien appliqué. C'est aussi lui, en tant que collègue et même co-auteur, qui m'a parfois incité à persévérer dans certaines voies que je croyais, à tort, sans débouchés. C'est enfin lui, en tant qu'ami, qui a su me donner de bons conseils lorsque c'était nécessaire ou me faire découvrir quelques bons crus de sa cave. Qu'il trouve ici l'expression de ma gratitude.

Je souhaite maintenant remercier très sincèrement Benoît Desjardins, Miloslav Feistauer et Thierry Gallouët pour avoir accepté de consacrer un peu de leur temps à la lecture de ce mémoire. J'ai moi-même beaucoup apprécié la lecture de certains de leurs travaux et essayé de m'en inspirer pour bâtir mes contributions personnelles qui font l'objet de cette habilitation à diriger des recherches.

J'en profite pour remercier tout particulièrement Thierry pour l'accueil qu'il m'a réservé dans le laboratoire. Par ailleurs j'apprécie beaucoup qu'il soit toujours resté très disponible, malgré ses nombreuses sollicitations, pour discuter de maths, de politique scientifique du labo, ou que sais-je encore ...

Raphaële Herbin a bien voulu faire partie du jury et je l'en remercie chaleureusement. Bon nombre de ses travaux m'ont accompagné durant ces dernières années, mais c'est aussi à son dynamisme que je voudrais rendre hommage ici (sans oublier les soirées musicales qui ont rythmé les quelques années que je viens de passer à Marseille).

Je suis également très reconnaissant envers Stéphane Cordier et Emmanuel Grenier d'avoir bien voulu faire partie du jury. Outre leurs grandes qualités scientifiques, je suis particulièrement sensible à l'engagement de Stéphane au service de la communauté des mathématiques appliquées françaises et à la forte implication d'Emmanuel dans le développement de nouvelles interactions des mathématiques avec la biologie et la médecine. C'est pourquoi leur présence dans ce jury est un honneur pour moi.

Je tiens maintenant à exprimer toute ma reconnaissance à Eric Lombardi qui est l'un de ceux à qui je dois d'être où je suis actuellement et qui, par ailleurs, a mis en place et organisé le GDR EAPQ dont j'ai fait partie pendant 5 ans et qui a aidé beaucoup de jeunes chercheurs comme moi à trouver leur place dans la communauté.

Je tiens à remercier également tous mes collègues de l'équipe d'Analyse Appliquée du LATP qui m'ont accueilli il y a quelques années, notamment Florence et Boris (avant qu'il ne reparte en Franche-Comté !) bien sûr avec qui j'ai beaucoup travaillé. Je n'oublie pas ceux qui sont arrivés un peu plus tard, en particulier Assia et Jérôme, avec qui j'ai passé des moments agréables sérieux ou moins sérieux.

J'ai eu l'occasion de participer à l'encadrement des thèses de Laurent et de Céline, ce qui a été une expérience tout à fait enrichissante. J'ai beaucoup apprécié leur enthousiasme et leur motivation. C'est aussi l'occasion pour moi de saluer Bruno, Jean-Claude et Philippe avec qui il est toujours agréable de travailler.

Je remercie également tous les étudiants qui ont fréquenté le CMI à un moment ou à un autre et avec qui j'ai partagé des bons moments, qui autour d'un tableau rempli d'équations, qui autour d'un café ou d'une bière, qui autour d'une table de belote ou de billard. Merci donc à Alexandre, Clément, Florence, Franck, Isabelle, Léa, Muriel, Nicolas B., Nicolas K., Philippe, Stéphanie, ...

Il me vient naturellement une pensée pour mes anciens collègues bordelais. Chacune de mes visites au MAB est toujours un plaisir à la fois scientifique et humain. Merci donc à Cédric, Charles-Henri, David, Gilles, Guy, Mathieu, Thierry, Vincent, ...

De la même façon, je souhaite ici saluer mes camarades de la promotion 1995 de l'ENS Cachan. La bonne ambiance qui a toujours régné, et qui règne encore, dans cette promotion a beaucoup d'importance pour moi ; gageons que cela continuera encore longtemps.

Je conclus bien sûr en ayant une pensée pour ma famille, et notamment pour Marie qui m'a apporté un équilibre fondamental dans la vie d'un chercheur. J'imagine qu'elle persistera à penser que je passe trop de temps au bureau, ce que je continuerai à nier en bloc ... c'est aussi cela qui fait le charme des relations humaines. Pourvu que ça dure !

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION		1
PARTIE 1 ——— Modélisation et analyse en mécanique des fluides ———		5
Chapitre I	Modèles de type Cahn-Hilliard pour les écoulements diphasiques incompressibles	9
1	Résumé des travaux de thèse	9
1.1	Dérivation du modèle et simulations numériques	9
1.2	Problèmes d'existence, unicité et stabilité des solutions du système couplé	10
1.3	Etude asymptotique d'un modèle diphasique sous cisaillement	11
2	Modèle d'écoulements diphasiques non-newtoniens	13
Chapitre II	Modèles de Cahn-Hilliard à trois constituants non-miscibles	17
1	Modèles à trois constituants non miscibles. Existence et unicité des solutions	19
2	Modèles triphasiques consistants	21
3	Consistance dynamique	24
4	Simulations numériques et validation du modèle	24
4.1	Schémas numériques	24
4.2	Résultats	25
5	Limitations du modèle. Perspectives	26
Chapitre III	A propos de l'équation de transport	29
1	Théorème de traces. Problème de Cauchy/Dirichlet	29
1.1	Théorème de traces	30
1.2	Résolution du problème de Cauchy avec donnée au bord - Cas L^∞	31
1.3	Espace de traces	32
1.4	Résolution du problème de Cauchy avec donnée au bord - Cas L^p	32
2	Stabilité par rapport au champ de vitesse	33
3	Régularité spatiale des solutions de l'équation de transport	34
3.1	Introduction	34

3.2	Preuve pour des champs réguliers	35
3.3	Cas des solutions bornées	35
3.4	Cadre L^p	36
4	Commentaires et perspectives	36
Chapitre IV	Conditions aux limites en sortie d'un écoulement incompressible non-homogène	39
1	Notations et hypothèses	40
2	Formulation faible et existence du champ de vitesse	40
3	Existence de la pression et interprétation de la condition aux limites artificielle	41
4	Perspectives	42
 PARTIE 2 ——— Méthodes de volumes finis pour les problèmes elliptiques ———		43
Chapitre V	Schémas volumes finis pour le p-laplacien sur maillages cartésiens	47
1	Construction des schémas	48
2	Premières estimations d'erreur	49
3	Régularité Besov pour le p -laplacien et estimations d'erreur	50
4	Estimations d'erreur pour des solutions régulières	52
Chapitre VI	Schémas DDFV pour les problèmes elliptiques non-linéaires sur des grilles non structurées	53
1	Les schémas DDFV dans le cadre non-linéaire	54
1.1	Description générale	54
1.2	Premiers résultats : existence et unicité, convergence	56
1.3	Estimation d'erreur	56
2	Le cas des coefficients discontinus	58
2.1	Illustration dans le cas mono-dimensionnel	58
2.2	Le cas 2D : définition du nouveau gradient et écriture du schéma	60
2.3	Solveur non-linéaire pour ces schémas	62
2.4	Illustrations numériques	62
Chapitre VII	Quelques schémas non standard pour des problèmes elliptiques linéaires	65
1	Définition implicite des flux numériques sur maillage non orthogonal	65
2	Modèles asymptotiques d'écoulements en milieux poreux fracturés	69
 EN GUISE DE CONCLUSION ——— Projets et perspectives ———		73
 TRAVAUX DE L'AUTEUR		79
 RÉFÉRENCES		81

Introduction

L'analyse est parfois un moyen de se dégouter en détail
de ce qui était supportable dans son ensemble.

Mauvaises pensées et autres
PAUL VALÉRY

Les travaux rassemblés dans ce mémoire ont pour point commun l'origine des modèles considérés en mécanique des fluides. Il sont motivés par des applications potentielles à ce domaine particulier de la mécanique et bien souvent par les méthodes de simulation numérique qui leurs sont associées. Je décris brièvement dans cette introduction la structure générale du document, chaque chapitre présentant les résultats publiés, ou en voie de publication, dans un ou plusieurs articles¹.

La première partie de ce mémoire a ainsi pour objet des modèles d'écoulements que l'on pourrait qualifier de *complexes*. Les deux premiers chapitres concernent les modèles d'écoulements multiphasiques de type Cahn-Hilliard / Navier-Stokes. Ceux-ci, dans la classe de modèles dits à *interface diffuse*, ont pour objectif de rendre compte de l'écoulement de mélanges de fluides non miscibles visqueux incompressibles par le biais de variables définies globalement et notamment d'un ou plusieurs paramètres d'ordre qui varient fortement mais continûment aux interfaces. On propose ainsi une étude théorique (existence et unicité, comportement qualitatif) et numérique de ces modèles, en portant une attention particulière à la construction de bons modèles dans le cadre triphasique. Ces travaux ont donné lieu durant ma thèse à l'écriture d'un code de calcul en Fortran 90² que l'on a repris et complété par la suite avec L. Chupin dans le cadre de sa thèse pour prendre en compte les comportements viscoélastiques.

La finalité des troisième et quatrième chapitres est l'étude du modèle plus classique des équations de Navier-Stokes non-homogènes incompressibles dans le cadre de conditions aux limites non usuelles permettant la prise en compte d'écoulements entrant et sortant dans le domaine de calcul. Dans ce modèle, bien que le champ de vitesse du fluide satisfasse la contrainte de divergence nulle, sa densité est une nouvelle inconnue du problème vérifiant une équation de transport pour le champ de vitesse v . De façon plus précise, le chapitre III est consacré à l'étude du problème de traces pour l'équation de transport et de la résolution du problème de Cauchy/Dirichlet associé à cette équation. On établit également des résultats de stabilité des solutions et des propriétés de régularité en espace de celles-ci. Le quatrième chapitre est consacré à l'étude du modèle de conditions aux limites non-réfléchissantes pour les équations de Navier-Stokes non-homogènes proprement dit. On montre l'existence globale de solutions faibles pour lesquelles on peut interpréter la condition aux limites en un sens faible.

La seconde partie est dédiée à l'étude de l'approximation par des méthodes volumes finis d'équations elliptiques linéaires et non-linéaires monotones. Le cadre linéaire est maintenant assez classique (bien que non trivial par certains aspects et encore tout à fait d'actualité). L'originalité principale des travaux présentés ici est l'étude du cas non-linéaire. Ces travaux assez théoriques trouvent leur origine, par exemple, dans l'étude des modèles d'écoulements en milieux poreux où les effets non-linéaires sont pris en compte (lois de type Darcy-Forchheimer), ou encore pour des écoulements de fluides non-newtoniens dans les milieux poreux.

Le chapitre V rassemble les résultats de divers travaux sur l'approximation par volumes finis du p -laplacien sur maillages cartésiens. Cet opérateur constitue le problème modèle des équations elliptiques non-linéaires monotones. Dans le cadre cartésien, pour lequel la situation géométrique est la plus simple, la question de la construction de *bons* schémas volumes finis est déjà non triviale. Après avoir caractérisé de tels schémas, on en propose l'analyse d'erreur sous diverses hypothèses de régularité des maillages et de la solution exacte, en particulier dans le cadre d'une régularité Sobolev fractionnaire (ou plus précisément Besov) de la solution.

Le chapitre VI est consacré à l'étude des schémas de type DDFV (Discrete Duality Finite Volume) toujours dans le cadre des équations elliptiques non-linéaires. Cette classe de schémas a pour avantages de pouvoir s'appliquer à des maillages non structurés très généraux, de proposer une reconstruction naturelle de toutes les composantes du gradient de la solution et enfin (et surtout !) garantir que le schéma hérite des différentes propriétés qualitatives du problème continu.

¹Dans tout ce document, les références numériques [1] à [24] renvoient à la liste des publications de l'auteur page 79. Les références littérales du type [Aav02] renvoient à la bibliographie générale située à la fin du document (page 81).

²Voir la page <http://www.cmi.univ-mrs.fr/~fboyer/CHNS/index.html>

On a ainsi montré que ces schémas étaient bien posés (ce qui n'est pas immédiat dans le cadre non-linéaire) et on en a proposé l'analyse dans différents cadres. Dans la seconde partie du chapitre, on propose une amélioration importante de ces schémas pour prendre en compte d'éventuelles discontinuités spatiales dans les coefficients de l'équation. On propose une analyse d'erreur de ce nouveau schéma dont la performance est confirmée par les résultats numériques. Par ailleurs, le schéma étant très fortement non-linéaire (les coefficients du schéma sont définis par des relations implicites !) il est nécessaire de posséder un solveur effectif pour celui-ci. C'est la raison pour laquelle nous avons proposé une méthode de résolution itérative du schéma de type décomposition/coordination avec un terme d'augmentation hétérogène et anisotrope dont nous prouvons la convergence.

Le dernier chapitre rassemble la description de deux travaux en préparation. Dans le premier paragraphe, on étudie une classe de schémas volumes finis *cells-centered* originaux pour résoudre les équations de diffusion linéaires (typiquement l'équation de Laplace) sur des maillages non admissibles au sens VF usuel. On propose, contrairement à d'autres approches de la littérature, de définir les flux numériques de façon implicite en intégrant à nouveau l'équation sur un domaine bien choisi au voisinage de chaque arête. La matrice obtenue *in fine* n'est pas connue explicitement et nécessite l'utilisation d'un solveur itératif pour la résolution. Ce schéma a pour intérêt de montrer de bonnes performances sans augmenter le nombre d'inconnues, et on peut, par ailleurs, établir une estimation d'erreur dans un cadre relativement général.

Dans le dernier paragraphe de ce chapitre, on propose l'étude d'un modèle asymptotique d'écoulements dans les milieux poreux fracturés. Le problème que l'on doit résoudre *in fine* est une équation de Darcy dans la matrice poreuse, couplée avec un problème elliptique en dimension inférieure posé sur l'hypersurface de discontinuité modélisant la fracture. On montre que le problème est bien posé et on propose un schéma de type volumes finis pour résoudre ce problème pour une matrice poreuse 2D (et donc des fractures monodimensionnelles) dont on montre la convergence. On illustre également le bon comportement du modèle en comparant les solutions à des calculs sur le problème de départ.

Tous les résultats numériques de cette deuxième partie sont obtenus grâce à un code de calcul programmé en Fortran 90, en collaboration avec F. Hubert. Celui-ci permet de traiter les problèmes elliptiques linéaires et non-linéaires, les problèmes en milieux fracturés, les méthodes de décomposition de domaines de type Schwarz chaque domaine étant maillé de façon indépendante, ... Il contient une interface avec le mailleur EMC2³ développé à l'INRIA et avec le visualiseur GMV⁴ développé à Los Alamos.

³disponible à l'adresse <http://www-rocq1.inria.fr/gamma/cdrom/www/emc2/fra.htm>

⁴disponible à l'adresse <http://www-xdiv.lanl.gov/XCM/gmv/GMVHome.html>

Première partie

Modélisation et analyse en mécanique des fluides

La science ne consiste pas seulement à savoir ce qu'on doit ou peut faire, mais aussi à savoir ce qu'on pourrait faire quand bien même on ne doit pas le faire.

Le nom de la rose.
UMBERTO ECO

Les résultats présentés dans la première partie de ce mémoire sont consacrés à l'étude théorique et numérique de modèles d'écoulements complexes.

Dans le premier chapitre, je propose un bref résumé de mes travaux de thèse portant sur les modèles d'écoulements diphasiques de type Cahn-Hilliard. Ces modèles, dits à *interfaces diffuses* (voir [AMW98]) sont maintenant assez largement utilisés et étudiés (voir par exemple [LT98, Jac99, Jac00, KKL04a]) notamment car ils se prêtent bien à la prise en compte de situations complexes avec forts changements topologiques des interfaces et effets capillaires. Mes travaux dans ce domaine ont consisté en la justification formelle du coupage entre l'équation de Cahn-Hilliard et les équations de Navier-Stokes incompressibles (plus précisément dans le cadre quasi-incompressible selon [LT98]), en la simulation numérique d'un tel modèle et en l'étude théorique des équations couplées ainsi obtenues. En ce qui concerne les résultats d'existence, unicité et stabilité des solutions plusieurs situations distinctes sont considérées :

- Dans le cas homogène où on suppose que les phases sont de même densité (ou de densités suffisamment proches pour pouvoir se placer dans le cadre de l'hypothèse de Boussinesq), deux cas différents sont étudiés : celui où la mobilité (le coefficient de diffusion du potentiel chimique) est une fonction non-dégénérée du paramètre d'ordre et le potentiel de Cahn-Hilliard une fonction régulière, puis celui où la mobilité peut dégénérer et le potentiel de Cahn-Hilliard peut présenter des singularités de type logarithmique.
- Dans le cas non-homogène, i.e. quand les variations de densité sont prises en compte, le cas général est encore largement ouvert (on a seulement l'existence et l'unicité locale de solutions régulières). En revanche, dans le cadre faiblement non-homogène on peut établir des résultats globaux en temps par l'utilisation d'estimations d'énergie appropriées dépendant de la différence ε entre les densités.

Par ailleurs, dans les résultats expérimentaux de [MKH98] et les résultats numériques que j'ai obtenus, on peut constater l'apparition de structures en bandes parallèles à l'écoulement lorsque l'on provoque la décomposition spinodale d'un mélange soumis à un fort cisaillement. Ceci nous a donc conduit, avec P. Fabrie, à s'intéresser au comportement qualitatif des solutions de notre système (dans un cadre simplifié) dans une cellule de Couette et dans la limite de grand cisaillement. Il s'agit d'analyser une forme de stabilité des solutions monodimensionnelles (dans la direction transverse à l'écoulement) dans l'ensemble de toutes les solutions 2D quand le taux de cisaillement tend vers l'infini.

Ce premier chapitre se termine par la description des résultats obtenus (en collaboration avec L. Chupin et P. Fabrie) dans l'étude de la prise en compte d'éventuels comportements viscoélastiques des fluides dans un modèle couplé du type Cahn-Hilliard / Navier-Stokes. Il s'agit de coupler ces équations avec un modèle empirique de type Oldroyd. Les résultats numériques obtenus permettent de valider qualitativement le modèle.

Le second chapitre, en collaboration avec C. Lapuerta, est consacré à la généralisation du modèle de Cahn-Hilliard au cadre triphasique, le but (issu d'un problème industriel posé par l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire) étant de simuler des flux de bulles de gaz dans un mélange de deux phases liquides stratifiées. La construction d'un tel modèle nécessite des précautions pour assurer une bonne prise en compte des interfaces entre deux des phases dans le mélange triphasique. On établit des conditions nécessaires et suffisantes pour qu'un modèle de Cahn-Hilliard triphasique satisfasse ces bonnes propriétés. On prouve ensuite que ces modèles sont bien posés et on propose des illustrations numériques répondant à l'objectif initial de ce travail.

Dans un second temps, je présente mes travaux consacrés à l'étude de l'équation de transport et à leurs applications à l'analyse de conditions aux limites non-linéaires et non-réfléchissantes pour les équations de Navier-Stokes non-homogènes. De façon plus précise, le chapitre III est consacré à l'étude de l'équation de transport pour des champs peu réguliers non tangents au bord du domaine. On montre ainsi qu'il est possible de définir des traces pour les solutions de ce problème et que l'on peut donner un sens au problème de Cauchy/Dirichlet qui lui est associé et bien sur

le résoudre. Ces résultats sont basés sur l'extension de la théorie des solutions renormalisées de DiPerna et Lions à ce nouveau cadre. Grâce à la propriété de renormalisation démontrée, on établit en particulier la stabilité (au sens fort) des solutions (et de leurs traces) de l'équation de transport par rapport aux données initiales, aux données au bord et surtout par rapport au champ de vitesse. Ce chapitre se termine par des résultats nouveaux de régularité en espace des solutions faibles de l'équation de transport dont la démonstration est basée sur l'étude de la dépendance de la trace des solutions en fonction de la coordonnée normale près du bord du domaine.

Le chapitre IV est enfin dédié à l'analyse (avec P. Fabrie) du modèle de Navier-Stokes non-homogène avec conditions aux limites artificielles en sortie de l'écoulement. La condition aux limites que l'on étudie est non-linéaire et s'inspire de celle proposée dans un travail de Bruneau et Fabrie dans le cadre des écoulements homogènes. On donne ainsi une formulation faible du problème *à la Leray*, c'est-à-dire avec des fonctions test à divergence nulle, dont on montre qu'elle admet une solution. On établit ensuite l'existence de la pression puis on montre que la solution (ρ, v, p) ainsi obtenue satisfait la condition aux limites prescrite initialement, en un sens faible. Les résultats du chapitre précédent sont parmi les ingrédients essentiels utilisés dans ce travail, notamment dans le but d'établir de bonnes propriétés de compacité sur les solutions approchées du système.

Chapitre I

MODÈLES DE TYPE CAHN-HILLIARD POUR LES ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES INCOMPRESSIBLES

Cette partie de mon travail, dans le cadre général de la mécanique des fluides multiphasiques ou multicomposants, est consacrée à la modélisation et la simulation numérique d'une part et à l'étude théorique des modèles d'autre part. Il s'agit pour partie de mes travaux de thèse que je résume tout d'abord, et de travaux réalisés après celle-ci que je décris plus en détail.

1 Résumé des travaux de thèse

1.1 Dérivation du modèle et simulations numériques

L'équation de Cahn-Hilliard décrit, par le biais de la donnée d'une énergie libre contenant à la fois des termes d'énergie libre volumique et des termes capillaires, l'évolution d'un paramètre d'ordre (typiquement une concentration) dans un mélange de deux phases (voir l'introduction du chapitre II). La première partie de mon travail de thèse a consisté à justifier (*via* une étude dimensionnelle formelle) le modèle (I.1) ci-dessous couplant les équations de Navier-Stokes et l'équation de Cahn-Hilliard. Ce couplage permet, à travers l'approche "interface diffuse", de prendre en compte les phénomènes hydrodynamiques des écoulements diphasiques (tension de surface, forces capillaires, etc ...) mais aussi les phénomènes purement diphasiques de type *décomposition spinodale*. Le système complet s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \cdot \nabla \varphi - \frac{1}{Pe} \operatorname{div} \left(\frac{B(\varphi)}{\rho_\varepsilon} \nabla \left(\frac{\mu}{\rho_\varepsilon} \right) \right) = 0 \\ \mu = -\alpha^2 \Delta \varphi + F'(\varphi) \\ \rho_\varepsilon \left(\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla) v \right) - \frac{1}{Re} \operatorname{div} (2\eta(\varphi) D(v)) + \nabla p = \mathcal{K} \mu \nabla \varphi + \varepsilon \frac{1 - \varphi^2}{4} \nabla \left(\frac{\mu}{\rho_\varepsilon} \right) + \rho_\varepsilon g \\ \operatorname{div} (v) = 0, \end{cases} \quad (\text{I.1})$$

où φ est le paramètre d'ordre (normalisé de sorte que les valeurs physiques de celui-ci soient $-1 \leq \varphi \leq 1$), μ le potentiel chimique généralisé, ρ_ε la densité du mélange, v le champ de vitesse moyen et p la pression du mélange. Le paramètre α est l'épaisseur de l'interface et la tension de surface est contenue dans le coefficient de capillarité \mathcal{K} (voir aussi le chapitre II), enfin le comportement thermodynamique de l'interface est décrit *via* l'énergie libre volumique $F(\varphi)$ possédant, sous la température critique, une structure en double-puits modélisant les deux phases du mélange (voir la figure II.2). On prendra par exemple $F(\varphi) = \frac{\varphi^4}{4} - \frac{\varphi^2}{2}$. On ajoute à ce système des conditions aux limites de Neumann pour φ (hypothèse d'orthogonalité entre l'interface et le bord du domaine) et pour μ (absence de diffusion à travers les parois) ainsi que des conditions aux limites sur le champ de vitesse v .

Dans ce modèle, la densité adimensionnée ρ_ε est une fonction du paramètre d'ordre vérifiant

$$\rho_\varepsilon(\varphi) = 1 + \varepsilon \frac{\varphi - 1}{2}, \quad \text{pour tout } -1 \leq \varphi \leq 1, \quad (\text{I.2})$$

où ε est le contraste de densités entre les deux phases

$$\varepsilon = \frac{|\rho_1^0 - \rho_2^0|}{\max(\rho_1^0, \rho_2^0)}.$$

Pour l'étude mathématique du modèle, on étend cette fonction (de façon non-linéaire) à \mathbb{R} tout entier de sorte que l'on ait, indépendamment de ε :

$$|\rho'_\varepsilon|_\infty \leq \varepsilon, \quad \text{et } 0 < \rho_{\min} \leq \rho_\varepsilon(\varphi) \leq \rho_{\max}.$$

Cette manipulation est cruciale car, si on ne suppose pas la mobilité dégénérée ou l'énergie libre singulière, alors les solutions φ de l'équation de Cahn-Hilliard ne sont pas contraintes par le système à demeurer dans l'intervalle des valeurs physiques $[-1, 1]$ (voir par exemple [BB99]). On retrouve ici le fait que les équations paraboliques du quatrième ordre ne satisfont pas le principe du maximum. Il s'agit de l'un des inconvénients de ce type de modèle. Celui-ci est néanmoins maîtrisé par l'utilisation de coefficients de mobilité dégénérés (ce qui rend l'analyse plus délicate et moins complète).

D'un point de vue numérique, la discrétisation de ces équations est souple et permet notamment de prendre en compte de forts changements topologiques des interfaces sans traitement particulier, ce qui n'est pas le cas de modèles "à interface fine" pour lesquels la localisation précise de l'interface au cours du temps est nécessaire et peut poser des problèmes importants d'algorithmique par exemple. La description du modèle, des schémas utilisés ainsi que des premiers résultats numériques sont parus dans l'article [4].

1.2 Problèmes d'existence, unicité et stabilité des solutions du système couplé

Dans un second temps, j'ai mené l'analyse du modèle (I.1) obtenu ci-dessus dans le cadre des conditions aux limites de cisaillement en vitesse (tous les résultats généraux d'existence, unicité, et stabilité restent valables pour des conditions aux limites de type Dirichlet homogène par exemple). Plusieurs cas ont été envisagés et présentent des difficultés différentes.

Dans [2], on étudie le modèle simplifié obtenu en faisant l'hypothèse de Boussinesq, c'est-à-dire que l'on néglige les différences de densité des fluides dans tous les termes sauf dans le terme source dû à la gravité. On montre alors, sous l'hypothèse de non-dégénérescence de la mobilité (le coefficient de diffusion du paramètre d'ordre) l'existence (en 2D et 3D) et l'unicité (seulement en 2D bien entendu !) des solutions faibles globales du système ainsi que l'existence et l'unicité locale en 3D de solutions fortes. Dans le cas où la mobilité est susceptible de dégénérer (ce qui est un cas physique important) nous obtenons l'existence globale de solutions faibles et nous perdons l'unicité.

Dans ce même article, on montre la stabilité (en 2D et 3D) des états dits "métastables", c'est-à-dire les points de convexité de l'énergie libre F dans le modèle, sous faible cisaillement.

L'article [3] est consacré à l'étude du modèle complet dans lequel les différences de densité entre les phases sont prises en compte. Sans autre hypothèse, nous montrons l'existence et l'unicité locale de solutions très régulières à ce problème. C'est, à ce jour, le seul résultat disponible pour le modèle complet en toute généralité. En revanche dans ce même article, sous l'hypothèse que la différence de densité entre les deux phases est faible (cas dit *faiblement non-homogène*), nous montrons (Théorème I.1) l'existence d'une solution faible globale et d'une unique solution forte (globale en 2D et locale en 3D).

Pour être tout à fait précis, le résultat obtenu dans [3] concerne les conditions aux limites de cisaillement, mais la preuve s'adapte sans difficulté au cas de conditions aux limites de Dirichlet sur un ouvert régulier de \mathbb{R}^d . Dans l'énoncé suivant, on a usuellement noté H l'espace des champs de vecteurs de $(L^2(\Omega)^d)$ à divergence nulle et à trace normale nulle.

Théorème I.1

On suppose que le coefficient de mobilité B est une constante strictement positive. Soient $v_0^\varepsilon \in H$, $\varphi_0^\varepsilon \in H^3(\Omega)$, telle que $m(\varphi_0^\varepsilon)$ est indépendant de ε . On suppose qu'il existe C_0 indépendant de ε tel que

$$\|\varphi_0^\varepsilon\|_{H^1} + \|v_0^\varepsilon\|_{L^2} + \varepsilon^{\frac{1}{2}}\|\varphi_0^\varepsilon\|_{H^2} + \varepsilon^{\frac{3}{4}}\|\varphi_0^\varepsilon\|_{H^3} \leq C_0.$$

Alors, il existe $\varepsilon_0 > 0$ tel que pour tout $\varepsilon < \varepsilon_0$ il existe une solution faible $(\varphi_\varepsilon, v_\varepsilon)$ de (I.1) sur \mathbb{R}^+ pour la donnée initiale $(\varphi_0^\varepsilon, v_0^\varepsilon)$, satisfaisant

$$\|\varphi_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+; H^1)} + \varepsilon^{\frac{1}{2}}\|\varphi_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+; H^2)} + \varepsilon^{\frac{3}{4}}\|\varphi_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+; H^3)} + \|v_\varepsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+; L^2)} \leq C_1, \quad (\text{I.3})$$

$$\begin{aligned} \|\varphi_\varepsilon\|_{L^2(t_0, t_0+\tau; H^3)} + \varepsilon^{\frac{1}{2}} \left\| \frac{\partial \varphi_\varepsilon}{\partial t} \right\|_{L^2(t_0, t_0+\tau; L^2)} + \varepsilon^{\frac{3}{4}} \left\| \frac{\partial \varphi_\varepsilon}{\partial t} \right\|_{L^2(t_0, t_0+\tau; H^1)} \\ + \|\mu_\varepsilon\|_{L^2(t_0, t_0+\tau; H^1)} + \|v_\varepsilon\|_{L^2(t_0, t_0+\tau; H^1)} \leq C_2(\tau), \text{ pour tout } t_0 \geq 0, \tau > 0, \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

où $C_1, C_2(\tau), M(T)$ sont indépendants de ε et de t_0 .

De plus si φ_0^ε et v_0^ε convergent respectivement vers φ_0 dans H^1 et vers v_0 dans L^2 , alors (à une sous-suite près en 3D) on a la convergence $\rho_\varepsilon \rightarrow 1$, $\varphi_\varepsilon \rightarrow \varphi$ et $v_\varepsilon \rightarrow v$ où φ et v sont solutions du problème homogène.

L'élément clé de la preuve de ce résultat est l'obtention d'une estimation de l'énergie non-usuelle dans laquelle l'énergie proposée met en jeu des dérivées d'ordre élevé des inconnues mais pondérées par des puissances positives de ε . Par des techniques similaires, on montre l'existence et l'unicité de solutions fortes (globales en 2D et locales en 3D sur un temps indépendant de ε) dès que les données initiales (supposées indépendantes de ε) sont suffisamment régulières. Nous généralisons également dans ce travail le résultat de stabilité asymptotique des états métastables obtenu dans [2] à ce cadre faiblement non-homogène.

1.3 Etude asymptotique d'un modèle diphasique sous cisaillement

Dans l'article [5], en collaboration avec P. Fabrie, nous nous intéressons au comportement qualitatif d'un mélange diphasique en dessous du point critique, lorsqu'il est placé dans une cellule de Couette à grand cisaillement. Ce travail est motivé par les résultats expérimentaux de plusieurs auteurs (Hashimoto, etc ...) et par une collaboration avec des physico-chimistes (équipe d'A. Colin à Bordeaux).

Une cellule de Couette est formée de deux cylindres concentriques dont la différence des rayons est petite (d'ordre ~ 1) devant le rayon moyen de la cellule (d'ordre $\sim 1/\varepsilon$). Si on fait tourner les cylindres à des vitesses angulaires opposées et de l'ordre de 1, la vitesse de cisaillement obtenue est de l'ordre de $1/\varepsilon$.

Les inconnues décrivant le système sont la vitesse et la pression $u_\varepsilon, p_\varepsilon$ ainsi que le paramètre d'ordre φ_ε (fraction volumique d'un des constituants dans le mélange) et le potentiel chimique μ_ε du mélange décrivant les propriétés thermodynamiques du système.

Dans ces conditions, sous une hypothèse d'écoulement laminaire, l'écoulement est décrit en 2D (voir [4],[5]) par le système modèle qui s'écrit pour $(x, z) \in \Omega_\varepsilon =]0, 1/\varepsilon[\times]-1, 1[$, sous la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi_\varepsilon}{\partial t} + \frac{z}{\varepsilon} \partial_x \varphi_\varepsilon + u_\varepsilon \cdot \nabla \varphi_\varepsilon - \frac{1}{\mathcal{P}_\varepsilon} \Delta \mu_\varepsilon = 0, \\ \mu_\varepsilon = -\alpha^2 \Delta \varphi_\varepsilon + F'(\varphi_\varepsilon), \\ \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{R}_\varepsilon} \Delta u_\varepsilon + \nabla p_\varepsilon = \mathcal{K} \mu_\varepsilon \nabla \varphi_\varepsilon, \\ \operatorname{div}(u_\varepsilon) = 0, \end{cases}$$

où $F(\varphi) = \frac{\varphi^4}{4} - \frac{\varphi^2}{2}$ et $\varphi_\varepsilon, \mu_\varepsilon$ et u_ε vérifient des conditions aux limites homogènes de type Couette. Ce système apparaît comme le couplage non-linéaire entre une équation de Stokes (dans le cadre laminaire) et une équation de type Cahn-Hilliard décrivant l'évolution des interfaces dans le mélange.

On constate alors que si φ_0 est une solution de l'équation de Cahn-Hilliard 1D dans la direction transverse z ,

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi_0}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{P}_e} \partial_z^2 \mu_0 = 0, \\ \mu_0 = -\alpha^2 \partial_z^2 \varphi_0 + F'(\varphi_0), \\ \partial_z \varphi_0 = \partial_z^3 \varphi_0 = 0, \text{ sur } \{z = \pm 1\} \end{cases}$$

alors le couple $(\varphi_\varepsilon = \varphi_0, u_\varepsilon = 0)$ est solution du problème considéré plus haut. Ces solutions correspondent aux solutions en bandes que l'on observe expérimentalement et numériquement.

Si on note $|f|_{2,\varepsilon}$ la norme L^2 indépendante du domaine, c'est-à-dire

$$|f|_{2,\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{|\Omega_\varepsilon|}} \|f\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} = \sqrt{\varepsilon} \|f\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)},$$

alors on montre le résultat suivant :

Théorème I.2

On considère une famille de données initiales de la forme

$$\begin{cases} \varphi_\varepsilon(0) = \varphi_0^0 + \varepsilon \varphi_1^0, \\ u_\varepsilon(0) = u_0^0(z) e_x + w_\varepsilon^0, \end{cases}$$

pour les équations précédentes dans le domaine Ω_ε . On suppose que φ_1^0 est de moyenne nulle et qu'il existe une constante K_0 ne dépendant que de φ_0^0 telle que pour tout $\varepsilon > 0$, on ait

$$|\varphi_1^0|_{2,\varepsilon} + \varepsilon^{\frac{1}{2}} |\nabla \varphi_1^0|_{2,\varepsilon} \leq K_0, \text{ et } |w_\varepsilon^0|_{2,\varepsilon} \leq K_0 \varepsilon.$$

Alors, pour tout $T > 0$, il existe $\varepsilon_0(T) > 0$ et $C(T) > 0$ tels que pour tout $\varepsilon < \varepsilon_0$, la solution $(\varphi_\varepsilon, u_\varepsilon)$ du problème posé dans Ω_ε vérifie

$$\sup_{t \in [0, T]} \left(|\varphi_\varepsilon - \varphi_0 - \varepsilon \varphi_1|_{2,\varepsilon} + |u_\varepsilon - u_0|_{2,\varepsilon} \right) \leq C(T) \varepsilon, \quad (\text{I.5})$$

$$\sup_{t \in [0, T]} \left(|\nabla(\varphi_\varepsilon - \varphi_0 - \varepsilon \varphi_1)|_{2,\varepsilon} \right) \leq C(T) \varepsilon^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{I.6})$$

où u_0 et φ_1 sont solutions des équations linéaires

$$\frac{\partial u_0}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{R}e} \partial_z^2 u_0 = 0, \text{ dans }]-1, 1[, \text{ avec } u_0(t=0) = u_0^0, u_0(z = \pm 1) = 0,$$

et

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \frac{z}{\varepsilon} \partial_x \varphi_1 + u_0(z) \partial_x \varphi_1 - \frac{1}{\mathcal{P}_e} \Delta \mu_1 = 0 \text{ dans } \Omega_\varepsilon \\ \mu_1 = -\alpha^2 \Delta \varphi_1 + F''(\varphi_0) \varphi_1, \\ \text{avec } \frac{\partial \varphi_1}{\partial \nu} = \frac{\partial \mu_1}{\partial \nu} = 0 \text{ au bord et } \varphi_1(0) = \varphi_1^0. \end{cases}$$

On peut améliorer de façon significative ce résultat si φ_0 est en fait la solution constante 1D de l'équation de Cahn-Hilliard : $\varphi_0 \equiv \omega$. On trouve alors une estimation en $\varepsilon^{\frac{3}{4}}$ au lieu de ε dans (I.5) et en $\varepsilon^{\frac{3}{4}}$ au lieu de $\varepsilon^{\frac{1}{2}}$. Ceci montre donc que $\varphi_0 + \varepsilon \varphi_1$ est bien le développement asymptotique au premier ordre en ε de la solution φ_ε . Si de plus, ω est un état métastable du système, i.e. si $F''(\omega) > 0$ alors les estimations (I.5)-(I.6) sont valables pour $T = +\infty$.

On établit donc une hiérarchie des propriétés de persistance des solutions 1D transverses de notre système : les mélanges homogènes sont plus stables à grand cisaillement que les autres solutions de type "bandes", et parmi ceux-ci, les états métastables sont persistants sur tout temps, comme on pouvait s'y attendre.

2 Modèle d'écoulements diphasiques non-newtoniens

Dans le cadre de la thèse de L. Chupin (que j'ai co-encadrée avec P. Fabrie), nous avons étendu le modèle considéré à des phases viscoélastiques et proposé une méthode numérique efficace qui permette la simulation de ce type d'écoulements (voir [6]).

Le modèle développé et étudié dans ma thèse permet de décrire, à l'aide d'une formulation par paramètre d'ordre, des écoulements de mélanges diphasiques à interface diffuse. Dans certaines applications, on s'intéresse à des écoulements d'une phase polymère dans un solvant, ou plus généralement de fluides possédant des caractéristiques non-newtoniennes (le propergol par exemple).

Le modèle s'obtient de façon similaire au modèle newtonien, en écrivant les lois empiriques de comportement viscoélastique (de type Maxwell, Oldroyd, etc ...) pour chacune des phases, puis en regroupant les résultats obtenus afin d'écrire une équation globale sur le tenseur des contraintes. Une mise sous forme adimensionnelle des équations permet enfin de dégager, dans une certaine plage de valeurs des divers paramètres, un système d'équations fidèle à la physique et néanmoins exploitable.

On montre ainsi que les équations s'écrivent en toute généralité de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \cdot \nabla \varphi - \frac{1}{Pe} \operatorname{div} \left(\frac{B(\varphi)}{\rho} \nabla \left(\frac{\mu}{\rho} \right) \right) = 0 \\ \mu = -\alpha^2 \Delta \varphi + F'(\varphi) \\ \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) - \frac{1}{Re} \operatorname{div} (2\eta(\varphi)(1-r(\varphi))D(v)) + \nabla p - \operatorname{div}(\sigma) = \rho g + \mathcal{K}\mu \nabla \varphi \\ \operatorname{div}(v) = 0 \\ \frac{D\sigma}{Dt} + \frac{1}{We(\varphi)}\sigma = \frac{1}{We(\varphi)}2\eta(\varphi)r(\varphi)D(v). \end{array} \right. \quad (\text{I.7})$$

Les inconnues sont à nouveau le paramètre d'ordre φ , le potentiel chimique μ , la vitesse v et la pression p auxquelles s'ajoute un tenseur de contraintes non-newtonien σ . L'équation vérifiée par σ est de type Oldroyd et prend en compte les propriétés de relaxation et de retard des phases viscoélastiques. Dans cette équation le paramètre $r(\varphi)$ est un paramètre de retard (qui dépend du rapport entre le temps de relaxation et le temps de retard de la phase de composition φ) et le nombre de Weissenberg $We(\varphi)$ est un temps de relaxation du système. Enfin la dérivation convective $\frac{D}{Dt}$ qui y apparaît s'écrit en toute généralité sous la forme

$$\frac{D\sigma}{Dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + v \cdot \nabla \sigma - W(v) \cdot \sigma + \sigma \cdot W(v) - a(D(v) \cdot \sigma + \sigma \cdot D(v)),$$

où $D(v)$ et $W(v)$ représentent respectivement les parties symétriques et anti-symétriques du tenseur ∇v et a est un paramètre rhéologique empirique choisi en fonction de la situation physique que l'on souhaite modéliser.

Divers aspects de l'analyse de ce système ont été abordés par L. Chupin dans sa thèse [Chu03, Chu04, Chu05].

Pour la simulation numérique de ce système, nous avons repris les schémas utilisés dans mes travaux antérieurs [4] concernant la partie Cahn-Hilliard et Navier-Stokes du système : en particulier le schéma antidiffusé de P. Rasetarinera (voir par exemple [BFR97]) pour les termes de transport. Pour traiter l'équation d'Oldroyd et son couplage avec l'équation de Navier-Stokes, nous proposons un schéma découplé basé sur une approximation "exponential fitting" pour σ . Nous prouvons que cette discrétisation en temps est quasi-inconditionnellement stable (la seule condition est $\delta t \leq \frac{(1-r)We^2 Re}{4r^2}$, qui s'avère très raisonnable en pratique). Par ailleurs le schéma dégénère correctement lorsque les phases sont newtoniennes ou lorsque le temps de relaxation de l'une des phases tend vers 0.

Nous retrouvons alors avec ce modèle un certain nombre de propriétés qualitatives connues de tels écoulements. Nous validons également notre couplage Navier-Stokes / Oldroyd dans le cas monophasique.

A titre d'exemple, la figure I.1 montre les résultats des simulations d'une décomposition spinodale sous cisaillement. A l'état initial les deux fluides sont mélangés quasi-uniformément, puis on abaisse la température pour passer sous la température critique et provoquer la séparation des phases. Simultanément on déclenche un écoulement de cisaillement dans la direction horizontale en imposant les conditions aux limites adéquates sur les bords supérieurs et inférieurs du domaine de calcul (et la périodicité dans la direction horizontale).

Les différences de comportements qualitatifs sont claires et correspondent aux observations expérimentales. Tout d'abord, on remarque dans les deux cas que les phases tendent à se stratifier dans la direction de l'écoulement mais

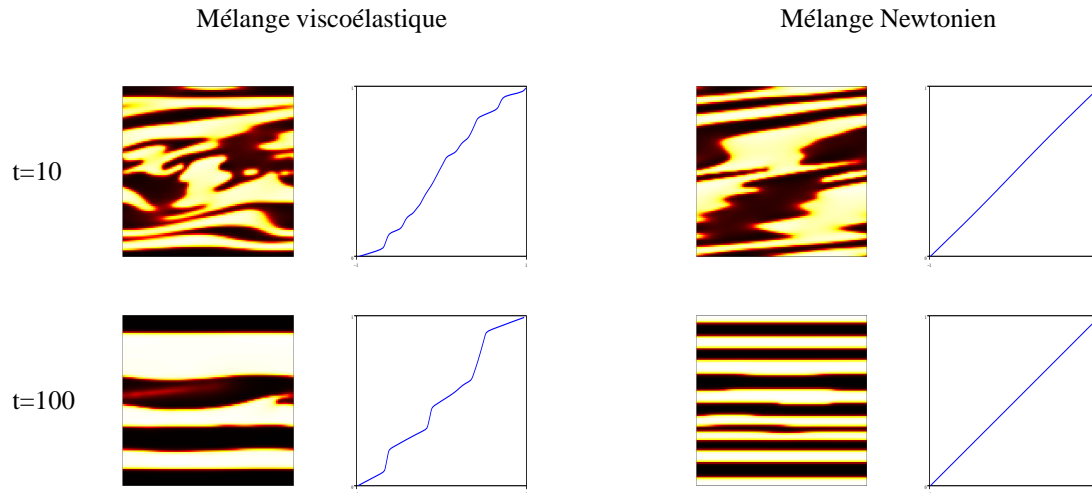


FIG. I.1 – Décomposition spinodale sous cisaillement (composition du mélange et profil de vitesse)

dans le cas non-newtonien la taille caractéristique des bandes horizontales est supérieure à celle obtenue dans le cas newtonien. Par ailleurs, le profil de vitesse linéaire correspondant à l'écoulement de cisaillement permanent apparaît être l'état limite en temps grand dans le cas newtonien. Dans le cas non-newtonien, dans une certaine plage de paramètres, ce profil linéaire de vitesse n'est pas un état stable du système et on observe plutôt en temps grand un profil de vitesse qui a la forme d'une ligne brisée dont les pentes sont calculables analytiquement (au moins pour un modèle simplifié) et prennent au plus 3 valeurs.

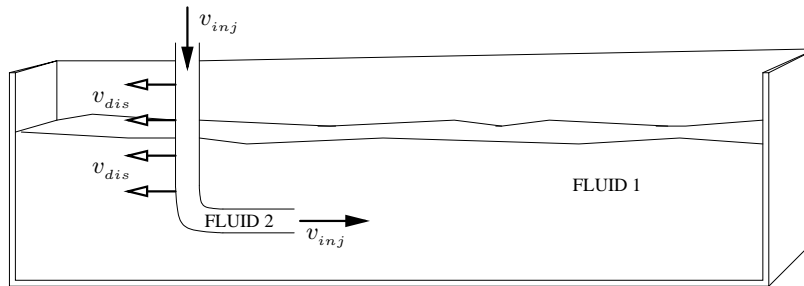


FIG. I.2 – Description de l'expérience de création de fibres

D'autres exemples sont donnés dans [6], notamment concernant la fabrication de fibres viscoélastiques qui est un problème fondamental dans l'industrie chimique et pharmacologique (voir la représentation schématique de l'expérience, figure I.2). En particulier, on retrouve le fait que les fibres viscoélastiques ont tendance à se rompre beaucoup plus vite lors de leur fabrication que les fibres ayant des propriétés newtoniennes. Cette situation est illustrée dans le figure I.3 par la comparaison des diagrammes de phase dans les deux situations. Dans le cadre expérimental on obtient le diagramme de phase donné dans la figure I.4 qui est en bonne cohérence avec les résultats numériques.

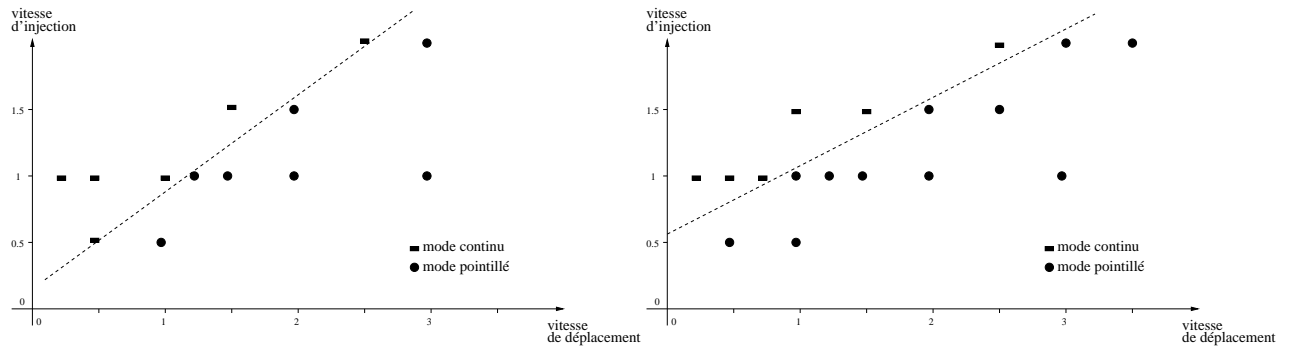


FIG. I.3 – Diagrammes de phase obtenus numériquement pour le modèle newtonien et le modèle viscoélastique

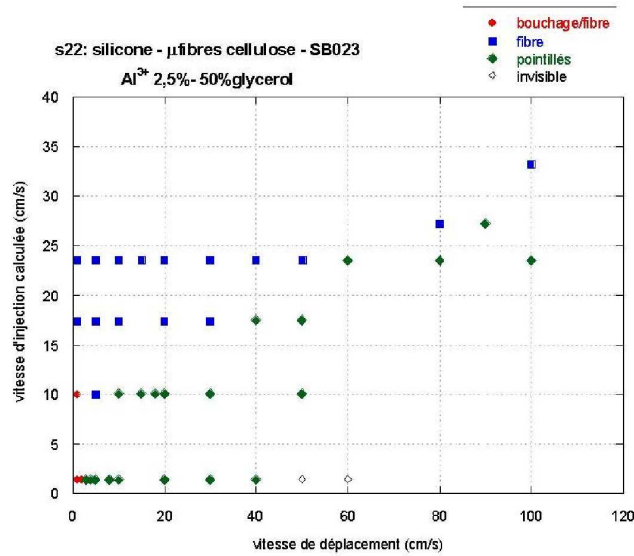


FIG. I.4 – Diagrammes de phase obtenus expérimentalement (sources : A. Colin, Université Bordeaux 1)

Chapitre II

MODÈLES DE CAHN-HILLIARD À TROIS CONSTITUANTS NON-MISCIBLES

En collaboration avec Céline Lapuerta, j'ai introduit et étudié dans [12] (voir également [22], [24]) un nouveau modèle de type Cahn-Hilliard pour la simulation numérique directe d'écoulements à trois composants.

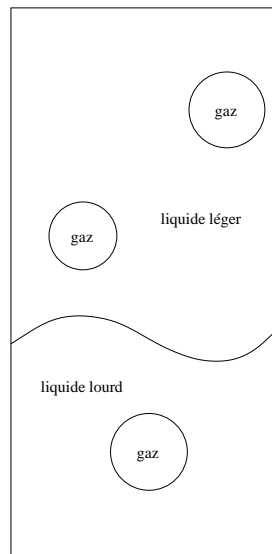


FIG. II.1 – Bulles de gaz traversant une interface liquide/liquide

Plus précisément, le contexte général de la thèse de C. Lapuerta est l'évaluation par simulation numérique directe de coefficients d'échange thermique entre deux phases liquides en présence d'un flux de bulles gazeuses dans des situations extrêmes telles que l'on peut en rencontrer lors d'éventuels accidents nucléaires graves dans un réacteur. Les valeurs estimées de ces coefficients servent de données en entrée de codes à zones permettant la simulation à une plus grande

échelle de la totalité de l'accident. A ce titre, il est essentiel de pouvoir simuler des écoulements de bulles gazeuses en présence de deux autres constituants liquides que sont les deux phases (métallique et oxyde) du corium (voir [Lap06]). La situation est schématisée dans la Figure II.1.

Le cadre général des modèles à interface diffuse est bien adapté à ce type de problèmes (en comparaison par exemple avec des méthodes de type *level-set*). Ils permettent notamment de rendre compte, sans grand effort numérique et algorithmique particulier, de changements topologiques importants dans les interfaces. Bien entendu, un des prix à payer est par exemple la nécessité de mailler de façon suffisamment fine pour assurer la qualité de la discrétisation dans les interfaces.

Bien que la littérature concernant les modèles de type Cahn-Hilliard multi-constituants soit assez riche, les modèles disponibles sont plutôt adaptés à des situations différentes, en particulier celles où les changements de phase sont à prendre en compte. Pour modéliser des situations typiques de la Figure II.1, on doit plutôt voir notre problème triphasique comme un problème 3 fois diphasique. Autrement dit, nous avons besoin d'un système d'équations le plus simple possible susceptible de simuler correctement la coexistence de 3 constituants et donc de 3 types d'interfaces (avec des tensions de surface différentes) et l'évolution de chacune d'entre elles sous écoulement. L'objet de ce chapitre est de décrire la construction d'un tel modèle, son analyse mathématique et enfin d'illustrer ses propriétés sur quelques résultats numériques.

Bref retour sur le modèle diphasique - Dans le cadre diphasique, le modèle de Cahn-Hilliard est déterminé par l'expression de l'énergie libre totale en fonction de la concentration $c \in [0, 1]$ de l'un des constituants dans le mélange (le paramètre d'ordre φ utilisé dans le chapitre précédent n'est autre que $\varphi = 2c - 1$). Celle-ci s'écrit usuellement

$$\mathcal{F}_{\sigma, \varepsilon}^{\text{diph}}(c) = \int_{\Omega} 12 \frac{\sigma}{\varepsilon} c^2 (1-c)^2 + \frac{3}{4} \sigma \varepsilon |\nabla c|^2 dx, \quad (\text{II.1})$$

où σ est la tension de surface entre les deux phases et ε l'épaisseur de l'interface.

Pourquoi est-il légitime de nommer ainsi ces deux paramètres ? Pour cela, calculons l'état d'équilibre c_0 du système sur \mathbb{R} par exemple (ce qui revient à considérer une interface plane en multi-D). L'équation d'Euler-Lagrange s'écrit

$$\begin{cases} -\frac{3}{2} \sigma \varepsilon c_0'' + 24 \frac{\sigma}{\varepsilon} c_0 (1-c_0)(1-2c_0) = 0, \\ \lim_{+\infty} c_0 = 1 \\ \lim_{-\infty} c_0 = 0, \end{cases}$$

Ce qui se résout de façon unique (à translations près) par

$$c_0(x) = 0.5 \left(1 + \tanh \left(\frac{2x}{\varepsilon} \right) \right).$$

On constate donc bien que ε est la taille caractéristique de la zone de transition entre les valeurs 0 et 1. Par ailleurs si on calcule l'énergie totale contenue dans cet état d'équilibre, on obtient

$$\mathcal{F}_{\sigma, \varepsilon}^{\text{diph}}(c_0) = \sigma,$$

ce qui justifie l'appellation "tension de surface" du système pour le paramètre σ .

Un point crucial est que ces deux paramètres sont donnés par la physique et interviennent dans le modèle de façon explicite. Par ailleurs, ces deux quantités peuvent être choisies indépendamment l'une de l'autre. On peut ainsi, dans les simulations numériques, augmenter l'épaisseur d'interface (afin de pouvoir utiliser des maillages de taille raisonnable) sans modifier la quantité d'énergie contenue dans l'interface.

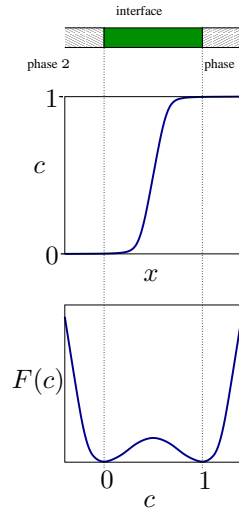


FIG. II.2 – Énergie libre et profil d'interface à l'équilibre

1 Modèles à trois constituants non miscibles. Existence et unicité des solutions

En s'inspirant du cadre diphasique résumé ci-dessus, nous cherchons à modéliser des systèmes triphasiques non miscibles par la donnée d'une énergie libre totale de la forme

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c_1, c_2, c_3) = \int_{\Omega} \frac{12}{\varepsilon} F(c_1, c_2, c_3) + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_1 |\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_2 |\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_3 |\nabla c_3|^2 dx, \quad (\text{II.2})$$

où c_1, c_2 et c_3 sont les fractions volumiques de chacune des espèces dans le mélange et ε est l'épaisseur de l'interface. Pour l'instant $\Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ est un paramètre à déterminer ainsi que l'énergie libre volumique F . Le mélange étant supposé parfait, les trois concentrations sont sujettes à la contrainte

$$\mathbf{C} = (c_1, c_2, c_3) \in \mathcal{S} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ (c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3, c_1 + c_2 + c_3 = 1 \right\}.$$

Avant de discuter le choix de Σ et F (ce qui est en fait le nerf de la guerre !), il faut écrire les équations d'évolution correspondant à un flot de gradient, au sens du produit scalaire de H^{-1} , de la fonctionnelle \mathcal{F} sous contrainte de conservation de la masse de chaque composant et sous la contrainte $c_1 + c_2 + c_3 = 1$ partout. On montre ainsi, par un argument de type multiplicateur de Lagrange, que le système d'équations à considérer est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial c_i}{\partial t} = \text{div} \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \\ \mu_i = \frac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F(\mathbf{C}) - \partial_j F(\mathbf{C})) \right) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i, \end{cases} \quad (\text{II.3})$$

où M_0 est un coefficient de diffusion (appelé la mobilité) qui est un paramètre du système (lié au temps caractéristique de la diffusion moléculaire dans le système) et qui peut éventuellement dépendre des concentrations c_1, c_2 et c_3 . Le coefficient Σ_T est défini (dès que cela a un sens) par

$$\frac{3}{\Sigma_T} = \frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3}.$$

La première question naturelle que l'on se pose est : sous quelles conditions le système (II.3) est-il bien posé ? Pour répondre à cette question il faut tout d'abord s'assurer de la coercivité des termes capillaires dans l'énergie $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}$. En effet, si cette coercivité n'est pas assurée alors, formellement, il est possible de diminuer l'énergie totale à volonté *via*

la création d'interfaces d'énergies négatives ! Notons que la coercivité est automatique dès que tous les coefficients de capillarité Σ_i sont strictement positifs mais le cas où l'un de ces coefficients est négatif est un cas important dans les applications et que nous souhaitons pouvoir traiter. Le résultat obtenu est le suivant.

Proposition II.1

Soit $\Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3) \in \mathbb{R}^3$. Il existe $\underline{\Sigma} > 0$ tel que pour tout $n \geq 1$, on ait

$$\Sigma_1 |\xi_1|^2 + \Sigma_2 |\xi_2|^2 + \Sigma_3 |\xi_3|^2 \geq \underline{\Sigma} \left(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 + |\xi_3|^2 \right), \quad (\text{II.4})$$

pour tout $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in (\mathbb{R}^n)^3$, tel que $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 0$, **si et seulement si** les deux conditions suivantes sont vérifiées

$$\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0, \quad (\text{II.5})$$

$$\Sigma_i + \Sigma_j > 0, \quad \forall i \neq j. \quad (\text{II.6})$$

On considère maintenant les hypothèses suivantes sur F :

– F est de classe \mathcal{C}^2 et vérifie

$$F(\mathbf{C}) \geq 0, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathcal{S}, \quad (\text{II.7})$$

– Il existe $B_1, B_2 > 0$ telles que

$$|F(\mathbf{C})| \leq B_1 |\mathbf{C}|^p + B_2, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathcal{S}, \quad (\text{II.8})$$

$$|DF(\mathbf{C})| \leq B_1 |\mathbf{C}|^{p-1} + B_2, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathcal{S}, \quad (\text{II.9})$$

$$|D^2F(\mathbf{C})| \leq B_1 |\mathbf{C}|^{p-2} + B_2, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathcal{S}, \quad (\text{II.10})$$

avec $p = 6$ si $d = 3$, et $2 \leq p < +\infty$ si $d = 2$.

– Il existe $D_1 \geq 0$ tel que

$$(D^2F(\mathbf{C})\xi, \xi) \geq -D_1 (1 + |\mathbf{C}|^q) |\xi|^2, \quad \forall \mathbf{C} \in \mathcal{S}, \forall \xi \in \mathbb{R}^3, \quad (\text{II.11})$$

où $0 \leq q < 4$ si $d = 3$ et $0 \leq q < +\infty$ si $d = 2$.

Les premières hypothèses sont standard dans la littérature sur les équations de Cahn-Hilliard. La dernière, indispensable pour prouver la régularité et donc l'unicité des solutions, est moins usuelle car bien souvent la partie non convexe de l'énergie est quadratique, ce qui correspond au cas $q = 0$. Néanmoins, comme on le verra dans la suite, les énergies que l'on va être amené à considérer ne sont pas de la forme *quadratique+convexe* ce qui nécessite de mener l'analyse du modèle sous l'hypothèse plus générale (II.11).

En notant $\mathbb{H}_{\mathcal{S}}^1$ l'espace des $\mathbf{C} \in (H^1(\Omega))^3$ tels que $\mathbf{C}(x) \in \mathcal{S}$, pour presque tout $x \in \Omega$, notre résultat d'existence et unicité de solutions pour le problème (II.3) est alors le suivant.

Théorème II.2

Soit Ω un domaine régulier borné de \mathbb{R}^d , $d = 2$ ou 3 . On suppose que Σ vérifie les conditions (II.5), (II.6) et que l'énergie volumique F vérifie les hypothèses (II.7)-(II.11). On suppose également que la mobilité M_0 est une constante strictement positive.

Alors, pour toute donnée initiale $\mathbf{C}^0 \in \mathbb{H}_{\mathcal{S}}^1$, il existe une unique solution faible (\mathbf{C}, μ) de (II.3) sur $[0, +\infty[$ pour la donnée initiale \mathbf{C}^0 et telle que

$$\mathbf{C} \in L^\infty(0, +\infty; \mathbb{H}_{\mathcal{S}}^1) \cap L_{loc}^2(0, +\infty; (H^3(\Omega))^3) \cap \mathcal{C}^0([0, +\infty[; \mathbb{H}_{\mathcal{S}}^1), \quad (\text{II.12})$$

$$\mu \in L^2(0, +\infty; (H^1(\Omega))^3). \quad (\text{II.13})$$

Dans le cas où la mobilité est une fonction positive, régulière et bornée des paramètres d'ordre et qui ne s'annule pas, le résultat est encore vrai en dimension 2. En dimension 3, on peut toujours obtenir l'existence mais l'unicité demeure un problème ouvert.

Bien que la motivation de ce travail réside essentiellement dans les modèles dits *consistants* que l'on va décrire par la suite, ce résultat a une portée assez générale et peut s'appliquer potentiellement à de nombreux modèles de Cahn-Hilliard triphasiques. Les points nouveaux dans la démonstration sont essentiellement la possibilité de considérer des

coefficients de capillarité Σ_i négatifs (sous la condition (II.5)) et des énergies libres dont les termes non convexes peuvent être d'ordre relativement élevé.

2 Modèles triphasiques consistants

Revenons maintenant à la question de la détermination de l'énergie libre volumique F et des paramètres Σ en vue des applications à des écoulements de trois composants non-miscibles. Nous souhaitons modéliser une situation physique dans laquelle les 3 interfaces entre les 3 constituants coexistent sans changement de phase, l'un des constituants pouvant éventuellement être absent dans une certaine zone de l'espace (c'est même le cas générique, voir la figure II.1). On peut donc résumer les contraintes que l'on doit imposer à notre modèle sous la forme de deux propriétés :

Définition II.3

Le modèle défini par (II.2) et (II.3) est dit algébriquement consistant avec les systèmes diphasiques de tensions de surface σ_{12} , σ_{13} , σ_{23} respectivement si les deux propriétés suivantes sont vérifiées :

(P₁) Quand la phase i est absente, c'est-à-dire si $c_i = 0$, l'énergie totale $\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c_1, c_2, c_3)$ du système doit être exactement égale à l'énergie totale du modèle diphasique correspondant aux deux autres phases

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c, 1 - c, 0) = \mathcal{F}_{\sigma_{12}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), \quad \forall c \in H^1(\Omega),$$

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(c, 0, 1 - c) = \mathcal{F}_{\sigma_{13}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), \quad \forall c \in H^1(\Omega),$$

$$\mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}}(0, c, 1 - c) = \mathcal{F}_{\sigma_{23}, \varepsilon}^{\text{diph}}(c), \quad \forall c \in H^1(\Omega).$$

(P₂) Quand le composant i n'est pas présent dans le mélange à l'instant initial, il ne doit pas apparaître au cours du temps. En d'autres termes, les solutions dans \mathbb{H}_S^1 du système (II.3) doivent satisfaire, pour tout $i \in \{1, 2, 3\}$,

$$c_i(0) = 0 \implies c_i(t) = 0, \quad \forall t \geq 0.$$

Ces propriétés peuvent sembler parfaitement naturelles et intuitives néanmoins la plupart des modèles disponibles dans la littérature et utilisés dans des situations similaires pour des calculs numériques ne vérifient pas ces propriétés (voir [KL05]). Nous montrons dans la section 4 que des énergies \mathcal{F} ne vérifiant pas ces propriétés mènent à des résultats numériques non satisfaisants.

Les tensions de surface σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} des trois types d'interface présent dans le système étant fixées, on peut maintenant caractériser tous les choix des coefficients de capillarité Σ et de l'énergie libre volumique F produisant un modèle algébriquement consistant au sens précédent.

Théorème II.4

Une énergie libre régulière F et des coefficients de capillarité Σ_1 , Σ_2 et Σ_3 fournissent un modèle triphasique algébriquement consistant avec les situations diphasiques correspondant aux tensions de surface σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} si et seulement si

$$\forall i, \quad \Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}, \quad \text{avec } \{i, j, k\} = \{1, 2, 3\}, \quad (\text{II.14})$$

et

$$F(\mathbf{C}) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3) \\ + c_1^2c_2^2c_3^2 G(\mathbf{C}) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1) H(\mathbf{C}), \quad \forall \mathbf{C} \in \mathbb{R}^3,$$

où G et H sont deux fonctions régulières.

Il convient de remarquer que, la contrainte $c_1 + c_2 + c_3 = 1$ étant vérifiée en tout point et à tout instant par les solutions dans \mathbb{H}_S^1 , le terme contenant le facteur H n'intervient jamais dans les équations et on peut donc supposer $H = 0$ dans la suite sans perte de généralités. Par ailleurs, les coefficients Σ_i vérifiant (II.14) sont connus dans la littérature comme

étant les opposés des *coefficients d'étalement*, que l'on retrouve donc ici apparaître par le calcul. Par ailleurs, ils vérifient

$$\Sigma_i + \Sigma_j = 2\sigma_{ij}, \quad \forall i \neq j.$$

L'un (au plus d'après la relation précédente) de ces coefficients Σ_i peut être négatif dans un certain nombre de situations dites *d'étalement total*. Nous verrons que le modèle proposé est capable de gérer cette situation dans de nombreux cas, ce qui est une avancée importante en comparaison des modèles connus précédemment.

Les exemples usuels d'énergies libres F que nous utilisons en pratique sont

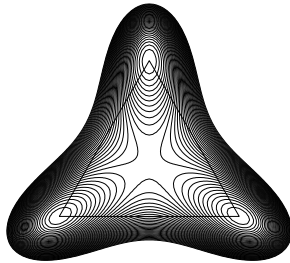
$$\begin{aligned} F_0(\mathbf{C}) &= \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3) \\ &= \frac{\Sigma_1}{2}c_1^2(c_2 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_2}{2}c_2^2(c_1 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_3}{2}c_3^2(c_1 + c_2)^2, \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

qui est, en un certain sens, la plus simple autorisée par le théorème II.4.

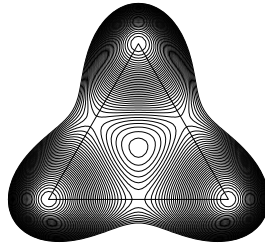
Certains travaux dans la littérature (voir notamment [KKL04b, KL05, GNS98, GNS99]) utilisent l'énergie libre définie par la fonction

$$\tilde{F}_0 = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2, \quad (\text{II.16})$$

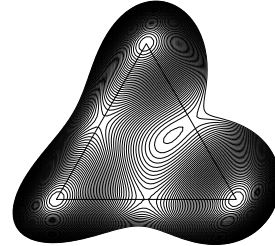
qui ne fournit pas un modèle consistant d'après le théorème ci-dessus. Ceci est confirmé par les résultats numériques donnés dans la section 4. On peut également observer la différence qualitative des portraits de phase de \tilde{F}_0 et F_0 en traçant les isovaleurs de ces fonctions dans le triangle dit *de Gibbs*. Dans cette représentation (figure II.3) chaque point du plan est représenté par ces coordonnées barycentriques $(c_1, c_2, c_3) \in \mathcal{S}$ dans un triangle équilatéral auxquelles on associe la valeur $F(c_1, c_2, c_3)$. Chacun des sommets du triangle représente une des trois phases du mélange.



$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 4, F = \tilde{F}_0$$



$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 4, F = F_0$$



$$\Sigma_1 = 6, \Sigma_2 = 8, \Sigma_3 = 4, F = F_0$$

FIG. II.3 – Isovaleurs de l'énergie libre volumique dans le triangle de Gibbs

On voit bien que l'énergie F_0 a un maximum local au centre du triangle et que les cotés du triangle sont des trajectoires d'énergie minimale liant deux sommets. Ce n'est pas le cas pour l'énergie \tilde{F}_0 ce qui illustre le mauvais comportement du modèle pour ce choix. En résumé, l'énergie F_0 a bien une structure en "triple-puits" mais pas \tilde{F}_0 .

Ainsi, quand tous les coefficients Σ_i sont positifs, le choix $F = F_0$ satisfait toutes les hypothèses du théorème II.2 et tout indique donc d'utiliser cette énergie volumique (pour laquelle la résolution numérique du problème est plus simple). En revanche, dans les cas d'étalement total, i.e. quand l'un des Σ_i est négatif alors cette énergie n'est pas utilisable, par exemple parce que l'hypothèse (II.7) n'est jamais vérifiée dans ce cas (il peut même se produire que F_0 ne soit pas minorée sur l'hyperplan \mathcal{S}). Dans cette situation il est nécessaire d'introduire l'énergie

$$F_\Lambda(\mathbf{C}) = F_0(\mathbf{C}) + \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2, \quad (\text{II.17})$$

où Λ est un paramètre réel positif (on retrouve (II.15) dès que $\Lambda = 0$) et même une forme un tout petit peu modifiée (pour des raisons techniques dues à la dimension 3 d'espace) décrite en détail dans [12]. On peut alors montrer :

Proposition II.5

Soient σ_{12} , σ_{13} et σ_{23} trois réels strictement positifs et Σ_1, Σ_2 et Σ_3 définis par (II.14). Pour tout $\Lambda > 0$, l'énergie libre volumique F_Λ définie par (II.15) et (II.17) est minorée sur l'hyperplan \mathcal{S} et on a

$$\lim_{\Lambda \rightarrow +\infty} \left(\inf_{\mathcal{S}} F_\Lambda \right) = 0.$$

De plus, il existe $\Lambda_0 > 0$ tel que $\inf_{\mathcal{S}} F_\Lambda = 0$ pour tout $\Lambda \geq \Lambda_0$ si et seulement si on a

$$\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0.$$

Ainsi sous la condition (II.5), l'énergie F_Λ vérifie toutes les hypothèses du théorème II.2 (au moins en 2D, le cas tridimensionnel nécessitant une légère modification de F_Λ) et fournit un modèle algébriquement consistant avec les modèles diphasiques sous-jacents. De plus, toujours pour Λ assez grand, on retrouve bien une forme en triple-puits.

Une fois que l'expression de l'énergie F est choisie (en fonction de la situation étudiée comme expliqué ci-dessus), les équations (II.3) peuvent être réduites à seulement deux inconnues c_1 et c_2 , la troisième inconnue c_3 étant exprimée par $c_3 = 1 - c_1 - c_2$. Il est crucial de noter qu'il ne faut pas effectuer l'élimination de la troisième inconnue au début de l'analyse car dans ce cas, le modèle obtenu peut alors dépendre de la variable que l'on a choisi d'éliminer (3 choix sont bien sûr possibles). Ainsi, dans certains travaux de la littérature (voir [KKL04b] par exemple), il est proposé qu'à partir d'une énergie donnée $F(c_1, c_2, c_3)$, celle-ci soit restreinte à la variété des triplets admissibles, autrement dit l'énergie réduite à deux variables $\bar{F}(c_1, c_2) = F(c_1, c_2, 1 - c_1 - c_2)$ est considérée et les équations d'évolution pour c_1 et c_2 sont obtenues de façon classique. Cette approche fait jouer à la troisième phase un rôle particulier par rapport aux deux autres, ce qui dissymétrise la situation et n'a pas lieu d'être.

Au final, on peut récrire notre système, par exemple dans le cas où l'énergie F choisie est $F = F_0$, sous une forme plus agréable et plus simple qui est

$$\begin{cases} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{2M}{\varepsilon \Sigma_1} \Delta \mu_1 \\ \mu_1 = \frac{2\Sigma_1}{\varepsilon} c_1(1 - c_1)(1 - 2c_1) - \frac{12}{\varepsilon} \frac{\Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_3}{\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3} c_1 c_2 (1 - c_1 - c_2) - \frac{\varepsilon \Sigma_1}{2} \Delta c_1, \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{2M}{\varepsilon \Sigma_2} \Delta \mu_2 \\ \mu_2 = \frac{2\Sigma_2}{\varepsilon} c_2(1 - c_2)(1 - 2c_2) - \frac{12}{\varepsilon} \frac{\Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_3}{\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3} c_1 c_2 (1 - c_1 - c_2) - \frac{\varepsilon \Sigma_2}{2} \Delta c_2, \end{cases} \quad (\text{II.18})$$

μ_1 et μ_2 représentent les potentiels chimiques des phases 1 et 2. La troisième phase a pour concentration $c_3 = 1 - c_1 - c_2$ et pour potentiel chimique $\mu_3 = -\frac{\Sigma_3}{\Sigma_1} \mu_1 - \frac{\Sigma_3}{\Sigma_2} \mu_2$.

Si on résume les résultats obtenus, sous la condition (II.5), les modèles dits "algébriquement consistants" construits à partir de l'énergie volumique $F = F_\Lambda$ vérifient les propriétés suivantes :

- 1) Le modèle est bien posé sur l'hyperplan des contraintes \mathcal{S} .
- 2) Le modèle peut simuler les situations diphasiques. Autrement dit, tout triplet par exemple de la forme $(0, c_2, 1 - c_2)$ est solution du système et c_2 vérifie alors une équation de type Cahn-Hilliard avec une épaisseur d'interface ε et une tension de surface σ_{23} . Autrement dit, le modèle est vraiment une extension des 3 équations de Cahn-Hilliard diphasiques que l'on pourrait écrire en mettant en présence deux des trois espèces considérées.
- 3) Les équations satisfaites par c_1 , c_2 et c_3 sont formellement équivalentes. En particulier, aucune des trois espèces ne joue de rôle particulier par rapport aux deux autres dans le système.
- 4) Le modèle satisfait l'égalité d'énergie

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}_{\Sigma, \varepsilon}^{\text{triph}} + \frac{2M}{\varepsilon} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{\Sigma_i} \int_{\Omega} |\nabla \mu_i|^2 dx = 0,$$

le terme dissipatif étant bien positif, même dans le cas d'étalement total, d'après la proposition II.1 et la relation algébrique entre les μ_i .

3 Consistance dynamique

Le modèle proposé a été établi pour qu'il vérifie *algébriquement* les propriétés (P_1) et (P_2) de la Définition II.3 qui assurent la cohérence du modèle avec les situations diphasiques. Une question naturelle est de savoir si cette cohérence est stable vis à vis des perturbations (des erreurs numériques par exemple). Nous montrons que ceci est vrai au sens suivant.

Théorème II.6

Toujours sous la condition (II.5), il existe $\Lambda_1 \geq \Lambda_0$ tel que pour tout $\Lambda \geq \Lambda_1$, le modèle obtenu pour l'énergie F_Λ est dynamiquement consistant avec les situations diphasiques, au sens suivant :

Pour tout $M > 0$, il existe $\delta, \gamma > 0$ tels que pour toute donnée initiale $\mathbf{C}^0 \in \mathbb{H}_S^1$ telle que $\|\mathbf{C}^0\|_{H^1} \leq M$ alors on a

$$\int_{\Omega} c_j^0 dx = 0, \text{ et } \|c_j^0\|_{-1} \leq \delta \implies \forall t \geq 0, \|c_j(t)\|_{-1} \leq \|c_j^0\|_{-1} e^{-\gamma t}.$$

Dans ce théorème on a noté $\|f\|_{-1}$ la norme H^{-1} définie sur l'ensemble $L_m^2(\Omega)$ des fonctions de L^2 à moyenne nulle par $\|f\|_{-1} = \|(-\Delta_N)^{-1} f\|_{H^1}$, l'inverse de l'opérateur de Laplace avec conditions de Neumann $(-\Delta_N)^{-1}$ étant considéré comme un opérateur de $L_m^2(\Omega)$ dans lui-même.

Ce théorème établit donc que si à l'instant initial l'une des concentrations est petite en norme $\|\cdot\|_{-1}$, alors la solution $(c_1(t), c_2(t), c_3(t))$ est exponentiellement proche (dans toutes les normes H^s pour $s < 1$) quand t tend vers l'infini d'une solution purement diphasique. Encore une fois, nos résultats numériques confirment l'importance de cette propriété que l'on doit vraiment comprendre comme un théorème de stabilité assurant un bon comportement du modèle vis à vis des erreurs numériques.

surete

4 Simulations numériques et validation du modèle

4.1 Schémas numériques

La résolution numérique du modèle ci-dessus a été effectuée par C. Lapuerta dans sa thèse ([Lap06]) à l'aide de la plateforme de calcul PELICANS développée à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire sur le site de Cadarache (voir [Pia04]).

Une des difficultés rencontrées tient à la discrétisation en temps du problème de Cahn-Hilliard triphasique (même sans le couplage avec Navier-Stokes) qui requiert un soin particulier. Il est en effet nécessaire de faire en sorte que l'inégalité d'énergie soit satisfaite au niveau discret (ce qui assure l'existence et parfois l'unicité de la solution du problème discret et la stabilité générale du schéma). Cette propriété n'est évidemment pas vérifiée par la discrétisation explicite. Il est donc nécessaire d'impliciter une partie des non-linéarités. Dans le cas diphasique, on découpe l'énergie libre volumique en une partie convexe (qu'on implicite) et une partie concave (qu'on explicite). Dans la situation triphasique, le problème est plus complexe et un tel découpage n'est pas toujours possible. On a donc proposé un schéma vérifiant les propriétés ci-dessus.

La discrétisation en espace s'effectue alors par une méthode d'éléments finis P^1 pour le paramètre d'ordre et le potentiel chimique. On propose également l'étude du problème avec conditions aux limites mixtes (Dirichlet/Neumann) permettant de résoudre numériquement le problème de la création des bulles en entrée du domaine (voir la figure II.8) sans variation de volume des autres phases du système.

Remarquons qu'il est délicat d'utiliser des éléments d'ordre plus élevé lors du couplage avec les équations de Navier-Stokes. En effet, pour assurer la conservation du volume des phases, on voit qu'il est important que la pression et le paramètre d'ordre soient discrétisées par le même élément fini car la divergence du champ de vitesse discret n'est pas nulle en général. La montée en ordre sur le problème de Cahn-Hilliard nécessiterait donc l'utilisation d'un élément fini vitesse-pression inf-sup stable dans lequel la pression est P^2 , ce qui s'avèrerait bien trop coûteux.

C'est néanmoins un point qui mériterait une étude plus approfondie. Il est probablement possible de contrôler la perte de volume des phases dans le cadre d'une discrétisation indépendante de la pression et du paramètre d'ordre. La

montée en ordre du schéma pour Cahn-Hilliard permettrait probablement de considérer un paramètre ε plus petit et donc un calcul plus précis des interfaces, à nombre de degrés de liberté égal.

Dans tous les cas, la résolution numérique du problème proposé est plus simple que, par exemple, par une approche de type level-set pour lesquelles les difficultés algorithmiques sont importantes (voir par exemple [SSC02])

4.2 Résultats

D'un point de vue numérique, on peut vérifier que ce modèle donne de bons résultats et qu'en revanche les modèles ne vérifiant pas les propriétés de consistance (P_1) et (P_2) énoncées dans ce chapitre ne sont pas satisfaisants.

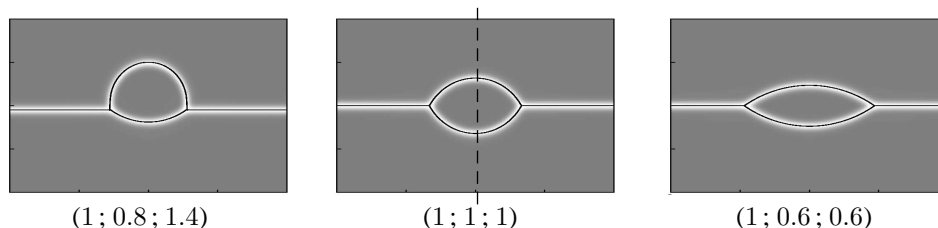


FIG. II.4 – Angles de contact pour la bulle piégée avec les tensions de surface ($\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}$)

Par exemple, dans le cas d'une lentille coincée entre deux autres phases, il est possible de calculer analytiquement les angles de contact entre les phases et la distance qui sépare les points triples à l'équilibre en fonction des trois tensions de surface. Nous obtenons une très bonne coïncidence avec ces valeurs comme on le voit sur la figure II.4 où la zone blanche représente la zone interfaciale (définie conventionnellement comme celle où $(1 - c_1)(1 - c_2)(1 - c_3) \geq \frac{3}{16}$) et le trait plein la solution analytique. Dans la figure II.5, on observe la différence entre les résultats obtenus avec notre modèle

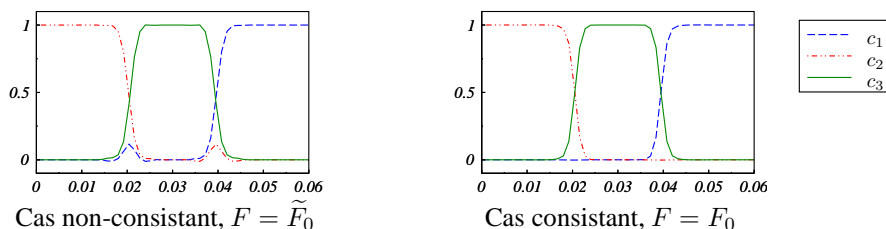


FIG. II.5 – Comparaison entre les modèles consistants et non-consistants

algébriquement consistant et le modèle couramment rencontré dans la littérature où l'on prend seulement l'énergie \tilde{F}_0 définie par (II.16). La figure montre les valeurs des trois paramètres d'ordre le long de la ligne de coupe montrée dans la figure II.4. Comme on le peut le constater dans le cas non consistant, lors de la traversée de l'interface entre les phases i et j , il y a apparition **non physique** de la troisième phase k de façon tout à fait significative et persistante au raffinement. Ce comportement est bien entendu qualitativement mauvais et induit des problèmes importants lors du couplage avec les équations de Navier-Stokes *via* les forces capillaires. Si on utilise l'énergie F_0 à la place de \tilde{F}_0 , ce comportement disparaît et on obtient bien le résultat attendu.

Dans la figure II.6, on montre les résultats obtenus dans les cas d'étalement, c'est-à-dire si l'un des coefficients Σ_i est négatif. Comme on l'a vu plus haut, il est nécessaire dans ce cas d'utiliser l'énergie F_Λ avec un Λ assez grand ($\Lambda = 21$ dans les cas présentés) afin de stabiliser le point triple et d'obtenir les résultats auxquels on s'attend. Dans ce cas test, il est bon de noter que les modèles usuels ainsi que le modèle consistant F_0 ne permet pas de passer le calcul et celui-ci explose au bout de quelques itérations, car l'énergie F n'est alors pas minorée ce qui rend le modèle très instable.

Par ailleurs, nous avons couplé ce modèle avec les équations de Navier-Stokes, dans l'esprit de [4], avec un terme de forces capillaires de la forme $\sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla \varphi_i$ pour simuler des situations avec écoulement. Nous pouvons ainsi simuler de façon satisfaisante la traversée d'un flux de bulles gazeuses à travers une interface entre deux phases liquides (figure II.8). De plus, comme nous l'avons établi de façon théorique, notre modèle est capable de prendre en compte les situations d'étalement total. Cette situation est exactement celle que l'on rencontre dans le cadre industriel qui a motivé ce travail pour lesquels les deux liquides en présence sont les phases oxydes (liquide léger) et métalliques (liquide lourd) du corium (le produit de la fonte du coeur de réacteur suite à une éventuelle rupture de cuve dans un réacteur à eau pressurisée).

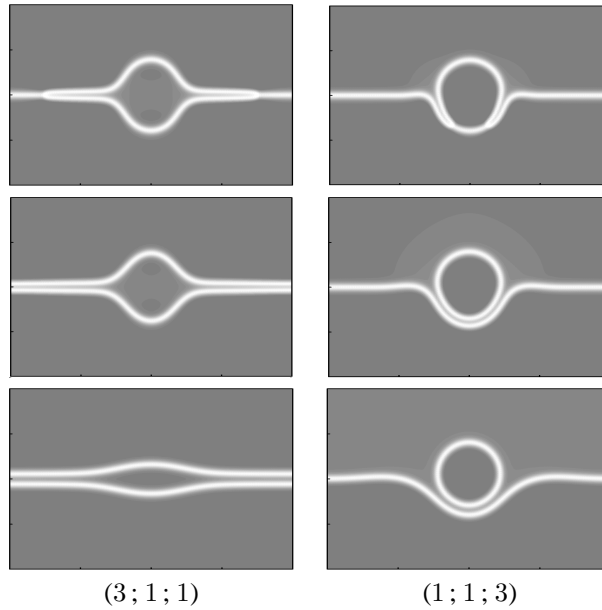


FIG. II.6 – Evolution de la lentille dans deux cas d'étalement différents

Dans ce cas précis, les modèles de la littérature ne sont pas opérants et notre contribution a permis d'accéder à des simulations numériques dans ce contexte. Nous avons également étudié le couplage avec la thermique dans le modèle afin de quantifier les échanges de chaleur entre les phases et notamment l'influence de la déformation de l'interface métal/oxyde due au passage des bulles dans ces échanges (voir le dernier chapitre de [Lap06])

Pour valider nos résultats nous avons, par exemple, étudié la question de savoir si une bulle de gaz traversait ou pas une interface entre deux liquides en configuration stratifiée. Un critère empirique a été établi dans [GCC88] qui fournit la valeur d'un rayon de bulle critique en fonction des différents paramètres du problème (tensions de surface, densités, etc ...) et nous avons pu vérifier une bonne concordance de nos résultats avec celui-ci (voir la Figure II.7). On vérifie également dans la Figure II.8 que ce type de modèles permet en effet de prendre en compte les changements de topologies dans le système - ici la coalescence de deux bulles disposées de façon asymétrique à l'instant initial.

5 Limitations du modèle. Perspectives

Décrivons ici quelques limitations qui semblent intrinsèques au modèle et/ou au point de vue adopté :

- La prise en compte de tensions de surface non constantes n'est absolument pas triviale dans cette approche. Cette situation peut apparaître dès lors qu'on s'intéresse à des systèmes non isothermes avec de forts gradients de température qui peuvent influencer sur les tensions de surface ou encore si l'on souhaite modéliser les impuretés dans un mélange.
D'un certain point de vue cette difficulté est naturelle car à partir du moment où les tensions de surface peuvent varier, on ne peut pas vraiment dire que seulement trois types d'interfaces sont présentes dans le mélange, on n'est donc pas tout à fait dans la situation "trois fois diphasique" qui a fait l'objet spécifique de notre étude.
- Le développement de modèles consistants selon la définition ci-dessus ne semble pas pouvoir être étendu de façon immédiate à des mélanges de $N \geq 4$ constituants non miscibles. Une façon intuitive de comprendre ce problème est qu'un mélange de 4 phases par exemple est décrit par la donnée de 6 tensions de surface (il y a 6 possibilités d'interface dans le mélange), alors que l'on a *a priori* seulement 4 coefficients de capillarité $\Sigma_1, \dots, \Sigma_4$ comme degrés de liberté dans le modèle. On peut bien entendu envisager de rajouter des termes croisés du type $\nabla c_i \cdot \nabla c_j$ dans la définition de l'énergie mais on peut se convaincre assez rapidement que cela ne change rien à ce problème. S'agit-il d'un défaut intrinsèque des modèles à interface diffuse ou bien peut-on construire des formes différentes de l'énergie multi-constituant pour lesquelles les propriétés de consistance sont valables ? Cette question est aujourd'hui un problème ouvert qui constitue une perspective intéressante dans la suite de ce travail.
- De même, il ne semble pas immédiat de généraliser ce travail à des interfaces ayant trois épaisseurs distinctes.

Ce point est peut-être moins dommageable dans un premier temps puisque l'objectif de cette approche est *in fine* de pouvoir utiliser des épaisseurs d'interface non physiques mais bien adaptées à la simulation numérique sans modifier de façon significative les autres propriétés physiques dans le système.

Une des perspectives importantes ouverte suite à ce travail est l'étude plus précise du couplage entre le modèle de Cahn-Hilliard triphasique et les équations de Navier-Stokes, notamment du point de vue numérique. De nombreuses difficultés sont apparues au cours de la thèse de C. Lapuerta, en particulier dans les cas d'étalement total, qu'il serait intéressant d'étudier de façon plus systématique et plus précise.

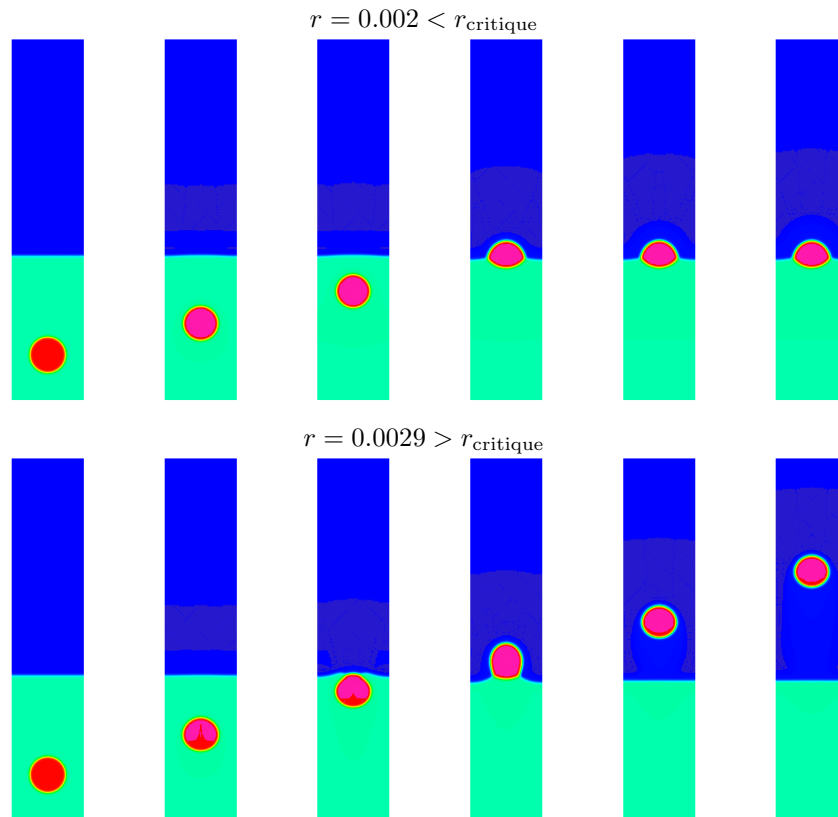


FIG. II.7 – Ascension d'une bulle dans un bain stratifié respectivement en-dessous et en-dessus du rayon critique

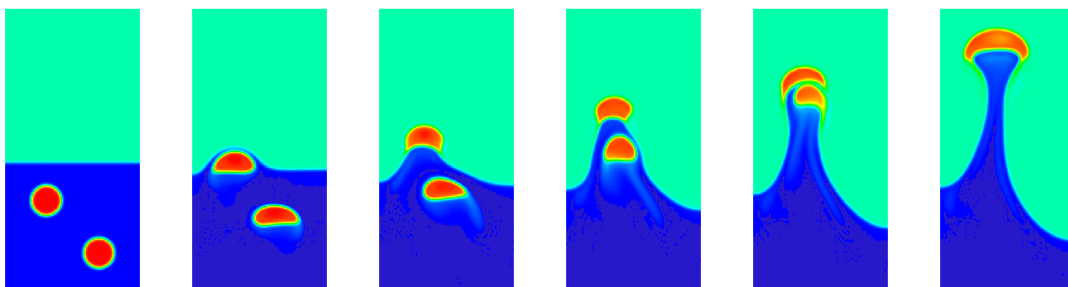


FIG. II.8 – Exemple de montée de bulles à travers une interface liquide/liquide avec coalescence

Chapitre III

A PROPOS DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT

Le but de ce travail [9] est l'étude de l'équation de transport

$$\partial_t \rho + v \cdot \nabla \rho = f, \quad (\text{III.1})$$

dans un domaine borné Ω , pour un champ de vitesse v donné à divergence nulle et ne vérifiant pas nécessairement $v \cdot \mathbf{n} = 0$ sur le bord $\Gamma = \partial\Omega$.

Rappelons que dans le cas d'un champ tangent au bord et tel que $v \in L^1(]0, T[, (W^{1,p'}(\Omega))^d)$, Di Perna et Lions [DL89] ont montré l'existence et l'unicité des solutions faibles dans $L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$ du problème de Cauchy avec donnée initiale dans $L^p(\Omega)$, pour tout $p \in [1, +\infty]$. Par ailleurs, ils ont établi que toutes les solutions faibles de cette équation sont des solutions renormalisées. Cela signifie que pour toute fonction régulière $\beta : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ qui ne croît pas trop vite à l'infini, la fonction $\beta(\rho)$ est solution de l'équation de transport

$$\partial_t \beta(\rho) + v \cdot \nabla \beta(\rho) = \beta'(\rho) f.$$

Cette propriété très forte, permet en particulier de démontrer l'unicité des solutions, des estimations du type principe du maximum, la conservation du volume des ensembles de niveau au cours du temps, et également la continuité en temps des solutions de (III.1) à valeurs dans $L^p(\Omega)$ dès que $\rho_0 \in L^p(\Omega)$ et $p < +\infty$.

Par ailleurs, l'étude de l'équation aux dérivées partielles (III.1), permet d'obtenir des résultats sur l'équation dite *caractéristique*, c'est-à-dire l'équation différentielle ordinaire

$$\frac{d}{dt} X(s, t, x) = v(t, X(s, t, x)), \quad X(s, s, x) = x, \quad (\text{III.2})$$

pour des champs de vecteurs v peu réguliers. Cette approche est très originale puisque pour des champs v lipschitziens, on adopte plutôt la stratégie inverse qui consiste à utiliser les théorèmes de type Cauchy-Lipschitz pour définir les trajectoires de (III.2), grâce auxquelles on construit les solutions de l'EDP (III.1).

1 Théorème de traces. Problème de Cauchy/Dirichlet

Dès que le champ de vecteurs v n'est plus tangent au bord de Ω , l'étude de l'équation (III.1) amène directement à celle du problème de traces sous-jacent. C'est ce que j'ai entrepris dans la première partie de ce travail.

Lorsque le champ v est suffisamment régulier (disons lipschitzien) ce problème a été étudié par Bardos [Bar70] en utilisant essentiellement la méthode des caractéristiques, c'est-à-dire en travaillant sur les trajectoires de (III.2). Dans le domaine des équations cinétiques, Cessenat a étudié dans [Ces84, Ces85] ce même problème pour l'équation de transport neutronique (où v est une *variable* et non plus une donnée du problème) et Mischler [Mis00] a également étudié le problème de traces pour l'équation de Vlasov. Dans ce dernier travail, l'auteur n'utilise pas la méthode des caractéristiques mais la méthode des solutions renormalisées de Di Perna et Lions [DL89], ce qui permet d'accéder à des résultats plus précis pour des données moins régulières.

C'est cette dernière approche que j'ai choisie pour étudier le problème des traces pour l'équation (III.1). Une des difficultés majeures est le fait que l'on ne souhaite pas faire d'hypothèse de régularité en temps sur le champ de vecteurs v . Ceci s'explique par les applications potentielles de ces résultats aux équations de la mécanique des fluides par exemple (voir le chapitre IV) pour lesquelles le champ de vitesse possède seulement, dans le cadre de solutions faibles, la régularité de l'espace d'énergie $L^\infty(]0, T[, (L^2(\Omega))^d) \cap L^2(]0, T[, (H^1(\Omega))^d)$.

1.1 Théorème de traces

Considérons un champ de vecteurs vérifiant les propriétés suivantes

$$\begin{cases} v \in L^1(]0, T[, (W^{1,p'}(\Omega))^d), \text{ avec } p' = \frac{p}{p-1}, \\ \operatorname{div} v = 0, \\ (v \cdot \mathbf{n}) \in L^\alpha(]0, T[\times\Gamma), \text{ pour un certain } \alpha > 1. \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

Pour un tel champ on introduit les mesures suivantes sur $]0, T[\times\Gamma$ (en notant $\omega \in \Gamma$ la variable du bord)

$$d\mu_v = (v \cdot \mathbf{n}) dt d\omega, \quad d\mu_v^\alpha = |v \cdot \mathbf{n}|^\alpha dt d\omega, \quad d\mu_v^+ = (v \cdot \mathbf{n})^+ dt d\omega, \quad d\mu_v^- = (v \cdot \mathbf{n})^- dt d\omega,$$

de sorte que l'on a $d\mu_v = d\mu_v^+ - d\mu_v^-$, $|d\mu_v| = d\mu_v^+ + d\mu_v^-$. Notons que la dernière hypothèse dans (III.3) est seulement une hypothèse d'intégrabilité en temps de la trace normale de $v \cdot \mathbf{n}$ qui est par exemple vérifiée si celle-ci est fixée et ne dépend pas du temps (en particulier si elle est nulle, on retrouve le cadre utilisé dans [DL89]).

Sous les hypothèses ci-dessus, j'ai montré l'existence et l'unicité de la trace $\gamma\rho$ de toute solution faible ρ dans l'espace $L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$ de (III.1) avec $p \in]1, +\infty]$. Par ailleurs, cette trace $\gamma(\rho)$ vérifie une propriété de renormalisation. Le résultat précis est le suivant :

Théorème III.1

Soit $p \in]1, +\infty]$, v un champ de vecteurs vérifiant (III.3) et $f \in L^1(]0, T[, L^p(\Omega))$.

Soit $\rho \in L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$ une solution, au sens des distributions, de l'équation de transport

$$\partial_t \rho + v \cdot \nabla \rho = f.$$

On a alors :

1. La fonction ρ est dans $\mathcal{C}^0([0, T], L^q(\Omega))$, pour tout $1 \leq q < p$. De plus, ρ est faiblement continue en temps à valeurs dans $L^p(\Omega)$.
2. Il existe une fonction $\gamma\rho$ mesurable sur $]0, T[\times\Gamma$ telle que pour toute fonction $\beta \in \mathcal{C}_b^1(\mathbb{R})$, pour toute fonction test $\varphi \in \mathcal{C}^1([0, T] \times \bar{\Omega})$, et pour tout $[t_0, t_1] \subset [0, T]$, on a

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} \beta(\rho) (\partial_t \varphi + v \cdot \nabla \varphi) dt dx + \int_{\Omega} \beta(\rho(t_0)) \varphi(t_0) dx - \int_{\Omega} \beta(\rho(t_1)) \varphi(t_1) dx \\ - \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Gamma} \beta(\gamma\rho) \varphi (v \cdot \mathbf{n}) dt d\omega + \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} \beta'(\rho) f \varphi dt dx = 0. \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$

Enfin, la fonction $\gamma\rho$ satisfaisant les propriétés ci-dessus est unique au sens presque partout pour la mesure $|d\mu_v|$ sur $]0, T[\times\Gamma$.

A ce stade, le théorème dit seulement que la trace $\gamma\rho$ est mesurable. C'est pour cela que la formulation (III.4) est seulement valable *a priori* à travers toute fonction $\beta \in \mathcal{C}_b^1(\mathbb{R})$ afin que les intégrales aient toutes un sens.

Dans le cas $p = +\infty$, on montre aisément *via* la propriété de renormalisation, que la trace $\gamma\rho$ vit dans l'espace $L^\infty(]0, T[\times \Gamma, |d\mu_v|)$. Dans ce cas, on retrouve la formulation à laquelle on pouvait s'attendre

$$\int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} \rho(\partial_t \varphi + v \cdot \nabla \varphi) dt dx + \int_{\Omega} \rho(t_0) \varphi(t_0) dx - \int_{\Omega} \rho(t_1) \varphi(t_1) dx - \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Gamma} \gamma \rho(v \cdot \mathbf{n}) \varphi dt d\omega + \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} f \varphi dt dx = 0, \quad (\text{III.5})$$

Dans le cas $p < +\infty$, la trace $\gamma\rho$ peut ne pas appartenir à l'espace $L^1(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v)$ (voir le contre-exemple de Bardos [Bar70]) et la formulation (III.5) n'a donc pas de sens en général. On reviendra sur une description précise de l'espace de traces dans ce cas dans la section 1.3.

1.2 Résolution du problème de Cauchy avec donnée au bord - Cas L^∞

On peut maintenant résoudre le problème de Cauchy avec donnée au bord dans le cas de données bornées. Etant donné ρ_0, f et ρ_{in} (pour *inflow*), on cherche ρ et ρ_{out} (pour *outflow*) tels que

$$\begin{cases} \partial_t \rho + v \cdot \nabla \rho = f, & \text{dans } \Omega, \\ \rho(0) = \rho_0, & \text{dans } \Omega, \\ \gamma(\rho) = \rho_{\text{in}}, & \text{sur }]0, T[\times \Gamma, \text{ là où } (v \cdot \mathbf{n}) < 0, \\ \gamma(\rho) = \rho_{\text{out}}, & \text{sur }]0, T[\times \Gamma, \text{ là où } (v \cdot \mathbf{n}) > 0. \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

Le résultat établi dans [9] est le suivant :

Théorème III.2

Soit $T > 0$, $f \in L^1(]0, T[, L^\infty(\Omega))$ et v vérifiant (III.3) (avec $p' = 1$). Pour toute donnée initiale $\rho_0 \in L^\infty(\Omega)$, et toute donnée au bord $\rho_{\text{in}} \in L^\infty(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v^-)$, il existe un unique couple $(\rho, \rho_{\text{out}}) \in L^\infty(]0, T[\times \Omega) \times L^\infty(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v^+)$ tel que pour tout $\varphi \in \mathcal{C}^1([0, T] \times \bar{\Omega})$ avec $\varphi(T) = 0$, on a :

$$\int_0^T \int_{\Omega} \rho(\partial_t \varphi + v \cdot \nabla \varphi) dt dx + \int_{\Omega} \rho_0 \varphi(0) dx - \int_0^T \int_{\Gamma} \rho_{\text{out}} \varphi(v \cdot \mathbf{n})^+ dt d\omega + \int_0^T \int_{\Gamma} \rho_{\text{in}} \varphi(v \cdot \mathbf{n})^- dt d\omega + \int_0^T \int_{\Omega} f \varphi dt dx = 0. \quad (\text{III.7})$$

De plus, ρ est continue en temps à valeurs dans $L^q(\Omega)$ pour tout $q < +\infty$ et $(\rho, \rho_{\text{out}})$ vérifie une propriété de renormalisation : pour toute fonction β dans $\mathcal{C}^1(\mathbb{R})$, le couple $(\beta(\rho), \beta(\rho_{\text{out}}))$ est l'unique solution de (III.7) pour les données $(\beta(\rho_0), \beta(\rho_{\text{in}}))$ et le terme source $\beta'(\rho)f$.

La preuve se déroule en plusieurs étapes. On commence par considérer l'approximation parabolique suivante de ce problème

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{\rho}_\varepsilon + v \cdot \nabla \tilde{\rho}_\varepsilon - \varepsilon \Delta \tilde{\rho}_\varepsilon = f, & \text{dans } \Omega \\ \tilde{\rho}_\varepsilon(t=0) = \rho_0, \\ \varepsilon \frac{\partial \tilde{\rho}_\varepsilon}{\partial \mathbf{n}} + (\tilde{\rho}_\varepsilon - \rho_{\text{in}})(v \cdot \mathbf{n})^- = 0, & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

dont on montre aisément l'existence et l'unicité des solutions. La donnée au bord de type Robin est choisie pour préserver le principe du maximum et pour bien entendu converger vers la condition au bord souhaitée pour le problème limite. On établit alors des estimations d'énergie pour $\tilde{\rho}_\varepsilon$ et pour sa trace (qui est bien définie car $\tilde{\rho}_\varepsilon \in L^2(]0, T[, H^1(\Omega))$ pour tout $\varepsilon > 0$) qui permettent de passer à la limite faible pour une sous-suite bien choisie. Cette étape permet d'obtenir l'existence de la solution ρ au sens des distributions ainsi que de la partie *sortante* de la trace de celle-ci.

L'unicité s'obtient en utilisant le théorème de traces III.1 (valable pour toute solution au sens des distributions de l'équation de transport).

Grâce à la propriété de renormalisation, on peut établir des propriétés fort utiles des solutions :

- *Principe de comparaison* : Si $(\rho_0^1, \rho_{\text{in}}^1, f^1)$ et $(\rho_0^2, \rho_{\text{in}}^2, f^2)$ sont deux familles de données vérifiant $\rho_0^1 \leq \rho_0^2$ presque partout, $f^1 \leq f^2$ presque partout et $\rho_{\text{in}}^1 \leq \rho_{\text{in}}^2$ presque partout pour la mesure $d\mu_v^-$, alors les solutions correspondantes de (III.6) notées $(\rho_1, \rho_{\text{out}}^1)$ et $(\rho_2, \rho_{\text{out}}^2)$ vérifient $\rho_1 \leq \rho_2$ presque partout et $\rho_{\text{out}}^1 \leq \rho_{\text{out}}^2$ presque partout pour la mesure $d\mu_v^+$.
- *Principe de produit* : Si ρ_1 et ρ_2 sont deux solutions pour les termes sources f^1 et f^2 alors le produit $\rho_1 \rho_2$ est solution pour le terme source $\rho_1 f^2 + \rho_2 f^1$ et de plus les traces vérifient

$$\gamma(\rho_1 \rho_2) = (\gamma \rho_1)(\gamma \rho_2).$$

Notons que l'on peut prouver également, *a posteriori*, la convergence forte de toute la famille $\tilde{\rho}_\varepsilon$ et de ses traces vers ρ et $\gamma(\rho)$ respectivement dans $C^0([0, T], L^q(\Omega))$ et dans $L^q(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v)$ pour tout $q < +\infty$.

1.3 Espace de traces

Dans le cas $p = +\infty$, on a vu que la trace $\gamma(\rho)$ vit naturellement dans l'espace $L^\infty(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v)$, par contre dans le cas ($p < +\infty$) la trace vit dans l'espace moins naturel $L^p(]0, T[\times \Gamma, \gamma(\tau) d\mu_v)$ où $\gamma(\tau)$ est la trace du temps de vie dans Ω associé au champ de vitesse v . Ce temps de vie $\tau(t, x)$ est le temps que passe une particule située au point x à l'instant t entre son entrée et sa sortie du domaine Ω .

Ceci avait déjà été remarqué par Bardos dans [Bar70] et Cessenat dans [Ces84, Ces85] respectivement pour des champs lipschitziens et pour le transport neutronique. Dans ces deux cas, ce temps de vie τ se définit relativement explicitement par résolution des équations caractéristiques. Dans la situation qui nous occupe, on doit procéder autrement en construisant (un peu à la manière de ce qui est fait dans [Mis00]), *via* le théorème III.2, τ_- et τ_+ solutions de

$$\begin{cases} \partial_t \tau_- + v \cdot \nabla \tau_- = 1, \\ \tau_-(0) = 0, \\ \gamma \tau_- = 0, \text{ sur }]0, T[\times \Gamma \text{ là où } (v \cdot \mathbf{n}) < 0, \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \partial_t \tau_+ + v \cdot \nabla \tau_+ = -1, \\ \tau_+(T) = 0, \\ \gamma \tau_+ = 0, \text{ sur }]0, T[\times \Gamma \text{ là où } (v \cdot \mathbf{n}) > 0. \end{cases}$$

On définit alors le temps de vie total par $\tau = \tau_+ + \tau_-$ et on peut montrer que ce temps de vie est strictement positif pour tout temps et pour presque tout x et que sa trace est aussi strictement positive $|d\mu_v|$ -presque partout.

On peut maintenant décrire l'espace dans lequel vivent les traces des solutions de l'équation de transport dans $L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$.

Théorème III.3

Soit $p \in]1, +\infty[$ et v satisfaisant (III.3). Pour tout $f \in L^1(]0, T[, L^p(\Omega))$ et toute solution $\rho \in L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$ de l'équation de transport $\partial_t \rho + v \cdot \nabla \rho = f$, la trace $\gamma \rho$ appartient à l'espace $L^p(]0, T[\times \Gamma, \gamma \tau |d\mu_v|)$ et on a

$$\|\gamma \rho\|_{L^p(]0, T[\times \Gamma, \gamma \tau |d\mu_v|)} \leq C(\|\rho\|_{L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))} + \|f\|_{L^1(]0, T[, L^p(\Omega))}),$$

où C dépend seulement de T et p .

Il est important de remarquer que ce théorème est non vide et donne des informations non triviales sur la trace partout où elle est définie car, d'après ce qui précède, les mesures $\gamma \tau |d\mu_v|$ et $|d\mu_v|$ ont les mêmes ensembles de mesure nulle. Par ailleurs, on sait d'après l'exemple donné par Bardos que l'on ne peut pas s'attendre à un résultat bien meilleur.

Dans le cadre de l'équation de transport neutronique, Cessenat [Ces84, Ces85] a caractérisé l'image de l'opérateur de traces. Il obtient essentiellement que cette image est un sous-espace de $L^p(]0, T[\times \Gamma, \gamma \tau |d\mu_v|)$ défini par une condition de compatibilité entre la trace entrante et la trace sortante au voisinage des points où le temps de vie s'annule. Il serait intéressant d'étendre cette caractérisation à notre cadre afin de mieux comprendre la structure de l'opérateur de traces pour un champ de vecteurs v faiblement régulier.

1.4 Résolution du problème de Cauchy avec donnée au bord - Cas L^p

On peut maintenant s'attacher à la résolution du problème de Cauchy / Dirichlet pour l'équation de transport avec données L^p . Le résultat obtenu est le suivant.

Théorème III.4

Soit $p \in]1, +\infty[$, v un champ de vecteurs vérifiant (III.3) et $f \in L^1(]0, T[, L^p(\Omega))$. Pour toute donnée initiale $\rho_0 \in L^p(\Omega)$ et toute donnée au bord $\rho_{\text{in}} \in L^p(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v^-)$ il existe un unique couple $(\rho, \rho_{\text{out}}) \in L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega)) \times L^p(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v^+)$ solution de (III.6). Plus précisément, pour tout $\varphi \in \mathcal{C}_c^1(]0, T[\times \bar{\Omega})$ on a

$$\int_0^T \int_\Omega \rho (\partial_t \varphi + v \cdot \nabla \varphi) dt dx + \int_\Omega \rho_0 \varphi(0) dx - \int_0^T \int_\Gamma \rho_{\text{out}} \varphi (v \cdot \mathbf{n})^+ dt d\omega + \int_0^T \int_\Gamma \rho_{\text{in}} \varphi (v \cdot \mathbf{n})^- dt d\omega + \int_0^T \int_\Omega f \varphi dt dx = 0. \quad (\text{III.9})$$

De plus, ρ est continue en temps à valeurs dans $L^p(\Omega)$ et vérifie une propriété de renormalisation : pour toute fonction régulière β telle que $|\beta(s)| \leq C(1 + |s|^{\bar{p}})$ et $|\beta'(s)| \leq C(1 + |s|^{p-1})$, où $\bar{p} = \min(p, \frac{p}{p-d})$, le couple $(\beta(\rho), \beta(\rho_{\text{out}}))$ vérifie (III.9) avec les données $(\beta(\rho_0), \beta(\rho_{\text{in}}))$ et le terme source $\beta'(\rho)f$.

On remarque que sous l'hypothèse que la donnée au bord est dans $L^p(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v^-)$ alors la trace en sortie de la solution ρ_{out} est dans $L^p(]0, T[\times \Gamma, d\mu_v^+)$. Dans ce cadre, la trace $\gamma(\rho)$ de la solution est dans l'espace $L^p(]0, T[\times \Gamma, |d\mu_v|)$ ce qui est plus fort que le cas général traité dans le théorème III.3. En particulier, cela prouve que la trace est intégrable sur le bord, ce qui permet de donner un sens à la formulation (III.9).

Par ailleurs, le théorème de traces III.1 nous fournit immédiatement la continuité en temps de la solution à valeurs dans $L^q(\Omega)$ pour tout $q < p$. Dans le théorème précédent nous récupérerons le cas limite $q = p$.

2 Stabilité par rapport au champ de vitesse

La propriété de renormalisation établie plus haut a pour conséquences relativement immédiates que la solution de l'équation de transport, ainsi que ses traces, dépendent continûment des données initiales et des données au bord. On va voir dans cette section qu'elle implique aussi, par des arguments plus indirects la dépendance continue des solutions de l'équation de transport par rapport au champ de vecteurs. Ce point est crucial dans l'étude de problèmes où l'équation de transport est couplée à une autre équation donnant le champ de vecteurs v . Les résultats du chapitre IV concernant les équations de Navier-Stokes incompressible non-homogène en donnent une bonne illustration.

Le résultat de stabilité suivant est ainsi démontré dans [14].

Théorème III.5

Pour tout $k \geq 1$, soit $v_k \in L^1(]0, T[, (W^{1,1}(\Omega))^d)$ tel que $\text{div } v_k = 0$ et $(v_k \cdot \mathbf{n}) \in L^\delta(]0, T[\times \Gamma)$ pour un certain $\delta > 1$. On se donne pour tout $k \geq 1$, une donnée initiale $\rho_{0,k} \in L^\infty(\Omega)$, et une donnée au bord entrante $\rho_{\text{in},k} \in L^\infty(]0, T[\times \Gamma)$. On appelle

$$(\rho_k, \rho_{\text{out},k}) \in L^\infty(]0, T[\times \Omega) \times L^\infty(]0, T[\times \Gamma, (v_k \cdot \mathbf{n})^+ dt d\omega),$$

l'unique solution du problème

$$\begin{cases} \partial_t \rho_k + v_k \cdot \nabla \rho_k = 0, \\ \rho_k(0) = \rho_{0,k}, \\ \gamma(\rho_k) = \rho_{\text{in},k}, \text{ où } (v_k \cdot \mathbf{n}) < 0. \end{cases} \quad (\text{III.10})$$

On suppose que :

- $(\rho_{0,k})_k$ est bornée dans $L^\infty(\Omega)$ et converge fortement vers $\rho_0 \in L^\infty(\Omega)$ dans $L^1(\Omega)$.
- $(\rho_{\text{in},k})_k$ est bornée dans $L^\infty(]0, T[\times \Gamma)$ et converge fortement vers $\rho_{\text{in}} \in L^\infty(]0, T[\times \Gamma)$ dans $L^1(]0, T[\times \Gamma)$.
- $(v_k)_k$ converge fortement vers v dans $L^1(]0, T[, (L^1(\Omega))^d)$, où v est un champ de vecteurs dans $L^1(]0, T[, (W^{1,1}(\Omega))^d)$.
- $(v_k \cdot \mathbf{n})_k$ converge fortement vers $v \cdot \mathbf{n}$ dans $L^\delta(]0, T[\times \Gamma)$.

Alors, si on appelle $(\rho, \rho_{\text{out}})$ la solution du problème limite associé au champ de vecteurs v , à la donnée initiale ρ_0 et à la donnée au bord ρ_{in} , on a :

- $(\rho_k)_k$ converge fortement vers ρ dans tous les espaces $L^q(]0, T[\times \Omega)$, $q \in [1, +\infty[$. Plus précisément, nous avons :

$$\rho_k(t) \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \rho(t), \quad \text{dans } L^q(\Omega), \quad \forall t \in [0, T], \forall q \in [1, +\infty[. \quad (\text{III.11})$$

- Les traces $(\gamma(\rho_k)(v_k \cdot \mathbf{n}))_k$ convergent fortement vers $\gamma(\rho)(v \cdot \mathbf{n})$ dans $L^\delta(]0, T[\times \Gamma)$.

Un des points importants dans ce résultat est le fait que l'on ne demande pas la convergence forte de v_k vers v dans l'espace $L^1(]0, T[, (W^{1,1}(\Omega))^d)$ mais seulement dans L^1 ainsi que la convergence forte des traces normales $(v_k \cdot \mathbf{n})$.

La preuve du théorème ci-dessus se déroule, grosso modo, en trois étapes :

- D'après la théorie du problème de Cauchy/Dirichlet développée plus haut, et notamment le principe du maximum, on montre des bornes L^∞ sur ρ_k et $\rho_{\text{out},k}$ de sorte qu'on peut en extraire des sous-suites faiblement convergentes et passer à la limite dans la formulation faible du problème. Comme le champ de vecteurs limite v est suffisamment régulier, on sait que la solution du problème limite est unique et donc que les convergences faibles ont lieu pour la totalité de la suite initiale.
- D'après la propriété de renormalisation appliquée au problème (III.10), à k fixé, on obtient que ρ_k^δ est solution de ce même problème pour la donnée initiale $\rho_{0,k}^\delta$ et a pour trace $\gamma(\rho_k^\delta) = \gamma(\rho_k)^\delta$. En réitérant le raisonnement du premier point on montre la convergence faible de ρ_k^δ et de sa trace respectivement vers une fonction R et sa trace γR .
- On utilise maintenant la propriété de renormalisation pour le problème limite qui implique en particulier que la solution de ce problème limite pour les données ρ_0^δ et ρ_{in}^δ n'est autre que $(\rho^\delta, \rho_{\text{out}}^\delta)$, et donc que $R = \rho^\delta$ et $\gamma R = (\gamma \rho)^\delta$. De tout cela on déduit que la norme $L^\delta(\Omega)$ de ρ_k converge vers la norme $L^\delta(\Omega)$ de ρ ce qui, assorti de la convergence faible déjà obtenue, fournit finalement les convergences fortes souhaitées.

3 Régularité spatiale des solutions de l'équation de transport

3.1 Introduction

Les résultats précédents concernant le problème de trace pour l'équation de transport (III.1) permettent d'accéder à des résultats de régularité en espace de n'importe quelle solution faible de l'équation (même en domaine non-borné). Voyons d'abord sur un exemple en quoi ce type de résultats est tout à fait naturel.

Soit $\rho_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^2)$ à support compact et $v(t, x, y) = (\varphi(t), 0), \forall (t, x, y) \in]0, T[\times \mathbb{R}^2$, où $\varphi \in L^1(]0, T[)$ est une fonction positive telle que $\min_{]0, T[} \varphi > 0$. L'unique solution faible de (III.1) (avec $f = 0$) dans ce cas est donnée par

$$\rho(t, x, y) = \rho_0(x - \Phi(t), y),$$

avec $\Phi(t) = \int_0^t \varphi(s) ds$. Il est donc bien clair que ρ est continue en temps à valeurs dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ (ceci est déjà connu depuis les travaux de Di Perna et Lions). Mais on peut aussi faire le changement de variables $\tau = \Phi(t)$ ce qui donne pour tous $x, x_0 \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathbb{R}} |\rho(t, x, y) - \rho(t, x_0, y)| dt dy &= \int_0^T \int_{\mathbb{R}} |\rho_0(x - \Phi(t), y) - \rho_0(x_0 - \Phi(t), y)| dt dy \\ &= \int_0^{\Phi(T)} \int_{\mathbb{R}} |\rho_0(x - \tau, y) - \rho_0(x_0 - \tau, y)| \frac{1}{\varphi(\Phi^{-1}(\tau))} d\tau dy. \end{aligned}$$

Mais comme $\frac{1}{\varphi \circ \Phi^{-1}} \in L^\infty(]0, \Phi(T)[)$, la quantité ci-dessus tend vers 0 quand x tend vers x_0 par continuité des opérateurs de translation dans L^1 . Ainsi, on a montré que ρ est continue par rapport à la variable x (c'est-à-dire dans la direction du champ v) à valeurs dans $L^1_{t,y}(]0, T[\times \mathbb{R})$. Bien entendu, sans aucune autre hypothèse de régularité sur les données, ρ n'a aucune raison d'être continue en un sens quelconque par rapport à la variable y transverse au champ de vecteurs v .

Si maintenant φ est une fonction quelconque de $L^1(]0, T[)$. Supposons par exemple que φ s'annule sur un intervalle $]t_0, t_1[$, alors pour tout $t \in]t_0, t_1[$ et tous $x, y \in \mathbb{R}$ la solution de (III.1) s'écrit

$$\rho(t, x, y) = \rho_0(x - C, y),$$

avec $C = \int_0^{t_0} \varphi$. Encore une fois, il n'y a aucune raison que ρ soit continue par rapport à x d'une quelconque façon. Dans ce cas, on se convainc aisément que c'est en fait le produit $\rho(t, x, y)\varphi(t) = \rho(t, x, y)(v \cdot e_x)$ qui est continu par rapport à x .

3.2 Preuve pour des champs réguliers

Soit $v = (v_1, v_2) \in C^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2)^2$ un champ de vecteurs régulier, borné et à divergence nulle et soit $f \in C^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2)$ un terme source régulier et borné. Soit maintenant ρ une solution bornée de l'équation de transport

$$\partial_t \rho + v_1 \partial_{x_1} \rho + v_2 \partial_{x_2} \rho = f, \quad (\text{III.12})$$

pour la donnée initiale $\rho(0) = \rho_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^2)$.

Supposons que que le champ v vérifie $v_1(t, x) \geq \delta > 0$ pour tout (t, x) . On écrit alors (III.12) sous la forme

$$\partial_t \left(\frac{\rho v_1}{v_1} \right) + \partial_{x_1} (\rho v_1) + \partial_{x_2} \left(\frac{v_2}{v_1} \rho v_1 \right) = f.$$

On peut donc voir l'équation de transport sur ρ comme une nouvelle équation de transport sur l'inconnue $R = \rho v_1$ dans laquelle x_1 est maintenant la variable d'évolution (le "temps") et (t, x_2) sont les variables "spatiales". Plus précisément on écrit

$$\partial_{x_1} R + w_0 \partial_t R + w_2 \partial_{x_2} R + cR = f, \quad (\text{III.13})$$

où

$$w_0 = \frac{1}{v_1}, \quad w_2 = \frac{v_2}{v_1}, \quad c = \partial_t w_0 + \partial_{x_2} w_2.$$

Le champ de vecteurs (w_0, w_2) et la fonction scalaire c sont régulières et bornées, on peut donc appliquer les résultats de la théorie de Di Perna et Lions [DL89] à ce problème, au moins localement, et on déduit donc que $R = \rho v_1$ est continue par rapport à la variable de "temps" (c'est-à-dire x_1) à valeurs dans tous les $L^q_{loc}(\mathbb{R}^2)$ dans les variables "spatiales" (t, x_2) , pour tout $q < +\infty$.

Enfin, comme v_1 est supposée régulière et ne s'annule pas, on déduit de cela que la solution ρ du problème initial est elle aussi continue par rapport à x_1 à valeurs dans les espaces L^q_{loc} dans les variables (t, x_2) .

Si l'on souhaite formaliser cette preuve dans le cas de champs de vecteurs moins réguliers *via* la théorie de Di Perna et Lions, on sait qu'il est nécessaire, au moins, que le champ de vecteurs (w_0, w_2) soit intégrable par rapport à la variable de temps x_1 à valeurs dans un espace de Sobolev du type $W^{1,1}$ dans les variables spatiales (t, x_2) . Si on revient au champ de vecteurs initial v , on voit que ceci réclame de la régularité par rapport au temps pour le champ v . Ceci n'est pas acceptable car dans les applications, en mécanique des fluides par exemple (voir le chapitre IV), on ne peut pas espérer que $\partial_t v$ soit intégrable.

Malgré tout on est en droit d'attendre que le résultat soit encore vrai dans ce cadre car, comme on l'a vu dans la section 3.1, la régularité en temps du champ de vitesse ne semble absolument pas nécessaire pour établir la continuité spatiale des solutions de l'équation de transport.

3.3 Cas des solutions bornées

Notations - On suppose le domaine Ω régulier et on paramétrise le voisinage du bord $\{x \in \Omega, d(x, \Gamma) < \xi_\Omega\}$ pour $\xi_\Omega > 0$ assez petit, par la coordonnée normale $\xi = d(x, \Gamma)$ et par la projection sur $\Gamma : \sigma = P_\Gamma(x)$. Pour une fonction f définie dans Ω on notera indifféremment $f(x)$ ou $f(\sigma, \xi)$ pour $x = \sigma - \xi \mathbf{n}(\sigma)$ près du bord.

Résultats - On se donne un champ de vecteurs vérifiant (III.3) ainsi que l'hypothèse supplémentaire suivante

$$(v \cdot \mathbf{n}) \in \mathcal{C}_\xi^0([0, \xi_\Omega[, L^\alpha(]0, T[\times \Gamma)), \quad (\text{III.14})$$

avec $\alpha > 1$, qui est par exemple vérifiée dès que $v \in L^\alpha(]0, T[, (W^{\frac{1}{\alpha} + \varepsilon, \alpha}(\Omega))^d$.

Le premier théorème que l'on montre concerne la continuité de la solution par rapport à la coordonnée normale près du bord du domaine.

Théorème III.6

Soit $f \in L^1(]0, T[, L^\infty(\Omega))$ et v vérifiant (III.3) et (III.14). Pour toute solution ρ dans $L^\infty(]0, T[\times \Omega)$ de l'équation de transport (III.1) dans Ω , l'application

$$(t, \xi, \omega) \in]0, T[\times [0, \xi_\Omega[\times \Gamma \mapsto \rho(t, \xi, \omega)(v(t, \xi, \omega) \cdot \mathbf{n}(\omega)),$$

est continue par rapport à $\xi \in [0, \xi_\Omega[$ à valeurs dans $L^\alpha(]0, T[\times \Gamma)$.

Ceci implique la continuité en espace de la solution selon la coordonnée normale à toute hypersurface non caractéristique pour le champ v .

La démonstration du théorème III.6 repose sur la preuve de la dépendance continue de la trace par rapport au domaine. Plus précisément, on procède en deux temps :

- On considère la trace $\gamma_\xi(\rho)$ de ρ sur le bord du domaine Ω_ξ pour tout $\xi \in [0, \xi_\Omega]$ que l'on ramène à Γ par l'isomorphisme entre Γ et Γ_ξ induit par le champ des normales sortantes à Ω . On obtient ainsi une famille de fonctions bornées définies sur $]0, T[\times \Gamma$ dont on étudie la dépendance en ξ grâce aux différentes formulations faibles de l'équation posées sur tous les domaines Ω_ξ .
- On montre que "les traces coïncident avec la fonction ρ ", au sens où

$$\rho(t, \xi, \omega)(v(t, \xi, \omega) \cdot \mathbf{n}(\omega)) = \gamma_\xi \rho(t, \omega)(v(t, \xi, \omega) \cdot \mathbf{n}(\omega)),$$

pour presque tout t, ξ et ω . Ce qui montre le résultat.

3.4 Cadre L^p

Comme on l'a vu plus haut, l'espace de trace des solutions $L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$ de l'équation de transport n'est pas $L^p(]0, T[\times \Gamma, |d\mu_v|)$ mais fait intervenir la notion de temps de vie associé au champ v . De ce fait, les résultats de continuité en espace de telles solutions sont un peu plus complexes à écrire. En notant τ_ξ le temps de vie par rapport au champ v et au domaine Ω_ξ et γ_ξ l'opérateur de trace pour ce domaine. On obtient ainsi par exemple le résultat suivant.

Théorème III.7

Soit $p \in]1, +\infty[$. Pour toute solution $\rho \in L^\infty(]0, T[, L^p(\Omega))$ de l'équation de transport, l'application

$$(t, \xi, \omega) \in]0, T[\times [0, \xi_\Omega[\times \Gamma \mapsto \rho(t, \xi, \omega) \gamma_\xi \tau_\xi(t, \omega)(v(t, \xi, \omega) \cdot \mathbf{n}(\omega)),$$

est continue par rapport à ξ à valeurs dans $L^r(]0, T[\times \Gamma)$ pour tout $r < \frac{p\alpha}{p + (\alpha - 1)}$.

4 Commentaires et perspectives

La condition de divergence nulle sur v n'est clairement pas nécessaire dans l'étude ci-dessus mais elle permet de simplifier les écritures. De plus, elle est naturelle dans l'optique de l'application de ces résultats aux équations de Navier-Stokes incompressibles non-homogènes. Une hypothèse d'intégrabilité avec un exposant bien choisi de la divergence de v serait suffisante pour aboutir à des conclusions similaires.

Par ailleurs, les résultats donnés dans ce chapitre ont été établis sous l'hypothèse que le domaine Ω est suffisamment régulier. Cette hypothèse n'est probablement pas indispensable à l'analyse mais l'extension des résultats au cadre des domaines polygonaux ou lipschitziens ne semble pas tout à fait immédiate.

Il y a de nombreuses questions ouvertes autour des résultats obtenus ci-dessus. J'en cite ici quelques unes que j'envisage d'aborder par la suite :

- J'ai déjà signalé la question de la caractérisation de l'image de l'opérateur de trace et éventuellement de la construction d'un opérateur de relèvement de cet opérateur, en s'inspirant des travaux de Cessenat [Ces84, Ces85] sur l'équation de la neutronique.
- Comme je l'ai exposé rapidement en introduction de ce chapitre, la théorie des solutions renormalisées pour l'équation de transport a servi de cadre agréable pour définir et étudier le flot de l'équation caractéristique (III.2) pour des champs peu réguliers. Dans ce cas, il est nécessaire de faire une hypothèse sur la divergence du champ de vecteurs. Dans [DL89], les auteurs proposaient une hypothèse de bornitude en espace de $\operatorname{div} v$; celle-ci a été affaiblie en une hypothèse d'intégrabilité de l'exponentielle de la divergence dans [Des96]. Cette dernière hypothèse est relativement naturelle si on pense à la divergence comme le Jacobien du flot de l'équation caractéristique. L'une des questions qui se pose suite aux résultats que j'ai obtenus est donc : Peut-on construire un formalisme Lagrangien pour ce problème, de la même façon que dans les travaux cités précédemment ? La réponse est vraisemblablement oui si on construit par exemple le flot X (au sens de (III.2)) associé à un prolongement bien choisi du champ de vecteurs v à l'espace tout entier, on doit pouvoir justifier que pour toutes données $(\rho_0, \rho_{\text{in}})$, l'unique solution ρ du problème de transport (avec terme source nul par exemple) est donnée par :

$$\rho(t, x) = \begin{cases} \rho_0(X(t, 0, x)), & \text{si } \tau_-(t, x) = t \\ \rho_{\text{in}}(t - \tau_-(t, x), X(t, t - \tau_-(t, x), x)), & \text{si } \tau_-(t, x) < t. \end{cases}$$

Il s'agirait donc de montrer que cette écriture a bien un sens (une des difficultés étant que le terme ρ_{in} est seulement défini presque partout sur le bord du domaine) et ne dépend pas du prolongement choisi pour le champ de vecteurs initial.

Par ailleurs les résultats de régularité en espace des solutions de l'équation de transport présentés dans ce chapitre doivent pouvoir également se traduire sur le plan Lagrangien par de bonnes propriétés de régularité du flot X ; la question étant pertinente même dans le cas de l'espace entier \mathbb{R}^d .

- La question de la régularité des solutions est également intéressante, par exemple en vue de l'obtention de solutions plus régulières (et donc éventuellement uniques) au problème de Navier-Stokes non-homogène étudié dans le chapitre suivant (voir [Des97b]). Il est clair que même avec des données très régulières celle-ci ne peut avoir lieu que sous certaines conditions de compatibilité entre la donnée initiale, la donnée au bord et le champ de vitesse. Dans le cas où une telle condition n'est pas vérifiée, on peut vraisemblablement s'attendre à obtenir une solution régulière par morceaux dont on pourrait essayer de caractériser les zones de discontinuité.
- Pour finir, les travaux récents d'Ambrosio [Amb04] ou de Lerner [Ler04] sur l'unicité des solutions faibles bornées du transport par un champ BV ou partiellement BV peuvent laisser espérer que les résultats de ce chapitre vont persister pour des champs ayant la régularité $L^1([0, T], (BV(\Omega))^d)$. Peut-on dans ce cadre définir une notion de trace raisonnable et résoudre les problèmes de Cauchy/Dirichlet du type (III.6) pour de tels champs ? L'obtention d'un tel résultat devrait combiner les méthodes utilisées pour montrer les résultats de ce chapitre ainsi que les techniques d'analyse fine des champs de vecteurs BV utilisées par Ambrosio par exemple dans [Amb04], ce qui ne semble pas immédiat.

Notons que des résultats de trace (et de régularité en espace en un sens un peu différent de celui établi ici) dans ce cadre ont été obtenus très récemment par Ambrosio et co-auteurs dans [ACM05]. Néanmoins le problème de Cauchy/Dirichlet dans un ouvert borné de \mathbb{R}^d pour de tels champs de vecteurs n'est pas traité dans cette référence.

- Enfin, on pourrait également s'intéresser à l'analyse de convergence de la solution $\tilde{\rho}_\varepsilon$ de (III.8) vers la solution du problème de transport, pour des données L^∞ . On a déjà établi, par un argument indirect, la convergence forte dans tous les $C^0([0, T], L^q(\Omega))$ avec $q < +\infty$, mais la preuve ne donne aucune information sur la vitesse de convergence. Cette question est vraisemblablement liée à celle de l'analyse des couches limites engendrées par cette approximation visqueuse de l'équation et les conditions aux limites associées. Comme on l'a vu, on ne peut pas espérer une grande régularité de la solution du problème de transport limite, ce qui peut rendre difficile l'utilisation de méthodes de développement en profils de couches limites de type BKW qui sont assez consommatrices de régularité.

Chapitre IV

CONDITIONS AUX LIMITES EN SORTIE D'UN ÉCOULEMENT INCOMPRESSIBLE NON-HOMOGENÈNE

Le problème de la mise au point et de l'étude des méthodes numériques pour le calcul d'écoulements dans des domaines infinis (ou très grands) est très important dans les applications. Une façon raisonnable d'aborder ce problème est de faire le calcul sur un domaine de calcul borné inclus dans le domaine physique. Pour espérer approcher la solution physique dans ce domaine de calcul introduit artificiellement, on doit choisir de la façon la plus raisonnable possible des conditions aux limites artificielles en aval de l'écoulement.

Ces dernières conditions aux limites doivent être choisies pour que le problème soit bien posé et, dans la mesure du possible, pour être non réfléchissantes, c'est-à-dire que le fluide doit pouvoir s'écouler librement en aval sans interagir avec le reste de l'écoulement et par exemple éviter les réflexions de tourbillons à la frontière artificielle. Cette question a déjà été abordée sous divers aspects dans la littérature : conditions aux limites en pression, formulation en pression/vorticité, domaines extérieurs, équations d'Oseen, etc ... On renvoie par exemple à [Bao00, BCMP87, Ber99, CMP94, HRT96, HS89, NSNV04, NSNV04, Nor97, Tou97, Tou98].

Dans des travaux antérieurs, C.H. Bruneau et P. Fabrie [BF96, BF94, Bru00] ont établi des modèles de conditions aux limites non réfléchissantes pour les équations de Navier-Stokes incompressibles pour un fluide homogène (voir aussi [1]) en formulation vitesse / pression qui ne supposent pas *a priori* une géométrie particulière du domaine considéré.

En vue des applications aux écoulements diphasiques, nous cherchons à établir que des conditions aux limites similaires sont utilisables dans le cas d'écoulements non homogènes, c'est-à-dire pour les équations de Navier-Stokes incompressibles avec densité variable. Plus précisément, nous étudions dans [14] le problème

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho v) = 0, \\ \operatorname{div} v = 0, \\ \partial_t(\rho v) + \operatorname{div}(\rho v \otimes v) - \operatorname{div}(\sigma) = \rho f, \\ \rho(0) = \rho_0, v(0) = v_0, \end{cases} \quad (\text{IV.1})$$

où le tenseur des contraintes est donné par $\sigma = \mu(\rho)D(v) - p\operatorname{Id}$, $D(v) = \frac{1}{2}(\nabla v + {}^t\nabla v)$. On se donne une partition $\Gamma_{\text{in}}, \Gamma_{\text{out}}$ du bord Γ du domaine Ω . Sur Γ_{in} (la partie amont de l'écoulement) on se donne une condition aux limites de

Dirichlet (ρ_{in} pour la densité et v_{in} pour la vitesse), par contre sur Γ_{out} (partie artificielle du bord en aval de l'écoulement) on doit écrire des conditions aux limites *non-réfléchissantes*. Pour cela l'idée est de se donner un champ de vitesse et une contrainte de référence v_{ref} et σ_{ref} "proches" de celles d'un écoulement moyen du système (penser à un écoulement de type Poiseuille dans un canal typiquement). Sur Γ_{out} , si le champ de vitesse est sortant on demande à ce que la contrainte normale soit la contrainte de référence et si le champ est rentrant on corrige cette contrainte de référence par un terme non-linéaire qui empêche de l'énergie de rentrer dans le domaine.

On s'intéresse donc à l'étude du système (IV.1) assorti des conditions aux limites suivantes

$$\begin{cases} \rho = \rho_{\text{in}}, & \text{sur } \Gamma \text{ là où } (v \cdot \mathbf{n}) < 0, \\ v = v_{\text{in}}, & \text{sur } \Gamma_{\text{in}}, \\ \sigma \cdot \mathbf{n} = \sigma_{\text{ref}} \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \rho_{\text{in}} (v \cdot \mathbf{n})^- (v - v_{\text{ref}}), & \text{sur } \Gamma_{\text{out}}. \end{cases} \quad (\text{IV.2})$$

1 Notations et hypothèses

On fixe $T > 0$. On se donne $\rho_0 \in L^\infty(\Omega)$, $\rho_0 \geq 0$ et $\rho_{\text{in}} \in L^\infty(]0, T[\times \Gamma)$, $\rho_{\text{in}} \geq 0$. On suppose par ailleurs qu'il existe $\alpha > 0$ tel que

$$\frac{1}{\rho_0^\alpha} \in L^1(\Omega), \text{ et } \frac{1}{\rho_{\text{in}}^\alpha} \in L^1(]0, T[, L^1(\Gamma)). \quad (\text{IV.3})$$

Ces hypothèses permettent de considérer des données initiales et au bord dont l'infimum est nul mais qui ne s'annulent pas sur un ensemble de mesure positive. Elles sont évidemment vérifiées par exemple si $\inf \rho_0 > 0$ et $\inf \rho_{\text{in}} > 0$.

En remplaçant le coefficient $\frac{1}{2}$ dans la condition aux limites sur Γ_{out} dans (IV.2) par n'importe quel coefficient $\theta > \frac{1}{2}$, alors nos résultats restent valables sous les seules hypothèses $\rho_0 > 0$ presque partout et $\rho_{\text{in}} > 0$ presque partout.

On fait maintenant les hypothèses suivantes sur les données :

$$\begin{cases} v_{\text{ref}} \in L^\infty(]0, T[, (L^2(\Omega))^d) \cap L^r(]0, T[, (H^1(\Omega))^d), \\ \text{avec } r = 2 \text{ si } d = 2 \text{ et } r = 4 \text{ si } d = 3, \\ \text{div } v_{\text{ref}} = 0, \\ \partial_t v_{\text{ref}} \in L^2(]0, T[, (L^2(\Omega))^d), \\ v_{\text{ref}} = v_{\text{in}}, \text{ sur } \Gamma_{\text{in}}, \end{cases} \quad (\text{IV.4})$$

et

$$\sigma_{\text{ref}} \cdot \mathbf{n} \in L^2(]0, T[, (H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma))^d). \quad (\text{IV.5})$$

On prend maintenant $v_0 \in v_{\text{ref}}(0) + H$ (H étant l'ensemble des champs de vecteurs L^2 à divergence nulle et tels que $v \cdot \mathbf{n} = 0$ sur Γ_{in}) et $f \in L^2(]0, T[, (L^2(\Omega))^d)$. Enfin, on suppose que la viscosité μ est une fonction continue de la densité telle qu'il existe $\mu_{\text{min}}, \mu_{\text{max}} > 0$ vérifiant

$$\mu_{\text{min}} \leq \mu(s) \leq \mu_{\text{max}}, \quad \forall s \in \mathbb{R}. \quad (\text{IV.6})$$

2 Formulation faible et existence du champ de vitesse

La première étape de ce travail, suivant par exemple les travaux de Simon [Sim90] et Lions [Lio96] dans le cadre des domaines bornés avec conditions aux limites de Dirichlet (voir aussi [Des97a] pour le cas de l'espace entier), consiste à définir une formulation faible à la Leray, c'est-à-dire avec des fonctions tests à divergence nulle. Il faut ensuite montrer qu'elle admet une solution. On note V l'espace des champs de vecteurs de $(H^1(\Omega))^d$ à divergence nulle et nuls sur Γ_{in} .

Théorème IV.1

Sous les hypothèses précédentes, il existe ρ dans $L^\infty(]0, T[\times \Omega)$, $\rho_{\text{out}} \in L^\infty(]0, T[\times \Gamma)$ et un champ de vitesse v dans $L^2(]0, T[, (H^1(\Omega))^d)$ à divergence nulle, tel que $v = v_{\text{in}}$ sur Γ_{in} et vérifiant les formulations faibles

– de la conservation de la masse :

$$\int_0^T \int_\Omega \rho (\partial_t \varphi + v \cdot \nabla \varphi) dt dx + \int_\Omega \rho_0 \varphi(0, \cdot) dx - \int_0^T \int_\Gamma \rho_{\text{out}} \varphi (v \cdot \mathbf{n})^+ dt d\omega + \int_0^T \int_\Gamma \rho_{\text{in}} \varphi (v \cdot \mathbf{n})^- dt d\omega = 0, \quad (\text{IV.7})$$

pour tout $\varphi \in \mathcal{C}_c^1([0, T[, H^1(\Omega))$.

– de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_\Omega \rho v \cdot \left(\partial_t \psi + ((v \cdot \nabla) \psi) \right) dt dx - \int_\Omega \rho_0 v_0 \cdot \psi(0) dx \\ & \quad + \int_0^T \int_\Omega 2\mu(\rho) D(v) : D(\psi) dt dx - \int_0^T \langle \sigma_{\text{ref}} \cdot \mathbf{n}, \psi \rangle_{H^{-\frac{1}{2}}, H^{\frac{1}{2}}} dt \\ & \quad + \frac{1}{2} \int_0^T \int_\Gamma \rho_{\text{in}} ((v - v_{\text{ref}}) \cdot \psi) (v \cdot \mathbf{n})^- dt d\omega + \int_0^T \int_\Gamma \gamma(\rho) (v \cdot \psi) (v \cdot \mathbf{n}) dt d\omega \\ & \quad = \int_0^T \int_\Omega \rho f \cdot \psi dt dx, \quad (\text{IV.8}) \end{aligned}$$

pour tout $\psi \in \mathcal{C}_c^1([0, T[, V)$.

La preuve de ce résultat s'obtient par passage à la limite dans un problème approché de type Galerkin sur le champ de vitesse. La résolution de ce problème approché n'est pas triviale en soit car l'application qui à v associe la solution ρ du problème de transport n'est pas locale de sorte que le problème approché n'est pas équivalent à un système d'équations différentielles ordinaires. Sa résolution passe donc par un argument de point fixe de Schauder utilisant les propriétés de renormalisation de façon cruciale (notamment *via* le théorème de stabilité III.5).

Le passage à la limite dans ce problème approché s'effectue au moyen de deux outils :

- La compacité sur le champ de vitesse. Celle-ci s'obtient en estimant les translations en temps des quantités de mouvement approchées et en utilisant les hypothèses (IV.3). Cette compacité permet de justifier le passage à la limite dans le terme d'advection dans le bilan de quantité de mouvement. Elle permet par ailleurs de prouver la convergence forte L^1 du champ de vitesse et de ses traces.
- Grâce à la compacité obtenue ci-dessus, on peut utiliser le théorème de stabilité de la solution de l'équation de transport par rapport au champ de vitesse (Théorème III.5) afin d'obtenir la convergence forte L^p des densités (et par exemple la convergence presque partout) ainsi que la convergence des traces.

3 Existence de la pression et interprétation de la condition aux limites artificielle

Une fois que l'on a obtenu une solution (ρ, v) la formulation faible proposée (IV.7)-(IV.8), il est nécessaire de vérifier que l'on peut trouver un champ de pression p de sorte que l'on ait bien construit une solution (ρ, v, p) des équations de Navier-Stokes au sens des distributions. Par ailleurs, il faut établir que la condition aux limites non-linéaire que l'on a proposée en sortie de l'écoulement est bien vérifiée en un certain sens.

Le théorème suivant répond à cette question. Il faut noter que la pression est définie de manière unique contrairement au cas des conditions aux limites de Dirichlet pour le problème de Navier-Stokes pour lequel la pression est définie à une constante en espace près. Ceci est classique dans la théorie du problème de Stokes avec conditions aux limites en

contrainte, et on le retrouve ici.

Théorème IV.2

Soient ρ et v donnés par le théorème IV.1. Il existe une unique pression $p \in W^{-1,\infty}(]0, T[, L^2(\Omega))$ telle que, si on définit le tenseur des contraintes de l'écoulement par $\sigma = 2\mu(\rho)D(v) - p\text{Id} \in W^{-1,\infty}(]0, T[, (L^2(\Omega))^{d \times d})$, alors on a

$$\partial_t(\rho v) + \text{div}(\rho v \otimes v) - \text{div}(\sigma) = \rho f,$$

au sens des distributions et telle que de plus la condition aux limites en sortie dans (IV.2) est vérifiée au sens faible suivant :

$$\frac{1}{\eta} \int_0^\eta \sigma(\cdot, \xi, \cdot) \cdot \mathbf{n} \, d\xi \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} \sigma_{\text{ref}} \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \rho_{\text{in}} (v \cdot \mathbf{n})^- (v - v_{\text{ref}}), \text{ sur } \Gamma_{\text{out}}.$$

Autrement dit, les moyennes de la contrainte normale près du bord du domaine convergent faiblement vers la contrainte que l'on souhaite imposer dans (IV.2) c'est-à-dire $\sigma_{\text{ref}} \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \rho_{\text{in}} (v \cdot \mathbf{n})^- (v - v_{\text{ref}})$ sur Γ_{out} . En règle générale, on ne peut pas montrer que $\sigma \cdot \mathbf{n}$ a une trace en un sens usuel (par exemple en montrant que la divergence de σ est dans un espace L^p). Néanmoins, si on sait montrer par un autre argument (si on suppose la densité régulière par exemple) que cette trace existe alors elle est nécessairement égale à $\sigma_{\text{ref}} \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \rho_{\text{in}} (v \cdot \mathbf{n})^- (v - v_{\text{ref}})$.

4 Perspectives

Suite aux travaux présentés ci-dessus, il resterait à étudier le problème de l'unicité des solutions faibles (potentiellement accessible en 2D bien évidemment). Celui-ci est résolu dans le cas des écoulements homogènes ($\rho = \text{cte}$) dans [BF96] (voir aussi [1]) mais reste ouvert dans le cadre non-homogène. Il est vraisemblable que ces résultats ne seront accessibles que dans un cadre de solutions un peu plus régulières que celles obtenues précédemment, ce qui nécessiterait de pouvoir monter en régularité sur les solutions du problème de transport comme je l'ai déjà évoqué à la fin du chapitre précédent.

L'étude du cas où on autorise la densité de l'écoulement à s'annuler dans des zones de mesure non nulle (ce qui modélise à des zones de vide dans cet écoulement) est encore largement ouvert car dans ces conditions on ne sait obtenir à l'heure actuelle de la compacité que sur la quantité de mouvement ρv mais pas sur les traces du champ de vitesse. On a vu que cette dernière propriété est cruciale pour justifier la convergence forte de la densité et de ses traces dans le problème approché.

D'un point de vue pratique, lors de la résolution numérique du problème à l'instant t^{n+1} on prend comme écoulement de référence la solution calculée à l'instant t^n , c'est-à-dire (dans le cadre homogène avec $\rho = 1$ pour simplifier) avec la condition en sortie

$$\sigma^{n+1} \cdot \mathbf{n} = \sigma^n \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} (v^{n+1} \cdot \mathbf{n})^- (v^{n+1} - v^n). \quad (\text{IV.9})$$

Cette stratégie s'est avérée tout à fait efficace lors de calculs d'écoulements homogènes (même très turbulents) derrière un obstacle dans un canal (voir [BF96]). Il serait donc intéressant d'analyser cette méthode numérique même dans ce cadre homogène probablement plus simple. A l'heure actuelle la stabilité d'une telle méthode quand on raffine le pas de temps n'est pas établie. Intuitivement, en passant à la limite formelle quand le pas de temps tend vers 0, tout semble se passer comme si la condition aux limites (IV.9) était posée sur la dérivée de la contrainte. On s'attend ainsi à la convergence de la méthode vers une solution des équations de Navier-Stokes assorties des conditions aux limites suivantes en sortie de l'écoulement

$$\partial_t \sigma \cdot \mathbf{n} = -\frac{1}{2} (v \cdot \mathbf{n})^- \partial_t v.$$

Ces conditions aux limites sont doublement originales : elles sont non-linéaires et elles couplent le champ de vitesse v et la dérivée en temps de v et de la contrainte $\sigma \cdot \mathbf{n}$. L'étude d'un tel problème semble tout à fait importante pour mieux comprendre les méthodes numériques efficaces de calcul d'écoulements sur des domaines de calcul artificiels.

On peut également s'intéresser, dans des géométries simples, à la question de la convergence de la solution sur le domaine tronqué vers celle sur le domaine physique. Par exemple on peut se demander, dans le cas d'un écoulement dans un canal infini tronqué aux abscisses $-L$ et L , si la solution calculée avec les conditions aux limites proposées va converger, quand L tend vers l'infini, vers la solution du problème en canal infini ?

Deuxième partie

Méthodes de volumes finis pour les problèmes elliptiques

Appuyez-vous sur les principes : ils finiront bien par céder.

Le cœur des travaux décrits dans cette partie est constitué par la mise au point et l'analyse de schémas de type volumes finis pour les équations elliptiques linéaires et non-linéaires du type Leray-Lions. Ces travaux ne se situent pas dans un cadre applicatif très précis, néanmoins les motivations sous-jacentes sont nombreuses et tout à fait concrètes. On trouve en effet de telles équations dans de nombreuses situations, en général suite à l'écriture du principe de conservation d'une certaine quantité physique pertinente pour la situation modélisée. Donnons ici trois exemples parmi tant d'autres de tels modèles :

- La loi de Darcy-Forchheimer :

Parmi les modèles courants en mécanique des fluides en milieux poreux, on trouve l'équation de Darcy qui lie la vitesse de filtration v dans le milieu au gradient de champ de pression p via une relation linéaire dont le coefficient de proportionnalité est le tenseur dit *de perméabilité* \mathbf{K} . Couplée à la relation de conservation de la masse du fluide on obtient le système

$$v = -\mathbf{K}\nabla p, \quad \operatorname{div} v = 0,$$

ce qui n'est autre qu'une équation elliptique linéaire (éventuellement anisotrope) pour la pression p .

Cette loi de Darcy, que l'on peut justifier à partir des équations de Stokes par exemple par des techniques d'homogénéisation, est validée dans un certain régime asymptotique liant la taille des pores, la viscosité du fluide, etc... Dans d'autres régimes, on peut établir que cette loi doit être corrigée de la façon suivante pour tenir compte du comportement non-linéaire de l'écoulement

$$v + \mu|v|^\alpha v = -\mathbf{K}\nabla p, \quad \operatorname{div} v = 0,$$

avec $\alpha > 0$, et plus précisément $\alpha = 1$ pour le modèle de Darcy-Forchheimer proprement dit. En prenant le module de la première équation, on obtient que $|v|$ s'exprime comme une certaine fonction non-linéaire du module de $\mathbf{K}\nabla p$: $|v| = f(|\mathbf{K}\nabla p|)$, et donc il vient

$$-\operatorname{div} \left(\frac{1}{1 + \mu f(|\mathbf{K}\nabla p|)^\alpha} \mathbf{K}\nabla p \right) = 0,$$

ce qui est bien une équation elliptique non-linéaire (monotone au sens usuel si la perméabilité est isotrope) sur la pression p . On peut également raisonner en terme de fonction de courant (en 2D) et obtenir une équation elliptique non-linéaire sur celle-ci si \mathbf{K} est isotrope.

- Les écoulements de glaciers :

On trouve dans des travaux récents [GR03, PRR⁺04] de tels modèles non-linéaires pour l'étude des écoulements des glaciers. Le problème complet est un problème à frontière libre, celle-ci évoluant selon un champ de vitesse calculé par la résolution à chaque pas de temps d'une équation elliptique non-linéaire. Dans ce type de calculs où le domaine est en mouvement et doit donc être théoriquement remaillé à chaque pas de temps il peut être judicieux d'utiliser une méthode de type domaine fictif et pénalisation qui permette de ramener le calcul en géométrie complexe à un calcul en géométrie cartésienne pour laquelle des schémas plus simples et plus efficaces sont disponibles. C'est également une des motivations de l'étude que nous avons menée sur la discrétisation de ces équations (plus exactement du problème modèle qu'est le p -laplacien) sur des maillages cartésiens.

- Les écoulements de fluides non-newtoniens en milieu poreux :

On trouve ainsi dans [DdT94] par exemple un modèle qui s'écrit sous la forme d'une équation elliptique non-linéaire dont le flux, monotone par rapport au gradient, dépend également de la solution u .

Il existe une littérature assez importante concernant la discrétisation des équations elliptiques non-linéaires par des méthodes d'éléments finis dont l'analyse profite de façon essentielle de la conformité de la méthode. Néanmoins, il est assez naturel de discrétiser ces équations par des méthodes de volumes finis qui sont conservatives *par nature* et pour lesquelles les flux (qui sont bien souvent la quantité que l'on souhaite calculer de façon précise) sont consistants. Par ailleurs, on verra que certaines des méthodes étudiées permettent d'atteindre un niveau de complexité important dans la géométrie des maillages (mailles non nécessairement convexes, raffinement local, etc ...), que l'on ne peut pas atteindre en général par des méthodes d'éléments finis conformes (l'utilisation de méthodes de type Discontinuous Galerkin est alors probablement une approche à envisager dans ce cadre éléments finis).

Mes travaux dans cette thématique (en collaboration avec B. Andreianov et F. Hubert) sont essentiellement divisés en deux grands chapitres :

- Le chapitre V concerne le cas de la discrétisation du p -laplacien sur des maillages cartésiens. Cette restriction géométrique assez forte permet d'une part d'obtenir des schémas relativement simples (de type schémas à neuf points) pour lesquels on peut pousser l'analyse assez loin.

On a ainsi tout d'abord caractérisé les schémas à neuf points présentant de bonnes propriétés, notamment de symétrie et de monotonie semblables à celles du problème continu et bien sûr de consistance des flux. On a ensuite proposé une analyse d'erreur de ces schémas dans le cadre de solutions supposées suffisamment régulières, i.e. dans $W^{2,p}(\Omega)$. Malheureusement ce cadre est un peu trop optimiste (au moins dans le cas $p > 2$) et on sait que les propriétés de régularité elliptique du p -laplacien sont moins bonnes que celles des opérateurs linéaires. Ainsi l'espace naturel dans lequel vivent les solutions pour des données $L^p(\Omega)$, $p > 2$ est l'espace de Besov $B_\infty^{1+\frac{1}{p-1},p}(\Omega)$. En profitant tout à la fois de la structure variationnelle des schémas proposés et de la régularité cartésienne des maillages, on a ainsi obtenu une estimation d'erreur (qui semble numériquement optimale) pour ces solutions peu régulières. La méthode de preuve utilisée ici est assez différente des méthodes *usuelles* dans le cadre volumes finis. Pour terminer nous donnons, dans un cadre de solutions très régulières et en fonction de leur géométrie, des estimations d'erreur d'ordre élevé de type *superconvergence*. On montre ainsi, entre autres, la convergence à l'ordre 2 en norme L^∞ pour des solutions régulières non-dégénérées du p -laplacien.

- Le chapitre VI concerne un cadre plus vaste dans lequel nous considérons des opérateurs de type Leray-Lions quelconques sur des maillages bidimensionnels très généraux *via* l'adaptation et l'analyse de la méthode dite *Discrete Duality Finite Volume* (DDFV). Nous proposons en particulier (avec F. Hubert) une amélioration de ces schémas permettant de prendre en compte des éventuelles discontinuités en espace des coefficients de l'opérateur, en essayant d'empêcher (ou en tout cas de limiter) la perte de consistance des schémas. Bien que le schéma obtenu soit très fortement non-linéaire, il est possible de calculer la solution approchée grâce à une méthode, de type décomposition-coordination, que l'on propose et dont on montre la convergence.

Ces schémas peuvent être utilisés par exemple à des problèmes de transmission entre deux milieux poreux de perméabilités très différentes et éventuellement fortement anisotropes. C'est ainsi que l'on a pu obtenir des résultats de référence pour les problèmes d'écoulements en milieux poreux fracturés étudiés dans le chapitre suivant.

Dans un dernier chapitre, je décris des travaux en cours de finalisation qui concernent deux sujets ayant trait aux méthodes de volumes finis mais largement indépendants du reste :

- Dans un premier temps, on propose la mise en place et l'étude d'une nouvelle méthode de volumes finis cells-centered pour résoudre l'équation de Laplace sur un maillage non conforme (ou non-orthogonal) au sens VF usuel. Notons que les méthodes décrites dans le chapitre VI permettent de répondre à cette question mais nécessitent essentiellement de doubler le nombre d'inconnues. La méthode proposée ici conserve le même nombre d'inconnues que la méthode VF4 par exemple (voir [EGH00]), mais consiste à définir les flux numériques de façon implicite.
- Le second travail de ce chapitre (en collaboration avec P. Angot et F. Hubert) concerne la modélisation d'écoulements en milieux poreux fracturés. Les fractures sont des zones de très faible épaisseur dans lesquelles la perméabilité du milieu est, en général, anisotrope et très différente de celle de la matrice poreuse, il est ainsi naturel de modéliser cette situation par un problème asymptotique dans lequel les fractures sont approchées par des hypersurfaces de discontinuité dans le milieu.

Le modèle couple ainsi une équation de Darcy dans la matrice poreuse et une équation elliptique de type Darcy $d - 1$ dimensionnelle dans les fractures obtenue comme une limite asymptotique formelle des équations de Darcy dans l'hypothèse d'une faible ouverture de fracture. On établit l'existence et l'unicité des solutions du modèle pour lequel on propose également un schéma de volumes finis dont on montre la convergence. On discute ensuite sur des résultats numériques la pertinence du modèle asymptotique en comparaison avec les résultats obtenus en résolvant le problème de Darcy original.

Chapitre V

SCHÉMAS VOLUMES FINIS POUR LE p -LAPLACIEN SUR MAILLAGES CARTÉSIENS

Nous nous intéressons ici à la mise au point et à l'étude de schémas volumes finis pour le p -laplacien, c'est-à-dire pour l'équation elliptique non-linéaire

$$-\operatorname{div}(|\nabla u_\varepsilon|^{p-2}\nabla u_\varepsilon) = f \in L^p(\Omega), \quad (\text{V.1})$$

assortie de conditions aux limites de Dirichlet homogène par exemple. La discrétisation de ce type d'équations par des méthodes éléments finis a beaucoup été étudiée mais à notre connaissance, l'utilisation de méthodes volumes finis pour ce problème est tout à fait nouvelle. Cette approche est pourtant très naturelle pour cette équation sous forme conservative.

Une des premières approches de ce problème se trouve dans un travail de B. Andreianov, M. Gutnic et P. Wittbold [AGW04], dans lequel il est prouvé, par une méthode originale, la convergence d'un certain type de schémas volumes finis pour le problème parabolique associé à (V.1). Cet article ne concerne que des maillages assez particuliers et ne contient pas d'estimations d'erreur pour les méthodes proposées.

Ainsi, avec B. Andreianov et F. Hubert, nous nous sommes intéressés, dans un premier temps, à l'étude des méthodes volumes finis pour ce problème dans le cadre de maillages cartésiens. Cette restriction sur la géométrie des maillages permet de décrire de façon exhaustive les schémas volumes finis (dits *cells-centered*) avec un stencil d'au plus 9 points préservant le caractère variationnel de l'équation. Par ailleurs, nous donnons des estimations d'erreur pour différents cas de régularité de la solution exacte.

Le choix de maillages rectangles peut paraître restrictif dans les applications. En réalité, on peut parfaitement traiter, avec ce type de maillages, le cas de domaines avec une géométrie plus complexe en utilisant des méthodes de type "domaine fictif" et pénalisation. Si Ω est un domaine borné régulier quelconque sur lequel on veut résoudre (V.1), on peut par exemple résoudre le problème suivant

$$-\operatorname{div}(|\nabla u_\varepsilon|^{p-2}\nabla u_\varepsilon) + \frac{1}{\varepsilon^p} \mathbf{1}_{U \setminus \Omega} |u_\varepsilon|^{p-2} u_\varepsilon = f \quad \text{dans } U, \quad (\text{V.2})$$

avec une condition au bord de Dirichlet et U est un domaine de géométrie plus simple (disons un rectangle en 2D ou un parallélépipède en 3D) qui contient Ω . Le terme de pénalisation étant monotone, ce problème a une unique solution u_ε et on peut montrer que

$$\|\nabla u_\varepsilon\|_{L^p(U \setminus \Omega)} + \frac{1}{\varepsilon} \|u_\varepsilon\|_{L^p(U \setminus \Omega)} + \|\nabla u_\varepsilon - \nabla u_e\|_{L^p(\Omega)} \leq C\varepsilon^{\frac{1}{p}}. \quad (\text{V.3})$$

Cette technique a de nombreux avantages, en particulier la possibilité de mettre en oeuvre de façon simple les schémas étudiés dans ce chapitre pour le problème pénalisé (V.2) et éventuellement des méthodes de résolution performantes du type “multi-grilles” ou parallélisation.

On peut également considérer à moindre frais (c’est-à-dire sans re-maillage), la résolution de (V.1) sur un domaine qui dépend du temps dans le cadre de la modélisation des glaciers par exemple. Les modèles donnés par J. Rappaz et ses collaborateurs (voir [GR03] par exemple) rentrent exactement dans ce cadre. Il suffit alors de résoudre à chaque instant le problème pénalisé (V.2) pour un domaine $\Omega = \Omega_t$ dépendant du temps.

Le cas des géométries et donc des maillages quelconques, qui est bien entendu tout à fait important dans la pratique, ainsi que des équations elliptiques non linéaires plus générales a été également traité par une approche totalement différente que je décris dans le chapitre VI. Notons déjà que cette autre approche peut être également utilisée sur des maillages cartésiens mais alors le nombre d’inconnues sera doublé (et donc le temps de calcul augmenté) par rapport à la méthode présentée dans ce chapitre. Par ailleurs, les schémas étudiés ci-dessous permettent une analyse d’erreur plus poussée et on verra que l’on peut tout à la fois obtenir des ordres de convergence élevés pour des solutions très régulières que des ordres de convergence plus faibles mais optimaux pour des solutions possédant la régularité maximale associée à l’équation et aux données dans $L^{p'}(\Omega)$, c’est-à-dire une régularité fractionnaire de type Besov.

1 Construction des schémas

On se donne un maillage cartésien \mathcal{T} de Ω (qu’on suppose donc être un rectangle) et on note \mathfrak{M}^* son maillage dual c’est-à-dire celui obtenu en reliant entre eux les centres des quatre mailles primales ayant un sommet en commun. La discrétisation par volumes finis du problème (V.1) revient à discrétiser l’équation de bilan des flux sur chaque maille κ

$$\int_{\kappa} f(x) dx = - \sum_{\sigma} \int_{\sigma} |\nabla u_e|^{p-2} (\nabla u_e \cdot \mathbf{n}) ds, \quad (\text{V.4})$$

où la somme porte sur toutes les arêtes σ du volume de contrôle κ .

Ceci soulève deux difficultés essentielles :

- 1- On a besoin de l’approximation complète du gradient de la solution sur les arêtes, alors que dans le cas classique du laplacien, l’approximation de la partie normale du gradient est suffisante.
- 2- Les schémas obtenus sont évidemment non-linéaires, il est donc nécessaire de s’assurer de l’existence et de l’unicité de la solution approchée. Par ailleurs, il faut être capable d’implémenter des solveurs efficaces pour résoudre les équations non-linéaires discrètes obtenues.

Pour le premier point, nous approchons la norme du gradient de la solution (en fait il est inutile d’approcher le gradient, seule sa norme nous intéresse ...) de façon constante sur chaque maille duale du maillage. Cette façon de faire permet d’assurer la conservativité du schéma numérique et garantit que le *stencil* du schéma est le plus étroit possible (autrement dit nous considérons seulement les schémas à 9 points).

Il est naturel de chercher à approcher le carré de la norme du gradient sur une maille duale donnée par une certaine forme quadratique en les quatre inconnues de la maille duale. Pour représenter une bonne approximation de $|\nabla u_e|^2$, un certain nombre de conditions de consistance doivent être imposées sur la forme quadratique en question mais de nombreuses possibilités de discrétisation existent encore à ce stade.

Par ailleurs, dans l’équation de bilan (V.4) nous devons également approcher la partie linéaire $(\nabla u_e \cdot \mathbf{n})$ de chaque flux, et encore une fois plusieurs possibilités s’offrent à nous dont la méthode “traditionnelle” utilisée dans le cas du laplacien.

Toutes ces possibilités de discrétisation sont-elles acceptables ? La réponse est **non**. En effet, pour assurer l’existence, l’unicité et la résolubilité effective pour le problème approché par une méthode de gradient conjugué non-linéaire de type Polak-Ribière ou par une méthode de décomposition-coordination (voir la section 2.3 du chapitre VI, mais aussi

[Glo84]), il est nécessaire que le schéma construit soit symétrique, et en particulier découle d'une fonctionnelle discrète qui soit l'équivalent discret de la fonctionnelle associée au problème continu :

$$J(u) = \frac{1}{p} \int_{\Omega} |\nabla u|^p dx - \int_{\Omega} f u dx, \quad \forall u \in W_0^{1,p}(\Omega).$$

Cette propriété assure par ailleurs une plus grande fidélité du schéma par rapport aux propriétés de l'équation continue et permet de préciser les estimations d'erreur dans un certain nombre de cas, comme on le verra dans la section 3.

Dans [7], on montre que les seuls schémas acceptables dans le cadre général esquissé ci-dessus forment une famille à un paramètre de schémas pour chaque maille duale. En particulier il apparaît que, pour assurer le caractère variationnel du schéma, le choix de la discrétisation de $|\nabla u_e|^2$ et celui de la discrétisation de $(\nabla u_e \cdot \mathbf{n})$ ne peuvent être dissociés. Ainsi, sur une maille duale fixée, une fois choisie la forme quadratique qui approche $|\nabla u_e|^2$, la discrétisation des gradients normaux $(\nabla u_e \cdot \mathbf{n})$ nous est imposée et réciproquement.

De façon plus précise, les schémas obtenus s'écrivent : trouver $u^T = (u_{\kappa})_{\kappa} \in \mathbb{R}^T$

$$\sum_{\kappa^* \in \mathfrak{M}^*} m(\kappa^* \cap \Omega) T_{\kappa^*}^t \circ a_{\kappa^*} \circ T_{\kappa^*}(u^T) = (m(\kappa) f_{\kappa})_{\kappa \in \mathcal{T}}, \quad (\text{V.5})$$

où f_{κ} est la moyenne de f sur la maille κ , T_{κ^*} est l'opérateur de projection sur la maille duale κ^* : $T_{\kappa^*} u^T$ est le quadruplet des valeurs de u^T sur les quatre sommets de la maille duale κ^* , en tenant compte des conditions au bord *via* des mailles fictives. Enfin a_{κ^*} est l'application non-linéaire monotone de \mathbb{R}^4 dans lui-même définie par

$$a_{\kappa^*}(v) \stackrel{\text{def}}{=} (B_{\kappa^*} v, v)^{\frac{p-2}{2}} B_{\kappa^*} v, \quad \forall v \in \mathbb{R}^4. \quad (\text{V.6})$$

Dans cette formule $v \mapsto (B_{\kappa^*} v, v)$ est la forme quadratique qui approche $|\nabla u_e|^2$ et dont la forme nous est imposée à un degré de liberté près (noté $\xi^{\kappa^*} \in \mathbb{R}$) par la volonté de conserver la structure variationnelle du schéma. Tous calculs faits, on obtient

$$B_{\kappa^*} = \frac{1}{m(\kappa^*)} \begin{pmatrix} 2\xi^{\kappa^*} + \tau_1^{\kappa^*} + \tau_4^{\kappa^*} & -2\xi^{\kappa^*} - \tau_1^{\kappa^*} & 2\xi^{\kappa^*} & -2\xi^{\kappa^*} - \tau_4^{\kappa^*} \\ -2\xi^{\kappa^*} - \tau_1^{\kappa^*} & 2\xi^{\kappa^*} + \tau_1^{\kappa^*} + \tau_2^{\kappa^*} & -2\xi^{\kappa^*} - \tau_2^{\kappa^*} & 2\xi^{\kappa^*} \\ 2\xi^{\kappa^*} & -2\xi^{\kappa^*} - \tau_2^{\kappa^*} & 2\xi^{\kappa^*} + \tau_2^{\kappa^*} + \tau_3^{\kappa^*} & -2\xi^{\kappa^*} - \tau_3^{\kappa^*} \\ -2\xi^{\kappa^*} - \tau_4^{\kappa^*} & 2\xi^{\kappa^*} & -2\xi^{\kappa^*} - \tau_3^{\kappa^*} & 2\xi^{\kappa^*} + \tau_3^{\kappa^*} + \tau_4^{\kappa^*} \end{pmatrix}, \quad (\text{V.7})$$

où les $\tau_i^{\kappa^*}$ sont les coefficients de *transmissivité* du maillage (qui ne dépendent que de la géométrie des mailles). On renvoie à [7] pour les détails. On peut alors montrer que le schéma est effectivement bien posé et correspond à l'équation d'Euler-Lagrange pour une bonne fonctionnelle approchant J .

Proposition V.1

Sous des hypothèses de régularité du maillage et si $\xi^{\kappa^} \geq 0$ pour tout κ^* , alors pour tout $f \in L^p(\Omega)$, le schéma (V.5) admet une unique solution $u^T \in \mathbb{R}^T$. De plus, cette solution est l'unique minimiseur de la fonctionnelle convexe et coercive J_T définie par*

$$J_T(v^T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{p} \sum_{\kappa^* \in \mathfrak{M}^*} m(\kappa^* \cap \Omega) |B_{\kappa^*}^{\frac{1}{2}} T_{\kappa^*}(v^T)|^p - \sum_{\kappa \in \mathcal{T}} m(\kappa) f_{\kappa} v_{\kappa}, \quad \forall v^T \in \mathbb{R}^T. \quad (\text{V.8})$$

Notons qu'en réalité, la condition $\xi^{\kappa^*} \geq 0$ peut être un peu affaiblie (voir [7]). Ce paramètre ξ^{κ^*} apparaissant dans le schéma s'interprète comme une sorte de paramètre de décentrement qui intervient dans la discrétisation de la partie linéaire du flux $\nabla u_e \cdot \mathbf{n}$. Ainsi, quand $\xi^{\kappa^*} = 0$ et $p = 2$ on retrouve le schéma à 5 points usuels pour le laplacien, dont la généralisation naturelle au cas non-linéaire est donc donnée par le schéma (V.5). Le cas $p = 2$ et $\xi^{\kappa^*} \neq 0$ fournit lui toute une famille de schémas à neuf points non-standard pour le laplacien.

2 Premières estimations d'erreur

Toujours dans [7], nous avons mené une première étude théorique de ces schémas en donnant une estimation d'erreur dans le cas où l'on suppose que la solution exacte est dans l'espace $W^{2,p}(\Omega)$. Cet espace peut paraître naturel (on verra qu'il ne l'est pas vraiment !) et constitue un premier cadre dans lequel on peut espérer faire l'étude de l'erreur.

De fait, en utilisant une technique de preuve relativement classique en volumes finis, nous prouvons des estimations d'erreur en norme $W^{1,p}$ discrète (notée $\|\cdot\|_{1,p,\mathcal{T}}$) semblables à celles obtenus initialement par Barrett et Liu [BL93] dans le cadre éléments finis général (quand $p > 2$). La convergence obtenue est en $h^{\frac{1}{p-1}}$ en norme $W^{1,p}$ discrète. Dans le cas où $1 < p < 2$, on obtient un ordre de convergence en h^{p-1} .

Dans le cadre *éléments finis*, ces estimations ont été améliorées par S. Chow [Cho89] en utilisant la structure variationnelle de l'équation et du schéma. Dans le cadre *volumes finis* qui nous occupe cette méthode ne permet pas d'améliorer les résultats du cadre $W^{2,p}$. En revanche, elle permet d'accéder à des estimations d'erreur pour des solutions moins régulières, c'est ce que nous allons voir dans la section 3.

3 Régularité Besov pour le p -laplacien et estimations d'erreur

Les propriétés de régularité elliptique du p -laplacien sont malheureusement moins bonnes que celle du laplacien. En particulier, pour $p > 2$, on ne gagne pas 2 dérivées quand on résout le p -laplacien. Plus précisément, un théorème de J. Simon [Sim81] montre que la solution de (V.1) n'est pas en général dans $W^{2,p}(\Omega)$ quand on suppose que la donnée est dans $L^{p'}(\Omega)$. Le résultat précis est que si $f \in L^{p'}(\Omega)$ alors u est dans l'espace de Besov $B_{\infty}^{1+\frac{1}{p-1},p}(\Omega)$, toujours pour $p > 2$, ce résultat étant optimal en termes du degré de dérivation (voir l'exemple donné par (V.11))

Ainsi, d'une certaine façon, l'espace de régularité naturel pour cette équation est l'espace de Besov ci-dessus. Nous nous sommes donc intéressés dans [8] et [13] à l'obtention d'une estimation d'erreur dans ce cadre pour les schémas volumes finis précédemment construits. A notre connaissance, nos résultats sont parmi les seuls à fournir des estimations d'erreur précises pour l'approximation volumes finis des solutions peu régulières d'équations fortement non-linéaires.

Nos résultats sont valables pour des familles de maillages obtenus en prenant l'image d'une discrétisation uniforme par une fonction suffisamment régulière. Plus précisément les coordonnées (x_i, y_j) du maillage sont supposés de la forme $x_i = g_x(ih)$ et $y_j = g_y(jk)$ où $h > 0$, $k > 0$ et g_x, g_y sont deux fonctions régulières strictement monotones. Etablir le résultat suivant dans le cadre de maillages cartésiens quelconques (et *a fortiori* dans le cadre encore plus général du chapitre VI) est aujourd'hui un problème totalement ouvert.

On note ici $u^{\mathcal{T}}$ l'unique solution du schéma (V.5) et $u_e^{\mathcal{T}} = (u_e(x_{\kappa}))_{\kappa}$ la projection sur le maillage de la solution exacte u_e .

Théorème V.2

Soit $p > 2$ et \mathcal{T} un maillage de Ω comme ci-dessus. Pour tout $f \in L^{p'}(\Omega)$, on a

$$\|u^{\mathcal{T}} - u_e^{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}} \leq C \text{size}(\mathcal{T})^{\alpha_p} \|f\|_{L^{p'}}^{\frac{1}{p-1}}, \quad (\text{V.9})$$

avec $\alpha_p = \frac{2}{p(p-1)}$ si $p \geq 3$ et $\alpha_p = \frac{1}{p}$ si $2 < p < 3$. La constante C dépend ici d'une certaine mesure de la régularité du maillage et du schéma, i.e. du paramètre ξ^{κ^*} (voir [8] et [13]). Par ailleurs, dans le cas $2 < p < 3$, si on suppose que f est de classe $C^{0, \frac{3-p}{p-1}}(\overline{\Omega})$, alors on peut prendre $\alpha_p = \frac{2}{p(p-1)}$.

La méthode que nous utilisons pour montrer ce résultat n'est pas classique dans le cadre volumes finis. Il s'agit d'utiliser les propriétés de minimisation de la solution exacte mais aussi de la solution approchée pour obtenir des estimations d'erreur sans autre hypothèse que $f \in L^{p'}(\Omega)$. Comme on l'a dit plus haut, une telle approche avait été utilisée par S. Chow dans [Cho89] dans le cadre éléments finis pour améliorer les estimations d'erreur pour les solutions régulières ($u \in W^{2,p}(\Omega)$).

Par rapport aux travaux de S. Chow, de nouvelles difficultés apparaissent car, contrairement aux schémas éléments finis qui présentent des propriétés de conformité (la fonctionnelle approchée est la restriction de la fonctionnelle de départ à un sous-espace de dimension finie de $W_0^{1,p}(\Omega)$), les schémas volumes finis fournissent des solutions constantes par maille qui ne sont pas dans $W_0^{1,p}(\Omega)$, espace de travail naturel pour l'équation considérée.

Description rapide du déroulement de la preuve. Comme la solution approchée $u^{\mathcal{T}}$ minimise $J_{\mathcal{T}}$, nous avons $\nabla J_{\mathcal{T}}(u^{\mathcal{T}}) = 0$. On peut montrer (en utilisant la convexité de $J_{\mathcal{T}}$) que ceci implique

$$C \|u^{\mathcal{T}} - u_e^{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}}^p \leq J_{\mathcal{T}}(u_e^{\mathcal{T}}) - J_{\mathcal{T}}(u^{\mathcal{T}}).$$

Pour tout $v^\tau \in \mathbb{R}^\tau$ on définit $\Pi_{\mathcal{T}}v^\tau$ l'interpolation affine par morceaux de v^τ sur les triangles obtenus en coupant en deux les mailles duales par une diagonale. Ecrivons alors l'estimation ci-dessus sous la forme

$$C\|u^\tau - ue^\tau\|_{1,p,\mathcal{T}}^p \leq \left[J_{\mathcal{T}}(ue^\tau) - J(\Pi_{\mathcal{T}}ue^\tau) \right] + \left[J(\Pi_{\mathcal{T}}ue^\tau) - J(ue) \right] + \left[J(ue) - J(v) \right] + \left[J(v) - J_{\mathcal{T}}(u^\tau) \right],$$

pour tout $v \in W_0^{1,p}(\Omega)$. Comme ue minimise J sur $W_0^{1,p}(\Omega)$, le troisième terme est négatif. On spécialise alors l'inégalité pour $v = \Pi_{\mathcal{T}}u^\tau$ et on obtient

$$C\|u^\tau - ue^\tau\|_{1,p,\mathcal{T}}^p \leq \left[J_{\mathcal{T}}(ue^\tau) - J(\Pi_{\mathcal{T}}ue^\tau) \right] + \left[J(\Pi_{\mathcal{T}}ue^\tau) - J(ue) \right] + \left[J(\Pi_{\mathcal{T}}u^\tau) - J_{\mathcal{T}}(u^\tau) \right]. \quad (\text{V.10})$$

Le terme du milieu ne fait intervenir que la fonctionnelle J du problème continu et s'estime de façon usuelle en utilisant les estimations de consistance des éléments finis P^1 . On obtient :

$$|J(\Pi_{\mathcal{T}}ue) - J(ue)| \leq C\|\Pi_{\mathcal{T}}ue^\tau - ue\|_{W^{1,p}}^2 (\|\Pi_{\mathcal{T}}ue^\tau\|_{W^{1,p}} + \|ue\|_{W^{1,p}})^{p-2} \leq Ch^{\frac{2}{p-1}} \|ue\|_{B_\infty^{1+\frac{1}{p-1},p}}^2 \|ue\|_{W^{1,p}}^{p-2},$$

où $\|\cdot\|_{B_\infty^{1+\frac{1}{p-1},p}}$ désigne la norme dans l'espace interpolé de Besov $B_\infty^{1+\frac{1}{p-1},p}(\Omega) = (W^{1,p}(\Omega), W^{2,p}(\Omega))_{\frac{1}{p-1},\infty}$ et que l'on peut caractériser par des estimations de translations [Sim78].

Il reste à majorer les deux autres termes dans (V.10). Ces deux termes sont similaires, il s'agit de la différence entre la valeur de la fonctionnelle discrète $J_{\mathcal{T}}$ sur un élément v^τ de \mathbb{R}^τ et la valeur de la fonctionnelle continue J sur l'interpolation affine par morceaux $\Pi_{\mathcal{T}}v^\tau$ de cet élément. On montre alors le résultat suivant :

Proposition V.3

Pour tout $\alpha \in]0, 1[$, on a

$$|J(\Pi_{\mathcal{T}}v^\tau) - J_{\mathcal{T}}(v^\tau)| \leq Ch^{2\alpha} \|v^\tau\|_{1+\alpha,p,\mathcal{T}}^2 \|v^\tau\|_{1,p,\mathcal{T}}^{p-2} + Ch\|f\|_{L^{p'}} \|v^\tau\|_{1,p,\mathcal{T}}, \quad \forall v^\tau \in \mathbb{R}^\tau,$$

où $\|\cdot\|_{1+\alpha,p,\mathcal{T}}$ est une norme Besov discrète définie dans [8].

Ainsi le théorème sera démontré si on est capable de trouver une borne Besov discrète sur la solution approchée u^τ et sur la projection de la solution exacte ue^τ . De fait, on peut obtenir ces deux bornes mais de façon tout à fait différente :

- S'agissant de ue^τ , on montre que la norme Besov discrète est contrôlée par la norme Besov continue, celle-ci étant définie *via* les opérateurs de translation. Il s'agit d'un calcul local à chaque maille duale qui fait intervenir un opérateur de translation *a priori* différent pour chacune de ces mailles duales. Si le maillage n'a pas la structure particulière décrite au début de cette section alors la somme de toutes ces estimations locales ne fournit pas une estimation globale car le membre de droite est composé de contributions toutes issues d'opérateurs de translation différents. C'est l'une des raisons qui restreint la méthode à cette classe de maillages.
- Pour estimer la norme Besov discrète de la solution approchée, on adapte au plan discret la preuve du théorème de Simon, basé sur la méthode des translations de Nirenberg. Ici encore la géométrie particulière du maillage est utilisée. On voit également qu'on ne peut espérer une estimation pour un indice de Besov α supérieur à $\frac{1}{p-1}$ même si la solution exacte de l'équation est supposée très régulière. Ainsi, cette approche ne permet en aucun cas (contrairement aux travaux de Chow pour les schémas éléments finis) de préciser les résultats de la section 2 pour les solutions dans $W^{2,p}(\Omega)$.

Signalons enfin que d'un point de vue numérique, les estimations d'erreur que nous avons obtenues semblent optimales. Pour le montrer nous avons effectué les calculs numériques pour des solutions exactes possédant une singularité de la forme

$$u_p(x) = |x|^{\frac{p-1}{p} + \frac{1}{p(p-1)}} |\log|x||^{-\frac{2}{p}}, \quad \text{pour } |x| \sim 0. \quad (\text{V.11})$$

Ces solutions sont exactement dans l'espace de Besov $B_\infty^{1+\frac{1}{p-1},p}(\Omega)$ mais dans aucun espace $B_q^{s,p}(\Omega)$ pour $s > 1 + \frac{1}{p-1}$. De même le second membre associé f_p est dans $L^{p'}(\Omega)$ mais dans aucun espace $L^q(\Omega)$ avec $q > p'$. Ces fonctions montrent en particulier que le théorème de régularité de J. Simon est optimal.

La figure V.1 montre en échelle logarithmique l'erreur relative en norme $W^{1,p}$ discrète en fonction du pas du maillage ainsi que les droites de pentes $\frac{2}{p(p-1)}$ correspondant à l'ordre de convergence théorique pour différentes valeurs de p .

Une des directions possibles de développement de ce travail serait de fournir une preuve dans le cas de maillages cartésiens quelconques. Ceci est encore un problème ouvert à l'heure actuelle.

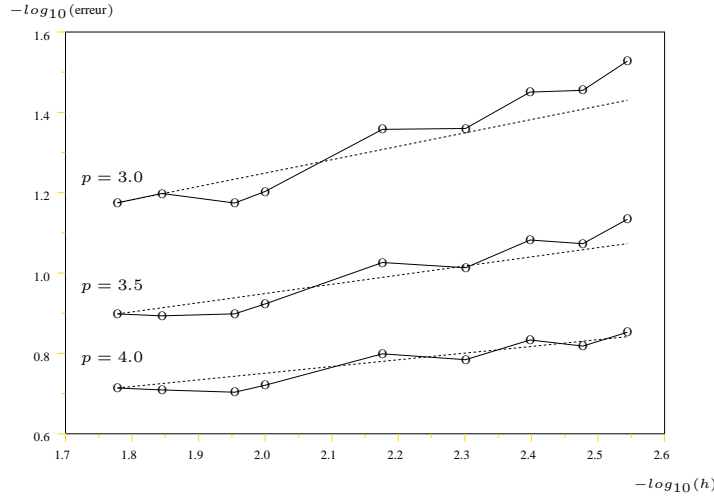


FIG. V.1 – Résultats numériques pour une solution Besov, $p \in \{3.0, 3.5, 4.0\}$

4 Estimations d'erreur pour des solutions régulières

Dans un dernier travail sur ces schémas [10], nous montrons que la méthode numérique proposée ci-dessus pour la résolution du p -laplacien jouit de bonnes propriétés de symétrie sur des maillages cartésiens uniformes qui permettent d'obtenir des estimations d'erreur améliorées, de type *superconvergence*, dès que la solution exacte est supposée suffisamment régulière. Notons qu'il est en général difficile de trouver des conditions générales sur les données pour qu'une telle régularité de la solution soit satisfaite. Néanmoins, dans certains cas particuliers (notamment quand la solution est supposée non-dégénérée), il est possible d'utiliser les propriétés de régularité elliptique des opérateurs de diffusion linéaires sous forme divergence à coefficients réguliers pour atteindre ces propriétés de régularité.

- Dans un premier temps, si on suppose que $u_e \in W^{4,1}(\Omega)$ et sans autre hypothèse sur la géométrie de la solution, alors on montre une convergence en norme $W^{1,p}$ discrète d'ordre h^2 pour $p = 2$ (ce qui généralise les résultats connus pour le laplacien à de nouveaux schémas à 9 points non-classiques) et d'ordre $h^{\frac{2}{p-1}}$ pour $p \geq 4$, c'est-à-dire le double de l'ordre établi dans un cadre plus général dans la section 2. Pour $3 < p < 4$, on obtient un ordre intermédiaire en $h^{\frac{p-2}{p-1}}$.
- Par ailleurs, en adaptant au cadre volumes finis la technique *d'estimation en quasi-norme* de Barrett et Liu [BL93, LB93b, LB93a], on peut profiter d'hypothèses *a priori* sur la géométrie de la solution pour préciser les estimations d'erreur.

L'idée de cette méthode est d'utiliser le fait que la singularité de l'opérateur n'a lieu que près des points où le gradient de la solution s'annule. Cette technique permet ainsi sous des hypothèses de contrôle de la dégénérescence de la solution (par exemple si son gradient ne s'annule pas ou si l'inverse du module de son gradient est intégrable à une certaine puissance) d'obtenir des ordres de convergence plus précis, voire optimaux. Le prix à payer est que ces estimations ont lieu dans des espaces de régularité plus faible que l'espace d'énergie $W^{1,p}$ naturel pour le problème.

Parmi les résultats précis obtenus, citons comme exemple l'estimation suivante : si on suppose la solution régulière et non-dégénérée (i.e. $\inf_{\Omega} |\nabla u_e| > 0$), nous montrons que la convergence du schéma est d'ordre 2 en norme L^∞ si $p \geq 2$ et d'ordre $\frac{3p-2}{p}$ si $1 < p < 2$. Des résultats intermédiaires sont aussi donnés dans le cas où la solution est seulement supposée ν -faiblement dégénérée, c'est-à-dire quand $|\nabla u_e|^{-\nu} \in L^1(\Omega)$, pour un certain $\nu \in]0, 2[$. Notons que cette dernière propriété sur u_e peut être obtenue comme conséquence de la régularité de la solution et d'un bon comportement du terme source, i.e. dès qu'il existe $\gamma > 0$ tel que $|f|^{-\gamma} \in L^1(\Omega)$.

Chapitre VI

SCHÉMAS DDFV POUR LES PROBLÈMES ELLIPTIQUES NON-LINÉAIRES SUR DES GRILLES NON STRUCTURÉES

Les travaux précédents concernant la discrétisation par volumes finis du p -laplacien sur maillage cartésien nous ont naturellement conduits à proposer des schémas qui puissent couvrir des équations et des maillages plus généraux. C'est ce qui a été entrepris dans [11], [15].

Nous nous sommes inspirés d'une classe de schémas volumes finis dits DDFV pour "Discrete Duality Finite Volume" introduits dans [Her00, DO05] pour la discrétisation de l'équation de Laplace sur des maillages très généraux, en s'affranchissant des contraintes usuelles sur les maillages dits *admissibles* pour les méthodes de volumes finis (voir [EGH00]). On s'intéresse ici seulement au cas bidimensionnel, mais les schémas DDFV ont été étendus avec succès au cadre 3D par exemple dans [CPT06, Pie05]. Notons que J. Droniou a proposé récemment dans [Dro05] une approche de type *Volumes Finis Mixtes* (voir aussi [DE05]) qui permet, également en rajoutant de nouvelles inconnues, la résolution du problème sur une large classe de maillages. L'analyse de la vitesse de convergence et la résolution pratique de ce dernier type de schémas sont malgré tout délicates, bien que les résultats numériques semblent témoigner d'un bon comportement de l'erreur en fonction du pas du maillage.

Notre travail a consisté en l'adaptation et l'analyse de ces méthodes DDFV dans le cadre des équations elliptiques non-linéaires de type Leray-Lions (dont le p -laplacien est l'exemple usuel) avec conditions aux limites de Dirichlet. Pour simplifier, on présente seulement ici le cas homogène; la prise en compte de données au bord dans $W^{1-\frac{1}{p},p}(\partial\Omega)$ est discutée dans [11]. Le problème étudié est ainsi le suivant

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\varphi(z, \nabla u_\varepsilon(z))) = f(z), & \text{dans } \Omega, \\ u_\varepsilon = 0, & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{VI.1})$$

où Ω est un ouvert borné polygonal de \mathbb{R}^2 , φ une fonction de Carathéodory vérifiant les hypothèses usuelles

$$(\varphi(z, \xi) - \varphi(z, \eta), \xi - \eta) > 0, \text{ pour tout } \xi \neq \eta, \text{ p.p. } z \in \Omega, \quad (\mathcal{H}_1)$$

$$(\varphi(z, \xi), \xi) \geq C_1|\xi|^p - b_1(z), \text{ pour tout } \xi \in \mathbb{R}^2, \text{ p.p. } z \in \Omega, \quad (\mathcal{H}_2)$$

$$|\varphi(z, \xi)| \leq C_2|\xi|^{p-1} + b_2(z), \text{ pour tout } \xi \in \mathbb{R}^2, \text{ p.p. } z \in \Omega, \tag{H_3}$$

avec $p \in]1, +\infty[$, $b_1 \in L^1(\Omega)$, $b_2 \in L^{p'}(\Omega)$. Alors pour tout terme source $f \in W^{-1,p'}(\Omega)$, il existe un unique $u_e \in W^{1,p}(\Omega)$ vérifiant (VI.1). Notons de plus que tout $f \in W^{-1,p'}(\Omega)$ peut s'écrire (de façon non unique) sous la forme $f = f_0 + \operatorname{div} f_1$ avec $f_0, f_1 \in L^{p'}(\Omega)$. Ainsi, en rajoutant f_1 au flux φ (les hypothèses ci-dessus sont alors encore vraies) on peut se ramener au cas du second membre dans $L^{p'}(\Omega)$.

Quelques exemples usuels qui entrent de ce cadre sont : le laplacien anisotrope (bien entendu linéaire) $-\operatorname{div}(A(z)\nabla u_e) = f$, ou des modèles de type p -laplacien généralisés : $-\operatorname{div}(k(z)|\nabla u_e + F(z)|^{p-2}(\nabla u_e + F(z))) = f$, qui interviennent dans l'étude des écoulements de fluides non newtoniens dans des milieux poreux.

1 Les schémas DDFV dans le cadre non-linéaire

1.1 Description générale

Rappelons le cadre géométrique de la méthode *Discrete Duality Finite Volume*. On se donne un maillage primal \mathcal{T} constitué de volumes de contrôles κ polygonaux dont les adhérences recouvrent $\bar{\Omega}$ et d'une famille de points $(x_\kappa)_\kappa$ associée à chacun de ces volumes (les centres), voir la Figure VI.1. On suppose ces volumes de contrôle d'intérieurs disjoints. On rajoute également un point de contrôle au milieu de chaque arête du bord (qu'on peut considérer comme des mailles primales dégénérées). On ne considère pas ici d'hypothèse de type *conformité du maillage*. Autrement dit,

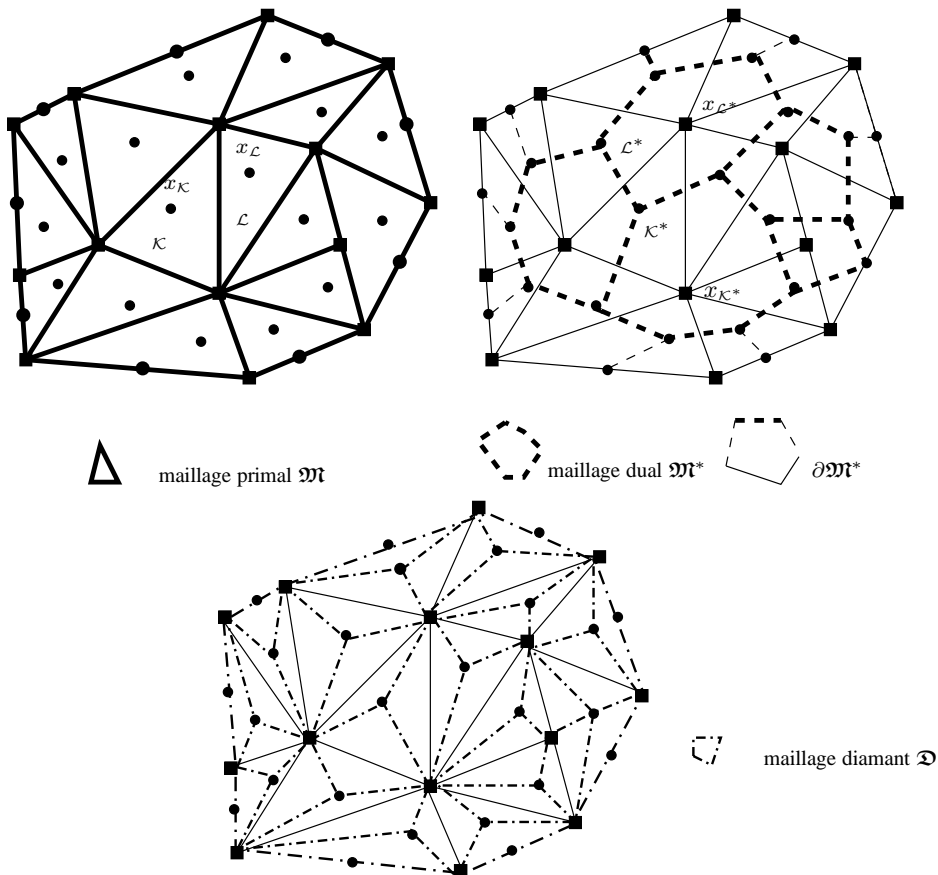


FIG. VI.1 – Exemple de maillages considérés

il n'est pas nécessaire que soit vérifiée une condition d'orthogonalité entre les arêtes et les droites joignant les centres des mailles. De même une arête (au sens géométrique) d'un volume de contrôle peut intersecter de façon non triviale plusieurs autres volumes de contrôle. On appelle alors *arête* du maillage tout ensemble de la forme $\bar{\kappa} \cap \bar{\tau}$ de longueur

non nulle. On suppose que de tels ensembles sont des segments. Quelques autres hypothèses peu restrictives sont utiles pour mener l'analyse du schéma et sont décrites en détail dans [11]. On supposera par exemple que les cellules primales sont étoilées par rapport à leur centre x_κ .

A partir de ce maillage primal, on forme le maillage dual \mathfrak{M}^* associé ; les mailles duales étant obtenues en joignant (dans le sens trigonométrique par exemple) les centres des mailles primales qui touchent un sommet x_{κ^*} donné du maillage primal. La maille duale ainsi construite associée au sommet x_{κ^*} est notée κ^* ; le point x_{κ^*} est alors appelé le centre de la maille duale κ^* .

Le principe de la méthode consiste alors à placer des inconnues simultanément au centre des mailles primales et au centre des mailles duales (c'est-à-dire aux sommets du maillage primal). Il y a donc, grosso modo, deux fois plus d'inconnues que pour les méthodes volumes finis cell-centered usuelles (ou celles de nos travaux précédents sur maillages cartésiens, voir le chapitre V) et il faut rajouter des équations. Ceci se fait en intégrant l'équation sous forme divergence à la fois sur les mailles primales et sur les mailles duales. Il apparaît alors naturellement les mailles *diamants* (voir la Figure VI.1) qui sont des quadrilatères dont deux sommets sont des centres du maillage primal et les deux autres des centres du maillage dual. Il est alors possible de définir un gradient discret sur chacune des mailles diamants \mathcal{D} par la formule

$$\nabla^{\mathcal{D}} u^\tau \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sin \alpha_{\mathcal{D}}} \left(\frac{u_{\mathcal{L}} - u_{\kappa}}{|\sigma^*|} \boldsymbol{\nu} + \frac{u_{\mathcal{L}^*} - u_{\kappa^*}}{|\sigma|} \boldsymbol{\nu}^* \right) \iff \begin{cases} (\nabla^{\mathcal{D}} u^\tau, \boldsymbol{\tau}) &= \frac{u_{\mathcal{L}^*} - u_{\kappa^*}}{|\sigma|} \\ (\nabla^{\mathcal{D}} u^\tau, \boldsymbol{\tau}^*) &= \frac{u_{\mathcal{L}} - u_{\kappa}}{|\sigma^*|}, \end{cases}$$

qui est bien entendu exacte pour les fonctions affines sur le diamant \mathcal{D} . On appelle alors *gradient discret de u^τ* la fonction constante par diamants définie par $\nabla^\tau u^\tau = \sum_{\mathcal{D}} 1_{\mathcal{D}} \nabla^{\mathcal{D}} u^\tau$. Les notations utilisées dans un diamant sont données dans la Figure VI.2.

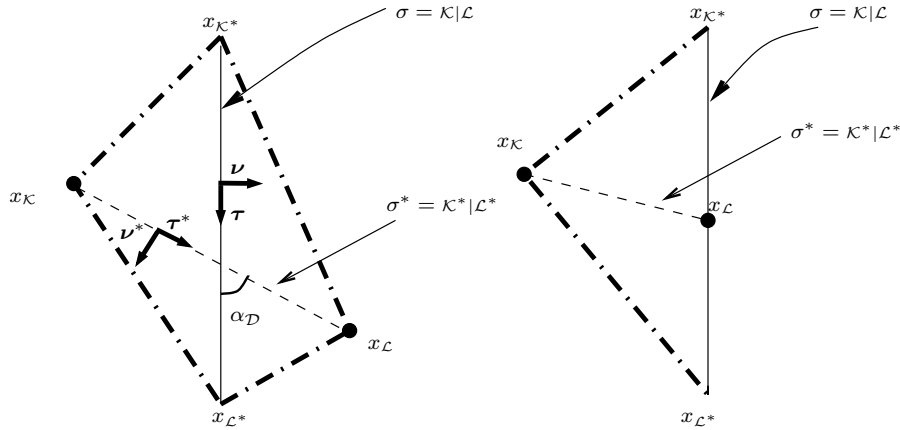


FIG. VI.2 – Notations dans une cellule diamant \mathcal{D}

Le schéma s'obtient alors naturellement de la façon suivante :

$$\begin{cases} - \sum_{\mathcal{D} \in \mathfrak{D}_\kappa} |\sigma| (\varphi_{\mathcal{D}}(\nabla^{\mathcal{D}} u^\tau), \boldsymbol{\nu}_\kappa) = |\kappa| f_\kappa, \forall \kappa \in \mathfrak{M}, \\ - \sum_{\mathcal{D} \in \mathfrak{D}_{\kappa^*}} |\sigma^*| (\varphi_{\mathcal{D}}(\nabla^{\mathcal{D}} u^\tau), \boldsymbol{\nu}_{\kappa^*}) = |\kappa^*| f_{\kappa^*}, \forall \kappa^* \in \mathfrak{M}^*, \end{cases} \quad (\text{VI.2})$$

où f_κ et f_{κ^*} sont les moyennes de f sur κ et κ^* et $\varphi_{\mathcal{D}}$ est le flux numérique dans le diamant \mathcal{D} , que l'on définit comme la moyenne sur le diamant du flux φ

$$\varphi_{\mathcal{D}}(\xi) = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{\mathcal{D}} \varphi(z, \xi) dz.$$

Ce schéma peut alors s'écrire sous la forme d'une sorte de *formulation variationnelle* comme suit :

$$2 \sum_{\mathcal{D} \in \mathfrak{D}} |\mathcal{D}| (\varphi_{\mathcal{D}}(\nabla^{\mathcal{D}} u^\tau), \nabla^{\mathcal{D}} v^\tau) = \sum_{\kappa} |\kappa| f_\kappa v_\kappa + \sum_{\kappa^*} |\kappa^*| f_{\kappa^*} v_{\kappa^*}, \quad \forall v^\tau \in \mathbb{R}^T.$$

C'est cette écriture qui justifie le nom de *Dualité Discrète* car on voit bien que tout revient, une fois l'opérateur de gradient discret construit prendre son dual comme opérateur de divergence discrète.

1.2 Premiers résultats : existence et unicité, convergence

Notre premier résultat fournit l'existence et l'unicité de la solution du schéma.

Théorème VI.1

Pour tout $f \in L^{p'}(\Omega)$, le schéma volumes finis non linéaire (VI.2) admet une unique solution $u^T \in \mathbb{R}^T$ qui satisfait de plus l'estimation a priori

$$\|\nabla^T u^T\|_{L^p} \leq C \left(\|f\|_{L^{p'}}^{\frac{1}{p-1}} + \|b_1\|_{L^1}^{\frac{1}{p}} + \|b_2\|_{L^{p'}}^{\frac{1}{p-1}} \right).$$

De plus, $\nabla^T u^T$ dépend de façon hölderienne (en norme L^p) de la donnée f (en norme $L^{p'}$).

On peut par ailleurs montrer que dans le cas variationnel, c'est-à-dire si φ dérive d'un potentiel convexe Φ via la formule $\varphi(z, \xi) = \nabla_\xi \Phi(z, \xi)$, alors le schéma (VI.2) est l'équation d'Euler-Lagrange associé à la fonctionnelle discrète

$$J_T(v^T) \stackrel{\text{def}}{=} 2 \sum_{\mathcal{D} \in \mathfrak{D}} |\mathcal{D}| \Phi_{\mathcal{D}}(\nabla^{\mathcal{D}} v^T) - \sum_{\kappa \in \mathcal{T}} |\kappa| v_\kappa f_\kappa - \sum_{\kappa^* \in \mathfrak{M}^*} |\kappa| v_{\kappa^*} f_{\kappa^*}, \quad \forall v^T \in \mathbb{R}^T.$$

On note maintenant $\text{reg}(T)$ la constante de régularité du maillage (qu'on ne précise pas ici, voir [11]) et qui mesure essentiellement la différence de taille entre deux mailles voisines et le diamant correspondant (idem pour les mailles duales). On note par ailleurs $u^{\mathfrak{M}} = \sum_{\kappa} 1_\kappa u_\kappa$ et $u^{\mathfrak{M}^*} = \sum_{\kappa^*} 1_{\kappa^*} u_{\kappa^*}$ les fonctions constantes par morceaux (sur chaque volume de contrôle) définies sur le maillage primal (resp. dual) à partir de la solution numérique u^T . Le théorème de convergence du schéma est alors le suivant.

Théorème VI.2

La solution $u^T = (u^{\mathfrak{M}}, u^{\mathfrak{M}^*})$ de (VI.2) converge quand la taille du maillage $\text{size}(T)$ tend vers 0 avec $\text{reg}(T)$ bornée vers la solution u_e du problème (VI.1) au sens suivant :

$$\|u^{\mathfrak{M}} - u_e\|_{L^p} + \|u^{\mathfrak{M}^*} - u_e\|_{L^p} + \|\nabla^T u^T - \nabla u_e\|_{L^p} + \|\varphi(\cdot, \nabla^T u^T) - \varphi(\cdot, \nabla u_e)\|_{L^{p'}} \rightarrow 0.$$

La convergence forte des gradients discrets et des flux $\varphi(\cdot, \nabla^T u^T)$ est cruciale dans les applications car ce sont bien souvent ces grandeurs physiques que l'on souhaite calculer. Par exemple, dans le cadre des modèles d'écoulements de fluides non-newtoniens en milieu poreux le flux $\varphi(\cdot, \nabla u_e)$ est le champ de vitesse incompressible de l'écoulement.

Les étapes essentielles de la preuve sont :

- Obtention d'un théorème de compacité discrète de type Rellich,
- Adaptation de l'argument de monotonie de Minty-Browder [LL65] pour justifier le passage à la limite dans les termes non-linéaires. Pour ce faire, il est nécessaire de pouvoir faire entrer la solution exacte comme fonction test dans le problème discret. Comme l'espace des fonctions constantes par mailles n'est pas un sous-espace de l'espace naturel $W_0^{1,p}(\Omega)$ pour l'équation, nous avons mené une étude préalable des opérateurs de projection des fonctions de $W^{1,p}(\Omega)$ sur l'ensemble des fonctions discrètes.

Ces deux étapes permettent d'obtenir la convergence forte de $u^{\mathfrak{M}}$ et $u^{\mathfrak{M}^*}$ ainsi que la convergence faible du gradient discret dans L^p . La convergence forte des gradients s'obtient dans un second temps en commençant par montrer la convergence presque partout des gradients (grâce à la stricte monotonie de l'opérateur).

1.3 Estimation d'erreur

Nous avons ensuite étudié l'ordre de convergence de la méthode sous de bonnes hypothèses sur φ de monotonie renforcée et de régularité de type Hölder par rapport à z et à ξ . Plus précisément, on suppose :

- Dans le cas $1 < p \leq 2$:
 - Il existe $C_3 > 0$ et $b_3 \in L^1(\Omega)$ tels que pour tous $(\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ et presque tout $z \in \Omega$,

$$(\varphi(z, \xi) - \varphi(z, \eta), \xi - \eta) \geq C_3 |\xi - \eta|^2 (b_3(z) + |\xi|^p + |\eta|^p)^{\frac{p-2}{p}}. \tag{H_{1'a}}$$

- Il existe $C_4 > 0$ tel que pour tous $(\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ et presque tout $z \in \Omega$,

$$|\varphi(z, \xi) - \varphi(z, \eta)| \leq C_4 |\xi - \eta|^{p-1}. \tag{H_{4a}}$$

- Il existe $C_5 > 0$ et $b_5 \in (W^{1,p}(\Omega))^2$ tel que pour tout $\xi \in \mathbb{R}^2$ et presque tous $(z, z') \in \Omega^2$,

$$|\varphi(z, \xi) - \varphi(z', \xi)| \leq C_5(1 + |\xi|^{p-1})|z - z'|^{p-1} + |b_5(z) - b_5(z')|^{p-1}. \quad (\mathcal{H}_{5a})$$

- Dans le cas $p > 2$:

- Il existe $C_3 > 0$ tel que pour tous $(\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ et presque tout $z \in \Omega$,

$$(\varphi(z, \xi) - \varphi(z, \eta), \xi - \eta) \geq C_3|\xi - \eta|^p. \quad (\mathcal{H}_{1'b})$$

- Il existe $C_4 > 0$ et $b_4 \in L^{\frac{p}{p-2}}(\Omega)$ tel que pour tous $(\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$, et presque tout $z \in \Omega$,

$$|\varphi(z, \xi) - \varphi(z, \eta)| \leq C_4(b_4(z) + |\xi|^{p-2} + |\eta|^{p-2})|\xi - \eta|. \quad (\mathcal{H}_{4b})$$

- Il existe $C_5 > 0$ et $b_6 \in L^{p'}(\Omega)$ tels que pour tout $\xi \in \mathbb{R}^2$ et presque tout $z \in \Omega$,

$$\left| \frac{\partial \varphi}{\partial z}(z, \xi) \right| \leq C_5(b_6(z) + |\xi|^{p-1}). \quad (\mathcal{H}_{5b})$$

On montre alors l'estimation d'erreur suivante, qui fournit les mêmes ordres de convergence que dans la section 2 du chapitre V.

Théorème VI.3

Si $u_e \in W^{2,p}(\Omega)$ et si φ vérifie les hypothèses ci-dessus, alors on a les estimations d'erreur suivantes

$$\|u_e - u^{\mathfrak{M}}\|_{L^p} + \|u_e - u^{\mathfrak{M}^*}\|_{L^p} + \|\nabla u_e - \nabla^T u^T\|_{L^p} \leq \begin{cases} C \text{size}(T)^{p-1}, & \text{si } 1 < p \leq 2, \\ C \text{size}(T)^{\frac{1}{p-1}}, & \text{si } p > 2, \end{cases}$$

Cette estimation d'erreur donne l'ordre 1 usuel pour le cas $p = 2$, en particulier (mais pas seulement) pour les équations linéaires du type Laplacien anisotrope. Dans le cas $p \neq 2$, nous montrons sur des cas tests numériques que la méthode se comporte mieux que l'ordre prédit par ce théorème. Ceci est usuel dans ce type de problèmes non-linéaires pour lesquels il est difficile de récupérer des ordres de convergence optimaux par l'analyse (Cf. [BL93, LB93b, LB93a, Cho89]) notamment dans la norme d'énergie, c'est-à-dire celle de $W^{1,p}(\Omega)$.

En revanche, nous montrons que la méthode permet de tirer avantage de raffinements locaux éventuels des maillages au voisinage des singularités (voir la figure VI.3) ou des zones de forte variation de la solution. L'ordre de convergence observé numériquement est le même que pour des maillages conformes usuels et à nombre d'inconnues égal, les maillages raffinés bien choisis fournissent les erreurs les plus faibles.

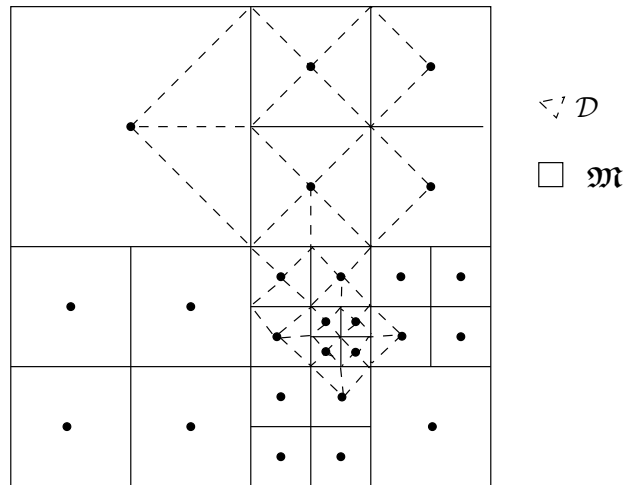


FIG. VI.3 – Un exemple de maillage localement raffiné

2 Le cas des coefficients discontinus

Dans ce travail [15] nous proposons l'adaptation des méthodes DDFV considérées plus haut au cas d'un problème de type (VI.1) dans lequel le flux φ peut admettre des discontinuités spatiales. Dans le cadre éléments finis ce type de problèmes a été considéré par exemple dans [FS90, Liu99, Liu00, Žen90]. Dans ces travaux, le problème peut faire intervenir le couplage bidomaine de deux opérateurs non-linéaires pour différentes valeurs de p . L'approche présentée ci-dessous peut s'adapter à ce cadre mais nous présentons seulement ici le cas où, malgré les discontinuités, le flux φ a le même ordre p de dégénérescence/croissance dans tout le domaine.

Le schéma présenté plus haut est bien entendu convergent dans ce cadre (le théorème VI.2 s'applique) mais les estimations d'erreurs obtenues dans le théorème VI.3 ne sont plus valables. Il ne s'agit pas ici d'une difficulté technique mais d'une réelle perte de consistance du schéma au voisinage des discontinuités des coefficients. Ce phénomène est bien connu déjà dans le cas linéaire monodimensionnel et l'on sait qu'il faut alors soigneusement définir le flux numérique à la discontinuité pour retrouver la consistance (et donc la convergence à l'ordre 1 pour le cas linéaire).

Je présente dans la section 2.1 une illustration de la problématique et du remède que l'on peut y apporter dans le cas monodimensionnel en supposant que le flux φ présente un unique saut à l'origine. Dans la section 2.2, je décris comment nous avons généralisé ce travail de construction d'un flux numérique consistant au cadre général non-linéaire sur un maillage 2D de type DDFV décrit ci-dessus et les résultats d'estimation d'erreur que nous avons obtenus.

Le schéma ainsi obtenu, appelé m-DDFV, se révèle à première vue assez délicat à mettre en oeuvre en pratique car il nécessite *a priori* de résoudre un système non-linéaire défini par des fonctions qui ne sont pas connues explicitement. C'est pourquoi je décris dans la section 2.3, un algorithme de type descente vers un point-selle que nous avons établi (en s'inspirant des travaux de Glowinski notamment [Glo84, GM75]) et dont nous montrons la convergence. Cet algorithme a pour propriétés de démêler les couplages dans le schéma et donc de ramener la résolution du système global à l'inversion d'un seul système linéaire (plusieurs fois) et à la résolution simultanée d'équations non-linéaires **indépendantes** et de **petite dimension**.

Ce schéma a été implémenté dans notre code de calcul et a permis d'illustrer le gain de consistance effectivement obtenu par l'utilisation du schéma m-DDFV en lieu et place du schéma DDFV usuel.

2.1 Illustration dans le cas mono-dimensionnel

On considère le problème (VI.1) posé sur $\Omega =]-1, 1[$ (on note alors x la variable d'espace) avec $\varphi(x, \xi) = \varphi_-(\xi)$ si $x < 0$ et $\varphi(x, \xi) = \varphi_+(\xi)$ si $x > 0$. On suppose que φ_- et φ_+ sont deux applications strictement monotones de \mathbb{R} dans \mathbb{R} telles que les hypothèses (\mathcal{H}_2) et (\mathcal{H}_3) sont satisfaites.

Le problème s'écrit donc comme un problème de transmission

$$\begin{cases} -\partial_x(\varphi_-(\partial_x u_e)) = f(x), & \text{si } x < 0, \\ -\partial_x(\varphi_+(\partial_x u_e)) = f(x), & \text{si } x > 0, \\ u_e(-1) = u_e(1) = 0, \\ \varphi_-(\partial_x u_e(0^-)) = \varphi_+(\partial_x u_e(0^+)). \end{cases} \quad (\text{VI.3})$$

On se donne maintenant un maillage volumes finis de Ω respectant la discontinuité, c'est-à-dire une subdivision $x_0 = -1 < \dots < x_N = 0 < \dots < x_{N+M} = 1$ de $[-1, 1]$. On définit note $\kappa_{i+\frac{1}{2}}$ la maille $[x_i, x_{i+1}]$, $i \in \{0, N+M-1\}$ et $x_{i+\frac{1}{2}}$ son centre. La méthode volumes finis associe à chaque $x_{i+\frac{1}{2}}$ une inconnue $u_{i+\frac{1}{2}}$. On appelle $u^\tau = (u_{i+\frac{1}{2}})_{0 \leq i \leq N+M-1}$ la solution approchée. On peut alors définir les quotients différentiels (de type différences finies) suivants :

$$\nabla_i u^\tau = \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}}, \quad i \in \{1, N+M-1\},$$

avec $u_{-\frac{1}{2}} = u_{N+M+\frac{1}{2}} = 0$ et $x_{-\frac{1}{2}} = -1$, $x_{N+M+\frac{1}{2}} = 1$ pour prendre en compte les conditions au bord. Le schéma volumes finis s'obtient alors en intégrant le problème (VI.3) sur chaque volume de contrôle :

$$-\int_{\kappa_{i+\frac{1}{2}}} \partial_x(\varphi(x, \partial_x u_e)) dx = \int_{\kappa_{i+\frac{1}{2}}} f(x) dx, \quad \forall i \in \{1, \dots, N+M-1\}.$$

En intégrant par parties et en remplaçant les flux exacts par des flux numériques on obtient la définition du schéma

$$-F_{i+1} + F_i = \int_{\kappa_{i+\frac{1}{2}}} f(x) dx, \quad \forall i \in \{0, N+M-1\}, \quad (\text{VI.4})$$

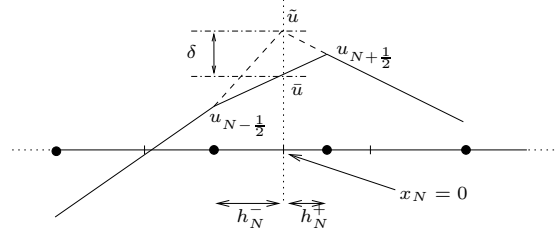


FIG. VI.4 – Illustration du cas monodimensionnel

où F_i , $i \in \{0, N + M\}$ est le flux numérique correspondant à l'approximation du flux $\varphi(x_i, \partial_x u_e(x_i))$. Loin de la discontinuité $x = 0$, ce flux numérique est construit de façon très usuelle en posant :

$$\begin{cases} F_i = \varphi_-(\nabla_i u^T), & \forall i \in \{0, N - 1\}, \\ F_i = \varphi_+(\nabla_i u^T), & \forall i \in \{N + 1, N + M\}. \end{cases} \quad (\text{VI.5})$$

Comme on l'a vu en introduction le problème est de définir correctement le flux numérique F_N au point de discontinuité $x_N = 0$ car le flux $\varphi(0, \cdot)$ n'est pas bien défini en ce point. Il y a plusieurs façons "naïves" de tenter de résoudre ce problème (qui n'a lieu que sur une seule équation du système discret !). On peut par exemple poser :

$$F_N = \varphi_-(\nabla_N u^T), \text{ ou } F_N = \varphi_+(\nabla_N u^T), \text{ ou } F_N = \frac{1}{2}(\varphi_-(\nabla_N u^T) + \varphi_+(\nabla_N u^T)).$$

Mais, on peut montrer aisément (même dans le cas linéaire) que tous ces choix fournissent en général une approximation non consistante de ce flux.

Le bon moyen de retrouver la consistance est de rendre compte au plan discret de la condition de transmission dans (VI.3). Pour cela il faut introduire une nouvelle inconnue artificielle \tilde{u} au point de discontinuité x_N de sorte que l'on peut définir deux gradients approchés de part et d'autre de 0

$$\nabla_N^+ u^T = \frac{u_{N+1/2} - \tilde{u}}{h_N^+}, \text{ et } \nabla_N^- u^T = \frac{\tilde{u} - u_{N-1/2}}{h_N^-},$$

en posant $h_N^+ = x_{N+1/2} - x_N$ et $h_N^- = x_N - x_{N-1/2}$. En réalité, il est pratique (voir la Figure VI.4) de chercher \tilde{u} sous la forme

$$\tilde{u} = \bar{u} + \delta, \text{ avec } \bar{u} = \frac{h_N^- u_{N+1/2} + h_N^+ u_{N-1/2}}{h_N^- + h_N^+}.$$

La valeur \bar{u} est la valeur en 0 de l'interpolation affine entre $(x_{N-1/2}, u_{N-1/2})$ et $(x_{N+1/2}, u_{N+1/2})$. On a donc

$$\nabla_N^+ u^T = \nabla_N u^T - \frac{\delta}{h_N^+}, \text{ et } \nabla_N^- u^T = \nabla_N u^T + \frac{\delta}{h_N^-}. \quad (\text{VI.6})$$

Il est maintenant nécessaire d'éliminer la nouvelle inconnue δ . Ceci est fait en imposant un équivalent discret de la condition de transmission dans (VI.3), c'est-à-dire

$$\varphi_-(\nabla_N^- u^T) = \varphi_+(\nabla_N^+ u^T). \quad (\text{VI.7})$$

Cette équation définit de façon unique δ comme une fonction $\delta_N(\nabla_N u^T)$ du quotient différentiel $\nabla_N u^T$ car l'application $\delta \mapsto \varphi_-(\nabla_N^- u^T) - \varphi_+(\nabla_N^+ u^T)$ est strictement monotone et tend vers l'infini à l'infini.

On peut maintenant définir le flux numérique à la discontinuité par

$$F_N = \varphi_-\left(\nabla_N u^T + \frac{\delta_N(\nabla_N u^T)}{h_N^-}\right) = \varphi_+\left(\nabla_N u^T - \frac{\delta_N(\nabla_N u^T)}{h_N^+}\right), \quad (\text{VI.8})$$

la dernière inégalité provenant de la définition de $\delta_N(\nabla_N u^T)$. De façon équivalente on peut également écrire

$$F_N = \frac{1}{h_N^- + h_N^+} \left(h_N^- \varphi_-\left(\nabla_N u^T + \frac{\delta_N(\nabla_N u^T)}{h_N^-}\right) + h_N^+ \varphi_+\left(\nabla_N u^T - \frac{\delta_N(\nabla_N u^T)}{h_N^+}\right) \right), \quad (\text{VI.9})$$

ce qui a l'avantage d'être plus symétrique. C'est cette formule qui sera généralisée en dimension 2 par la suite.

Exemple VI.4

Considérons un exemple pour lequel tous les calculs sont explicites. Supposons donc que φ_- et φ_+ sont deux flux de type p -laplacien définis par

$$\begin{aligned} \varphi_-(\xi) &= k_- |\xi + G_-|^{p-2} (\xi + G_-), \quad \forall \xi \in \mathbb{R}, \\ \varphi_+(\xi) &= k_+ |\xi + G_+|^{p-2} (\xi + G_+), \quad \forall \xi \in \mathbb{R}, \end{aligned}$$

où $k_-, k_+ \in \mathbb{R}^+$ et $G_-, G_+ \in \mathbb{R}^2$. L'équation (VI.7) se résout à la main et le flux numérique que l'on obtient pour (VI.9) s'écrit

$$F_N = \left(\frac{k_-^{\frac{1}{p-1}} k_+^{\frac{1}{p-1}} (h_N^- + h_N^+)}{h_N^+ k_-^{\frac{1}{p-1}} + h_N^- k_+^{\frac{1}{p-1}}} \right)^{p-1} |\nabla_N u^\tau + \bar{G}|^{p-2} (\nabla_N u^\tau + \bar{G}),$$

où \bar{G} est la moyenne arithmétique pondérée entre G_1 et G_2 définie par

$$\bar{G} = \frac{h_N^- G_- + h_N^+ G_+}{h_N^- + h_N^+}.$$

Dans le cas linéaire, i.e. quand $p = 2$ ici, on retombe sur l'expression classique de type moyenne harmonique entre les deux coefficients de diffusion k_- et k_+ (voir [EGH00]) :

$$F_N = \frac{k_- k_+ (h_N^- + h_N^+)}{h_N^+ k_- + h_N^- k_+} (\nabla_N u^\tau + \bar{G}).$$

Si on résume cette analyse d'un exemple relativement élémentaire : on a défini une application non-linéaire monotone $\nabla_N u^\tau \mapsto \delta_N(\nabla_N u^\tau)$ grâce à laquelle on a pu définir un flux numérique F_N à la discontinuité qui est elle-aussi une fonction monotone par rapport au quotient différentiel $\nabla_N u^\tau$. Le schéma volumes finis que l'on considère est alors donné par (VI.4), (VI.5) et (VI.8).

Une remarque importante est que l'application δ_N est définie de façon implicite à travers la relation (VI.7) et en général, ne peut pas être calculée explicitement (l'exemple traité plus haut est à ce titre un cas particulier agréable). Ceci peut être considéré *a priori* comme un inconvénient majeur de la méthode pour laquelle la résolution numérique du problème discret semble complexe. On va voir dans la section 2.3 que l'on peut contourner la difficulté en adaptant les méthodes de décomposition-coordination de Glowinski à notre schéma et ainsi obtenir un solveur parfaitement programmable dont on prouve, par ailleurs, la convergence.

2.2 Le cas 2D : définition du nouveau gradient et écriture du schéma

L'esprit de ce travail est essentiellement contenu dans l'analyse du problème modèle présenté ci-dessus. Il est néanmoins non trivial d'adapter ces arguments au cadre général de maillages 2D et de flux *a priori* quelconques. Je ne vais pas décrire en détail les calculs (que l'on peut trouver dans [15]) qui requièrent l'introduction de nombreuses notations. Je vais donc seulement donner les grandes lignes de l'étude en faisant le parallèle avec le paragraphe précédent.

- A partir du gradient discret $\nabla^\tau u^\tau$ défini dans le cadre DDFV (voir la section 1) on construit un nouveau gradient $\nabla^{\mathcal{N}} u^\tau$ constant sur chaque quart de diamant (chaque diamant supposé convexe est découpé en quatre par ses diagonales) par la formule

$$\nabla_{\mathcal{Q}}^{\mathcal{N}} u^\tau = \nabla^{\mathcal{D}} u^\tau + B_{\mathcal{Q}} \delta^{\mathcal{D}},$$

où $\delta^{\mathcal{D}}$ est un vecteur de \mathbb{R}^4 constitué de quatre inconnues artificielles (dont on peut donner une interprétation géométrique) et $B_{\mathcal{Q}}$ est une matrice rectangle de taille 2×4 qui ne dépend que de la géométrie du diamant. Cette formule est l'équivalent bidimensionnel de (VI.6).

- On suppose que le flux φ est continu sur chaque quart de diamant \mathcal{Q} , c'est-à-dire que (\mathcal{H}_{5a}) n'est vraie que pour tous z, z' contenus dans le même quart de diamant et (\mathcal{H}_{5b}) n'est vraie que sur chacun des quarts de diamant. Autrement dit, φ est autorisé à présenter des discontinuités à travers les arêtes du maillage primal et celles du

maillage dual. On se donne alors une approximation $\varphi_{\mathcal{Q}}$ de φ sur \mathcal{Q} , par exemple on peut prendre la moyenne en z de φ sur \mathcal{Q} mais d'autres choix sont possibles.

- On écrit maintenant les conditions de transmission discrètes que l'on souhaite être vérifiées par le schéma. Ceci nous donne quatre relations ; une pour chaque moitié de diagonale de \mathcal{D} . Il s'avère que ces relations s'écrivent

$$\sum_{\mathcal{Q} \in \mathfrak{Q}_{\mathcal{D}}} |\mathcal{Q}|^t B_{\mathcal{Q}} \cdot \varphi_{\mathcal{Q}}(\xi + B_{\mathcal{Q}}\delta) = 0, \quad (\text{VI.10})$$

où on a noté $\xi = \nabla^{\mathcal{D}} u^{\tau}$ le gradient DDFV usuel pour ne pas alourdir les notations. Cette formule non-linéaire doit être vue comme la généralisation de la condition (VI.7).

Comme dans le cas 1D, on démontre que pour tout $\xi \in \mathbb{R}^2$, il existe un unique $\delta \in \mathbb{R}^4$ vérifiant (VI.10). On le note $\delta^{\mathcal{D}}(\xi)$.

- On définit maintenant le nouveau flux numérique sur le diamant \mathcal{D} par

$$\varphi_{\mathcal{D}}^{\mathcal{N}}(\nabla^{\mathcal{D}} u^{\tau}) = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathfrak{Q}_{\mathcal{D}}} |\mathcal{Q}| \varphi_{\mathcal{Q}}(\nabla_{\mathcal{Q}}^{\mathcal{N}} u^{\tau}) = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathfrak{Q}_{\mathcal{D}}} |\mathcal{Q}| \varphi_{\mathcal{Q}} \left(\nabla^{\mathcal{D}} u^{\tau} + B_{\mathcal{Q}} \delta^{\mathcal{D}}(\nabla^{\mathcal{D}} u^{\tau}) \right), \quad (\text{VI.11})$$

qui est à comparer à (VI.9). On obtient donc le nouveau schéma DDFV, appelé m-DDFV en utilisant le flux numérique $\varphi_{\mathcal{D}}^{\mathcal{N}}$ à la place de $\varphi_{\mathcal{D}}$ dans (VI.2).

On montre que ce schéma admet une unique solution vérifiant une estimation *a priori* similaire à celle donnée par le théorème VI.1. De plus, ce schéma m-DDFV conserve lui aussi une éventuelle structure variationnelle du problème initial.

On peut donc maintenant mener l'analyse d'erreur pour ce nouveau schéma. Nous supposons bien sûr pour cela que la solution exacte du problème est dans $W^{2,q}(\Omega)$ l'espace des fonctions dont la restriction à chaque quart de diamant du maillage est de classe $W^{2,q}$ pour $q \geq p$. La méthode générale de preuve est essentiellement la même que celle utilisée pour prouver le théorème VI.3 et repose sur des estimations de consistance des flux. L'une de ces estimations requiert l'analyse de consistance du nouvel opérateur gradient discret $\nabla^{\mathcal{N}}$ (qui est un opérateur non-linéaire et qui dépend du flux φ !), ce qui constitue la difficulté essentielle ici. Contrairement à l'analyse de consistance du gradient DDFV usuel ∇^{τ} qui s'obtient par des développements de Taylor relativement classiques, ici la situation est plus complexe et il est nécessaire d'utiliser à bon escient la relation non-linéaire qui définit cet opérateur *via* les inconnues artificielles $\delta^{\mathcal{D}}$.

Cette étude ne permet pas d'accéder (sans autre hypothèse en tout cas) à la consistance d'ordre 1 de ce nouvel opérateur à laquelle on aurait pu prétendre, on trouve seulement une consistance d'ordre $\frac{1}{p-1}$ pour $p \geq 2$ et d'ordre $p-1$ pour $p < 2$.

En pratique, on utilise un schéma *hybride* qui consiste à prendre le flux numérique usuel $\varphi_{\mathcal{D}}$ sur les diamants dans lesquels le flux est continu et le nouveau flux $\varphi_{\mathcal{D}}^{\mathcal{N}}$ sur les diamants où le flux est discontinu. Ceci revient à choisir les quatre flux approchés $\varphi_{\mathcal{Q}}$ égaux dans les diamants ne voyant pas les discontinuités. Si l'on suppose que les discontinuités du flux sont situées sur des lignes brisées dans Ω alors on aboutit pour ce schéma hybride aux mêmes ordres de convergence que dans le cas régulier. Le résultat précis est le suivant :

Théorème VI.5

Soit \mathcal{T} un maillage DDFV de Ω . On suppose que le flux φ est régulier par morceaux (au sens précisé ci-dessus) et que les discontinuités de φ n'ont lieu que le long d'un nombre fini de lignes brisées dans Ω . On suppose que $u_e \in W^{2,q}(\Omega)$ avec $q = p(p-1)^2$ pour $p \geq 2$ et $q = \frac{p}{(p-1)^2}$ pour $p < 2$. Alors on a

$$\|u_e - u^{\mathfrak{M}}\|_{L^p} + \|u_e - u^{\mathfrak{M}^*}\|_{L^p} + \|\nabla u_e - \nabla^{\mathcal{N}} u^{\tau}\|_{L^p} \leq \begin{cases} C \text{size}(\mathcal{T})^{p-1}, & \text{si } 1 < p \leq 2, \\ C \text{size}(\mathcal{T})^{\frac{1}{p-1}}, & \text{si } p > 2, \end{cases}$$

où u^{τ} est la solution du schéma hybride décrit ci-dessus.

On retrouve en particulier la convergence à l'ordre 1 du schéma dans le cas $p = 2$. Notre résultat couvre donc, comme cas particulier, l'analyse des schémas proposés (mais non analysés) dans [Her03].

On établit par ailleurs dans [15] une étude du schéma m-DDFV général dans le cas où les discontinuités de φ peuvent se produire à l'échelle des mailles. Sans surprise, l'ordre de convergence obtenu est moins bon que celui donné par le Théorème VI.5, mais on trouve tout de même de l'ordre 1 dans le cas $p = 2$. Notre schéma permet donc de traiter le cas de coefficients très oscillants.

2.3 Solveur non-linéaire pour ces schémas

Considérons maintenant des données (maillage, terme source, etc ...) fixées. Le but de ce paragraphe est de décrire une méthode programmable qui permette de calculer la solution du schéma m-DDFV introduit précédemment (la méthode s'applique également au schéma DDFV usuel). Ceci est important en vue des applications car le schéma défini plus haut est hautement implicite et non-linéaire (à cause de l'application δ^D qui n'est pas définie explicitement) il est donc difficile par exemple de mettre en oeuvre une méthode de type gradient conjugué non-linéaire, ou Newton. Décrivons tout d'abord l'algorithme que l'on propose :

On se donne une initialisation $\lambda_Q^0 \in \mathbb{R}$, $p_Q^0 \in \mathbb{R}^2$ pour tout quart de diamant Q et $\delta_D^0 \in \mathbb{R}^4$ pour tout diamant D . On se donne enfin un paramètre positif $\gamma > 0$ et une famille $\mathcal{A} = (A_Q)_Q$ de matrices symétriques définies positives de taille 2. Ces matrices jouent le rôle de paramètres d'augmentation hétérogènes et anisotropes. Pour tout n on effectue alors les calculs suivants

1. On cherche $(u^{\tau,n}, \delta_D^n) \in \mathbb{R}^T \times (\mathbb{R}^4)^{\mathfrak{D}}$ solution du problème **couplé et linéaire** suivant

$$\begin{aligned} & 2 \sum_{Q \in \mathfrak{Q}} |Q| \left(A_Q (\nabla^D u^{\tau,n} + B_Q \delta_D^n - g_Q^{n-1}), \nabla^D v^\tau \right) \\ &= \sum_{\kappa} |\kappa| f_\kappa v_\kappa + \sum_{\kappa^*} |\kappa^*| f_{\kappa^*} v_{\kappa^*} + 2 \sum_{Q \in \mathfrak{Q}} |Q| (\lambda_Q^{n-1}, \nabla^D v), \quad \forall v^\tau \in \mathbb{R}^T. \end{aligned} \quad (\text{VI.12})$$

$$\sum_{Q \in \mathfrak{Q}_D} |Q|^t B_Q A_Q (B_Q \delta_D^n + \nabla^D u^{\tau,n} - g_Q^{n-1}) - \sum_{Q \in \mathfrak{Q}_D} |Q|^t B_Q \lambda_Q^{n-1} = 0, \quad \forall D \in \mathfrak{D}.$$

La seconde équation est locale à chaque diamant et linéaire. Elle permet d'exprimer δ_D^n en fonction de $\nabla^D u^{\tau,n}$ en inversant la matrice de taille 4 définie par $\sum_Q |Q|^t B_Q A_Q B_Q$. On reporte ce calcul dans la première équation et on obtient un problème linéaire sur $u^{\tau,n}$ que l'on peut résoudre. La matrice de ce système linéaire est la même pour toutes les itérations de la méthode (elle est même indépendante du flux φ) ce qui permet d'envisager, au moins sur les maillages pas trop fins, l'utilisation de solveurs linéaires par des méthodes directes par exemple.

2. Pour tout quart de diamant $Q \in \mathfrak{Q}$, on calcule g_Q^n en résolvant

$$\varphi_Q(g_Q^n) + \lambda_Q^{n-1} + A_Q(g_Q^n - \nabla^D u^{\tau,n} - B_Q \delta_D^n) = 0. \quad (\text{VI.13})$$

Cette étape du calcul est la seule étape non-linéaire. Elle est locale à chaque quart de diamant et concerne une équation monotone dans \mathbb{R}^4 . On peut par exemple utiliser ici une méthode de Newton qui s'avère facile à mettre en oeuvre et efficace. Cette étape est donc peu coûteuse et parallélisable par exemple.

3. On met enfin à jour le multiplicateur λ_Q^n par

$$\lambda_Q^n = \lambda_Q^{n-1} + \gamma A_Q (g_Q^n - \nabla^D u^{\tau,n} - B_Q \delta_D^n), \quad \forall Q.$$

L'origine exacte de cette méthode numérique, provient de l'étude du cas variationnel (i.e. quand le flux φ est le gradient d'un potentiel convexe Φ) et est détaillée dans [15]. L'algorithme est largement inspiré des travaux de Glowinski [Glo84]. En effet, si l'on choisit pour tout quart de diamant $A_Q = r \text{Id}$ où $r > 0$ est fixé, on retrouve la méthode de décomposition/coordination appliquée au Lagrangien augmenté usuel dans ce type de situation.

Le point-clé est que, même dans le cas non-variationnel et en prenant des termes d'augmentation hétérogènes et anisotropes, la méthode proposée converge :

Théorème VI.6

Pour toute famille \mathcal{A} de matrices d'augmentation et pour tout $\gamma \in]0, \frac{1+\sqrt{5}}{2}]$, la suite $(u^{\tau,n})_n$ donnée par l'algorithme précédent converge vers l'unique solution u^τ du schéma m-DDFV. De plus la suite $(g_Q^n)_n$ converge vers le gradient discret $\nabla_Q^N u^\tau$ correspondant.

2.4 Illustrations numériques

Illustrons le gain en précision et en ordre obtenu grâce au schéma m-DDFV en comparaison du schéma DDFV usuel présenté au début du chapitre dans le cas de coefficients discontinus. On se place dans le cas où Ω est le carré $]0, 1[^2$. Le

flux est défini par

$$\begin{cases} \text{si } z_1 < 0.5, & \varphi(z, \xi) = |\xi|^{p-2}\xi, \\ \text{si } z_1 > 0.5, & \varphi(z, \xi) = (A\xi, \xi)^{\frac{p-2}{2}} A\xi, \text{ avec } A = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}. \end{cases}$$

Il s'agit donc d'un problème de transmission entre deux opérateurs de type p -laplacien. On choisit une solution exacte u_e polynomiale par morceaux (et satisfaisant la condition de saut à l'interface bien sûr) ce qui est possible explicitement dans le cas présent dès que α et β sont plus grands que 1 par exemple. On trace alors les erreurs en norme L^∞ et $W^{1,p}$ (plus exactement l'erreur L^p sur le gradient) en fonction du pas du maillage (on a choisi une famille de maillages triangulaires).

La Figure VI.5 montre les résultats obtenus pour $\alpha = 2$, $\beta = 5$ et $p = 3$, c'est-à-dire dans un cas anisotrope avec une hétérogénéité modérée, alors que la Figure VI.6 montre les résultats obtenus pour $\alpha = \beta = 10$ et $p = 5$ qui est un cadre isotrope mais très hétérogène (le rapport entre les coefficients de part et d'autres de la discontinuité vaut $10^{2.5}$).

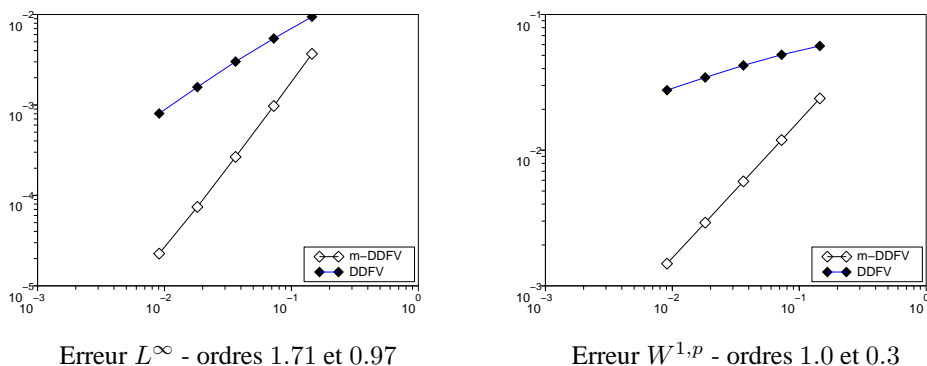


FIG. VI.5 – Cas $\alpha = 2$, $\beta = 5$ et $p = 3$. Schéma DDFV usuel (en bleu et \blacklozenge) et schéma m-DDFV (en noir et \diamond)

L'amélioration apportée par le schéma m-DDFV est bien claire, l'ordre de convergence étant très nettement augmenté dans tous les cas. Nous remarquons aussi que les erreurs sont plus faibles même pour les maillages grossiers ce qui est un point important du point de vue pratique. En effet, dans les applications les tailles de maillage ne tendent pas vers 0, et donc un schéma possédant un ordre plus grand mais dont il faut attendre un très fin raffinement pour en ressentir les bénéfices n'aurait pas été très satisfaisant.

Il faut également remarquer que les estimations d'erreur théoriques obtenues sont toujours moins bonnes (dès que p s'éloigne de 2) que les vitesses de convergence observées numériquement. Ceci est classique dans l'analyse des méthodes numériques pour ce type de problèmes et des estimations d'erreur optimales ne sont bien souvent obtenues que dans des normes plus faibles ou dans des solutions particulières (voir la Section 4 du chapitre V).

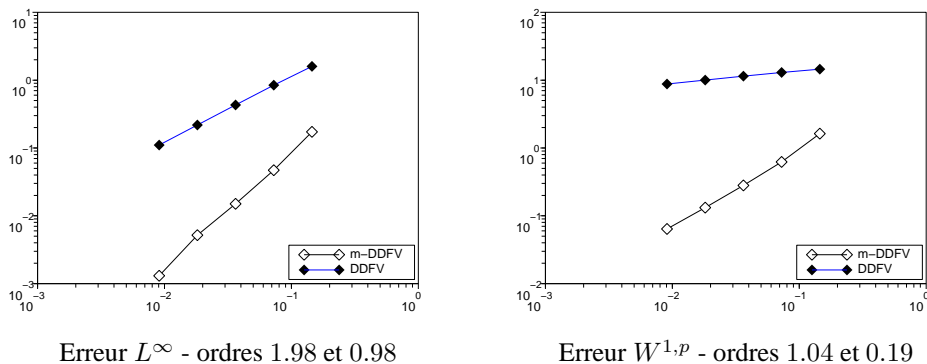


FIG. VI.6 – Cas $\alpha = \beta = 10$, et $p = 5$. Schéma DDFV usuel (en bleu et \blacklozenge) et schéma m-DDFV (en noir et \diamond)

En conclusion de ce chapitre, on illustre les propriétés de convergence de la méthode de décomposition coordination dans le premier cas test considéré ici ($\alpha = 2$, $\beta = 5$ et $p = 3$), pour le maillage le plus fin (pas du maillage $\sim 9.10^{-3}$).

Ainsi la figure VI.7 montre l'évolution du résidu de la méthode ainsi que de l'erreur par rapport à la solution exacte en normes L^p et $W^{1,p}$ en fonction des itérations. La figure de gauche concerne le cas usuel d'un terme d'augmentation homogène et isotrope $A_Q = r \text{Id}$ avec $r = 1.5$ et $\gamma = 1.0$. La figure de droite montre est obtenue en utilisant un terme d'augmentation anisotrope et hétérogène avec $A_Q = r \text{Id}$ dans le sous-domaine de gauche et $A_Q = rA$ dans le sous-domaine de droite.

On observe tout d'abord que la méthode est bien une méthode de type *gradient* pour laquelle la norme du résidu décroît au cours des itérations ce qui garantit une bonne stabilité de la méthode. Par ailleurs, comme on pouvait s'y attendre, un bon choix de matrices d'augmentation A permet d'assurer une convergence plus rapide de l'algorithme vers une solution approchée suffisamment précise. Ainsi si l'on utilise la méthode d'augmentation usuelle, il faut attendre environ 160 itérations et un résidu $\sim 5.10^{-7}$ pour que les erreurs dues au schéma soient atteintes alors que dans le cas d'un terme d'augmentation hétérogène et anisotrope, l'erreur du schéma est atteinte au bout de 40 itérations environ et un résidu $\sim 5.10^{-6}$.

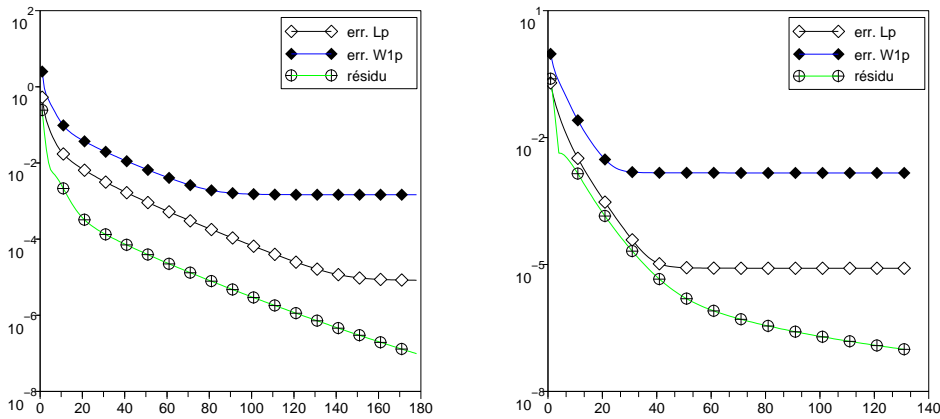


FIG. VI.7 – Convergence du solveur itératif. Augmentation isotrope (dessin gauche) et anisotrope (dessin droite)

Chapitre VII

QUELQUES SCHÉMAS NON STANDARD POUR DES PROBLÈMES ELLIPTIQUES LINÉAIRES

1 Définition implicite des flux numériques sur maillage non orthogonal

Suite notamment aux travaux de R. Cautrès, F. Hubert et R. Herbin sur les méthodes de décomposition de domaines en volumes finis [CHH04], je me suis intéressé au problème de non-consistance des flux numériques pour les schémas usuels type VF4 pour les équations elliptiques linéaires qui peut se produire lorsque la géométrie du maillage n'est pas adaptée au problème que l'on veut étudier comme dans la référence ci-dessus.

Ainsi dans le cas de la résolution du laplacien par exemple, on sait (voir [EGH00]) que pour assurer la consistance des flux numériques VF4 avec $\int_{\sigma_{\kappa\mathcal{L}}} \nabla u \cdot \mathbf{n} \, ds$ sur les arêtes, il faut que les points de contrôle en lesquels on approche la solution vérifient la propriété d'orthogonalité :

$$(x_{\kappa}x_{\mathcal{L}}) \perp \sigma_{\kappa\mathcal{L}}. \quad (\text{VII.1})$$

Ce cas favorable est illustré dans la figure VII.1.

Malheureusement, dans de nombreuses situations cette condition peut ne pas être vérifiée :

- En décomposition de domaines, si les différents maillages de la décomposition sont choisis indépendamment (ce qui est le cas intéressant !).
- Sur des maillages raffinés localement, même avec des volumes de contrôle rectangulaires.
- Sur des maillages plus généraux que des triangles (par exemple des quadrangles), il n'est pas possible en général de construire des points $(x_{\kappa})_{\kappa}$ satisfaisant la condition (VII.1).
- Dès que l'on souhaite discrétiser une équation de diffusion plus générale

$$-\operatorname{div}(A\nabla u) = f, \quad (\text{VII.2})$$

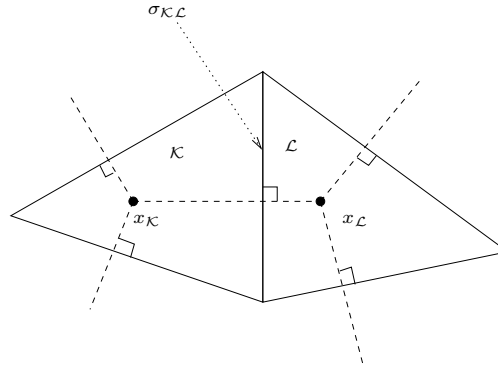


FIG. VII.1 – Situation classique pour la diffusion isotrope

où A est une matrice symétrique définie positive. Dans ce cas la condition géométrique nécessaire à la consistance du schéma à deux points devient une condition de A -orthogonalité

$$A^{-1}(x_K x_L) \perp \sigma_{KL}, \quad (\text{VII.3})$$

et dans ce cas le choix usuel des maillages triangles avec les centres des cercles circonscrits comme points de contrôle devient non-admissible.

Les situations où la condition (VII.1) (ou bien (VII.3) si on regarde l'opérateur $-\text{div}(A\nabla\cdot)$) n'est pas vérifiée sont bien entendu préjudiciables puisque les flux ne sont pas consistants sur les arêtes concernées. Ainsi, si l'on écrit les schémas "classiques" dans ce type de situation, on perd en qualité de convergence. Les auteurs ci-dessus ont montré qu'en décomposition de domaines pour une diffusion isotrope (où les arêtes problématiques sont seulement situées à la frontière des sous-domaines), on obtient en général un ordre de convergence en norme H^1 discrète en $h^{\frac{1}{2}}$ au lieu de l'ordre h habituel et que cet ordre de convergence est optimal en général (sauf dans les cas de géométries très particulières des maillages).

Par contre, dans des cas où toutes les arêtes sont "non-conformes" la situation est incontrôlable et la convergence des schémas n'est plus assurée.

Plusieurs solutions ont été récemment proposées pour traiter ce problème que l'on peut *grosso modo* classer en quatre catégories :

1. Les approches de Coudière, Vila, Villedieu [CVV99], Faille [Fai92], Aavatsmark [ABBM98a, ABBM98b, Aav02], ou encore Le Potier [LP05b, LP05a] : A partir des points de contrôle donnés, une procédure de reconstruction (de type interpolation par exemple) est proposée pour fournir une approximation de la solution en de nouveaux points (par exemple les sommets des volumes de contrôle) permettant de calculer de façon consistante les flux numériques sur chaque arête du maillage, en reconstruisant ainsi une approximation de toutes les composantes du gradient.
2. Schémas *VF gradient* de Eymard, Gallouët, Herbin [EGH06] : Dans le cas de la diffusion anisotrope mais sur des maillages admissibles au sens où (VII.1) est vérifiée, ces auteurs reconstruisent un gradient discret sur chaque volume de contrôle à partir des inconnues sur la maille et sur les mailles voisines. Ensuite, le schéma peut s'écrire sous une forme variationnelle proche de celle utilisée pour les méthodes éléments finis. Le flux numérique sur une arête dépend alors des inconnues situées dans les volumes de contrôle adjacents à celle-ci mais aussi de tous leurs voisins, ce qui conduit à un stencil assez large du schéma.
3. Les schémas *DDFV* introduits par Hermeline [Her00, Her03] et Domelevo et Omnès [DO05, DDO05] et dont le principe est rappelé dans le chapitre VI. La construction géométrique de base est la même que pour les schémas *diamants* de [CVV99], à ceci près qu'on considère maintenant les valeurs de l'inconnue aux sommets des mailles primales comme des inconnues à part entière du schéma pour lesquels une équation est obtenue en intégrant le problème de départ sur les mailles duales. Cette approche double essentiellement le nombre d'inconnues en 2D mais a pour avantage de respecter les propriétés du système, notamment la symétrie.
4. Schémas *VF mixtes* de Droniou, Eymard [DE05] : Ces auteurs rajoutent le gradient discret de la solution comme nouvelles inconnue constante par maille ainsi que les flux numériques comme nouvelle inconnue sur chaque

arête. Ceci augmente également de façon assez importante le nombre total d'inconnues du problème, à maillage fixé, même si on peut par des manipulations algébriques réduire le nombre de ces inconnues (celui-ci étant au final comparable à celui des schémas DDFV). Par ailleurs, ces schémas nécessitent l'utilisation de termes de pénalisation pour assurer l'existence et l'unicité des solutions (sauf dans le cas particulier des maillages dits *simpliciaux*). Par ailleurs, l'étude de l'erreur pour un tel schéma ne permet à ce jour que d'établir la convergence à l'ordre $\frac{1}{2}$ même si les résultats numériques semblent montrer que la convergence a lieu à l'ordre 1.

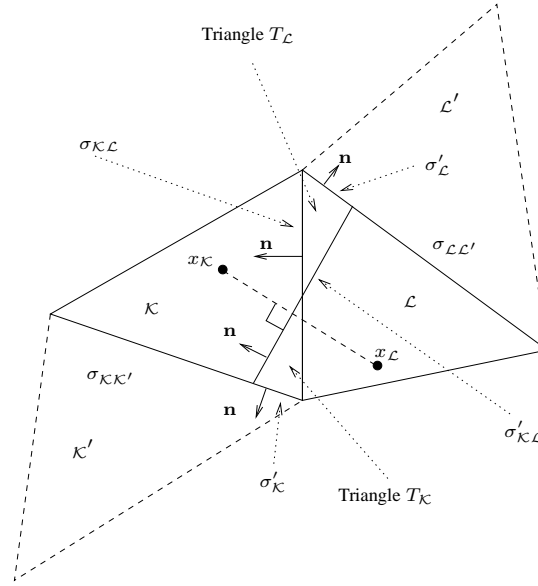


FIG. VII.2 – Situation non-consistante

Dans le présent travail [16], j'ai choisi de m'intéresser à ce problème *via* une approche différente (figure VII.2) : au lieu de tenter d'adapter la géométrie des points de contrôle à celle des arêtes (par interpolation ou par ajout de nouvelles inconnues), j'ai proposé d'essayer d'adapter la géométrie des arêtes à celle des points de contrôle qui sont des données du problème.

Considérons par exemple le cas de l'équation de diffusion (VII.2). Le principe de construction des schémas est le suivant : connaissant les arêtes du maillage et les points de contrôle, on essaie de construire de "nouvelles arêtes" orthogonales aux directions $A^{-1}(x_K x_L)$ et à travers lesquelles on peut écrire une approximation consistante du flux par une formule à deux points usuelle. Bien entendu ces nouvelles arêtes ne sont pas les arêtes du maillage original.

Néanmoins (voir la figure VII.2 dans le cas isotrope), en intégrant l'équation sur le "sablier" formé des triangles T_L et T_K , on peut relier les flux artificiels introduits (dont on connaît une approximation consistante) aux flux numériques réels pour le maillage de départ. On obtient

$$\begin{aligned} \int_{T_K} f \, dx - \int_{T_L} f \, dx &= - \int_{T_K} \operatorname{div}(A \cdot \nabla u) \, dx + \int_{T_L} \operatorname{div}(A \cdot \nabla u) \, dx \\ &= - \int_{\sigma'_{K,L}} \nabla u \cdot \mathbf{An} \, ds + \int_{\sigma_{K,L}} \nabla u \cdot \mathbf{An} \, ds - \int_{\sigma'_K} \nabla u \cdot \mathbf{An} \, ds + \int_{\sigma'_L} \nabla u \cdot \mathbf{An} \, ds. \end{aligned}$$

On peut alors par exemple choisir la nouvelle arête pour que les aires de T_K et de T_L soient égales, ce qui permet de rendre le terme de gauche petit quand f est régulière. Quoiqu'il en soit ce terme de gauche est parfaitement connu, c'est un terme source dans notre schéma noté $G_{K,L}$.

Il reste donc une relation entre quatre flux : le flux à travers $\sigma_{K,L}$ que l'on cherche à exprimer pour écrire le schéma, le flux à travers $\sigma'_{K,L}$ que l'on sait approcher de façon consistante (car par construction $\sigma'_{K,L} \perp A^{-1}(x_K x_L)$) et les deux flux restants qui sont des "bouts" de flux à travers les autres arêtes des triangles κ et ℓ .

Ainsi on obtient une relation entre ces différents flux numériques

$$F_{K,L} = |\sigma'_{K,L}| \frac{u_K - u_L}{d_{K,L}} + F_{\sigma'_K} - F_{\sigma'_L} + G_{K,L},$$

où σ'_{κ} et σ'_{ℓ} sont les parties des arêtes $\sigma_{\kappa\kappa'}$ et $\sigma_{\ell\ell'}$ qui sont des côtés des triangles T_{κ} et T_{ℓ} . Il est alors naturel d'approcher les flux à travers ces parties d'arêtes proportionnellement aux flux numériques à travers les arêtes $\sigma_{\kappa\kappa'}$ et $\sigma_{\ell\ell'}$. Au final, on obtient pour chaque arête du maillage, une relation du type

$$F_{\kappa\ell} = |\sigma'_{\kappa\ell}| \frac{u_{\kappa} - u_{\ell}}{d_{\kappa\ell}} + \tau_{\kappa\ell\kappa'} F_{\kappa\kappa'} - \tau_{\kappa\ell\ell'} F_{\ell\ell'} + G_{\kappa\ell}, \quad (\text{VII.4})$$

où les coefficients $\tau_{\kappa\ell\kappa'} = \frac{|\sigma'_{\kappa}|}{|\sigma_{\kappa\kappa'}|}$ et $\tau_{\kappa\ell\ell'} = \frac{|\sigma'_{\ell}|}{|\sigma_{\ell\ell'}|}$ sont des quantités géométriques aisément calculables et $G_{\kappa\ell}$ est un terme source donné.

Ainsi les flux numériques sont obtenus de façon implicite (et non pas par une formule comme dans les cas usuels) en résolvant l'ensemble des équations (VII.4) pour toutes les arêtes du domaine. Dans le cas général, ce schéma volumes finis se met sous la forme d'un système linéaire du type

$$E(\text{Id} + M(T))^{-1} Du = b, \quad (\text{VII.5})$$

où (une orientation étant choisie pour chaque arête) :

- E est la matrice rectangle à n_v (= nb de volumes de contrôle) lignes et n_a (= nb d'arêtes) colonnes représentant le bilan des flux discrets,
- D est la matrice rectangle à n_a lignes et n_v colonnes qui associe aux valeurs $(u_{\kappa})_{\kappa}$ les flux approchés à travers les nouvelles arêtes $\sigma'_{\kappa\ell}$

$$F_{\sigma'_{\kappa\ell}} = |\sigma'_{\kappa\ell}| \frac{u_{\kappa} - u_{\ell}}{d_{\kappa\ell}}.$$

- $I + M(T)$ est la matrice de définition implicite des flux $F_{\sigma_{\kappa\ell}}$ en fonction de $F_{\sigma'_{\kappa\ell}}$ donnée par (VII.4) (sans le terme $G_{\kappa\ell}$) et qui ne dépend que de tous les coefficients $\tau_{\kappa\ell\kappa'}, \dots$ notés dans leur ensemble T .
- b contient le second membre usuel du schéma VF4 (i.e. les intégrales du terme source sur chaque volume de contrôle) mais aussi la contribution des termes $G_{\kappa\ell}$ dans l'équation (VII.4). Cette contribution peut être négligée si le terme source est régulier et que l'on a choisi les nouvelles arêtes de sorte que les mesures des triangles T_{κ} et T_{ℓ} soient égales.

Dans le cas où le maillage est orthogonal, la matrice $M(T)$ est nulle et on retrouve le schéma VF4 usuel.

Notons que la matrice $I + M(T)$ est très creuse avec un profil agréable (au plus deux coefficients extra-diagonaux non nuls par ligne) et se prête fort bien à la résolution par une méthode directe du type LU avec renumérotation des lignes et des colonnes (qu'on peut sophistiquer à l'envie). On peut alors résoudre le système (VII.5) par une méthode itérative du type

$$ED(u^{k+1} - u^k) = b - E(\text{Id} + M(T))^{-1} Du^k,$$

qui nécessite seulement l'inversion de la matrice ED c'est-à-dire essentiellement de la matrice du schéma VF4 standard dans laquelle on a remplacé les mesures des arêtes $|\sigma_{\kappa\ell}|$ par celles des nouvelles arêtes $|\sigma'_{\kappa\ell}|$ et de la matrice $(\text{Id} + M(T))$.

Pour améliorer cette méthode de descente on peut utiliser des méthodes de type gradient conjugué (par exemple CGS) préconditionnées par la matrice ED . Dans les tests numériques effectués, la résolution du système (VII.5) a nécessité au plus une petite dizaine d'itérations.

Remarquons enfin que, dans certaines situations, le calcul implicite des flux numériques est en réalité explicite (autrement dit l'inverse de la matrice $\text{Id} + M(T)$ se calcule explicitement). Ainsi, quand chaque maille du domaine a au plus une seule arête "atypique", comme dans la majorité des cas de décomposition de domaines pour des équations isotropes, les flux $F_{\kappa\kappa'}$ et $F_{\ell\ell'}$ dans la formule (VII.4) sont connus explicitement (voir le point ci-dessus) ce qui fournit aussi l'expression de $F_{\kappa\ell}$. Dans ce cas précis, la méthode n'est pas plus coûteuse que le schéma VF4.

Enfin, on peut établir un théorème de convergence et d'estimation d'erreur d'ordre 1, en normes H^1 discrète et L^2 pour ce schéma sous une condition classique de régularité des maillages et sous la condition que le défaut d'orthogonalité entre $A^{-1}(x_{\kappa}x_{\ell})$ et les arêtes ne soit pas trop important (c'est-à-dire dès que les coefficients τ_{**} sont uniformément bornés par une constante universelle explicite). Comme souvent, les résultats numériques obtenus montrent que cette convergence a encore lieu dans des cas de maillages déformés de façon plus importante.

Dans la Figure VII.3, nous représentons les erreurs L^2 et H^1 en fonction du pas du maillage pour la résolution du problème de Laplace sur un maillage triangulaire. La première courbe (noir et \diamond) correspond à l'utilisation du schéma VF4 avec les centres de gravité; on constate en effet la non-consistance et donc la non-convergence du schéma. La seconde courbe (bleu et \blacklozenge) correspond à l'utilisation du schéma VF4 avec les centres des cercles circonscrits; dans ce

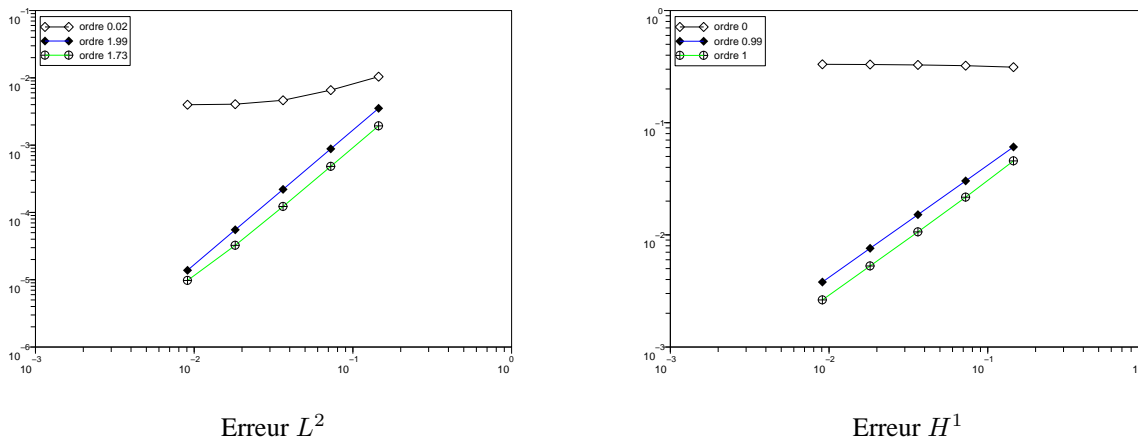


FIG. VII.3 – Equation de Laplace - comparaison schéma VF4 / schéma à flux implicites

cas la condition d'orthogonalité est vérifiée par construction et on constate la convergence à l'ordre 1 en norme H^1 et à l'ordre 2 en norme L^2 . Enfin, la troisième courbe (vert et \oplus) représente les résultats du schéma à flux implicite présenté dans ce chapitre lorsque l'on considère les centres de gravité des triangles comme points de contrôle ; on observe un comportement identique à celui du schéma VF4 dans le cas conforme.

Enfin, dans la Figure VII.4 on montre pour les mêmes maillages et les mêmes schémas les résultats obtenus pour la résolution d'un problème elliptique anisotrope $-\operatorname{div}(A\nabla u) = f$ avec $A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$. Dans ce cas, le schéma VF4 ne converge évidemment pas ni pour les centres de gravité, ni pour les centres des cercles circonscrits. En revanche, on observe le bon comportement du schéma VF à flux implicites à la fois en norme L^2 et en norme H^1 .

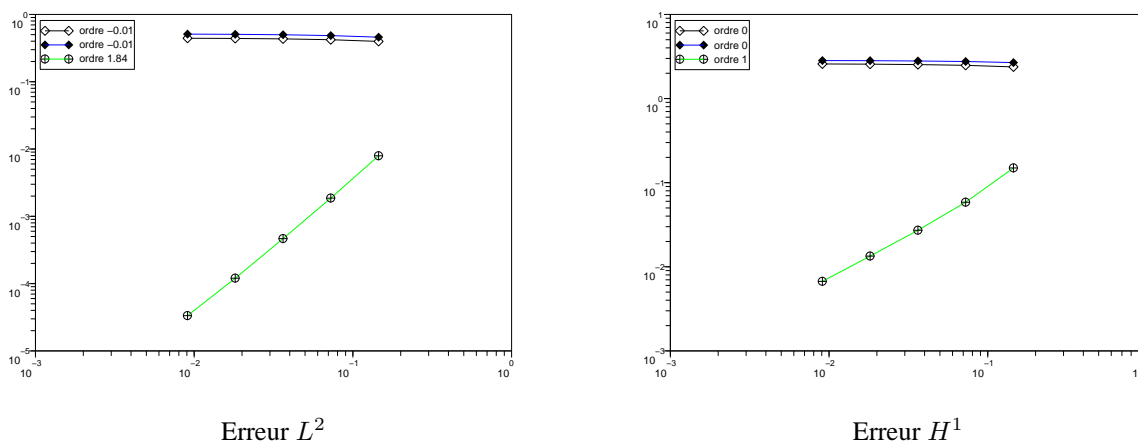


FIG. VII.4 – Equation de diffusion anisotrope - comparaison schéma VF4 / schéma à flux implicites

2 Modèles asymptotiques d'écoulements en milieux poreux fracturés

On se propose ici (en collaboration avec P. Angot et F. Hubert, voir [17] et [21]) et dans le cadre du GDR MOMAS, d'étudier et de valider des modèles asymptotiques d'écoulements en milieux poreux fracturés. La configuration initiale est la suivante : on a un milieu poreux (appelé *la matrice*) caractérisé par un tenseur de perméabilité \mathbf{K} à l'intérieur

duquel se trouve une zone de faible épaisseur b_f (appelée *la fracture*) dans laquelle la perméabilité du milieu \mathbf{K}_f est très différente de celle de la matrice et peut être fortement anisotrope. On peut penser aux cas limites d'une perméabilité de fracture très faible (la fracture est alors une barrière dans le milieu poreux) ou au contraire la perméabilité de la fracture peut être très grande et donc engendrer un écoulement important en son sein. On s'intéresse pour simplifier au cas d'une unique fracture ce qui est bien sûr un peu académique. Néanmoins toute l'analyse proposée permet de considérer des situations plus réalistes où le milieu fracturé comporte de nombreuses fractures dont les propriétés peuvent être éventuellement différentes.

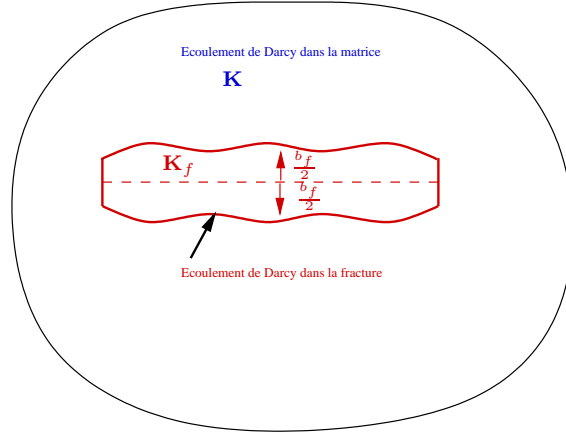


FIG. VII.5 – Configuration pour le modèle à "double-perméabilité".

A des fins de résolution numérique, il est très délicat, et consommateur en ressources de calcul, de s'attaquer directement au problème complet nécessitant un maillage très fin à l'intérieur de la fracture.

L'idée est donc d'assimiler la fracture à une zone d'épaisseur nulle Σ à travers laquelle la pression et le champ de vitesse peuvent connaître des discontinuités. Ces discontinuités sont liées par des relations asymptotiques qui peuvent être ou bien des relations algébriques ponctuelles (modèle d'ordre 0) ou des équations aux dérivées partielles dans les variables tangentielles le long de la surface Σ . Cette approche avait déjà été considérée dans [MJR05] mais en se restreignant au cas de fractures rectilignes partageant le domaine en deux sous-domaines disjoints (voir également [FFN⁺02] et [BMTA, AT99]).

Nous proposons dans ce travail une étude plus complète du modèle notamment dans le cas de fractures entièrement immergées dans la matrice. Ce modèle est obtenu formellement par une étude de la limite asymptotique $b_f \rightarrow 0$ dans les équations initiales et s'écrit en 2D de la façon suivante : le fluide obéit à l'équation de Darcy dans la matrice

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{v}_p &= h \text{ dans } \Omega, \\ \mathbf{v}_p &= -\frac{1}{\mu} \mathbf{K} \cdot (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \text{ dans } \Omega, \end{aligned} \quad (\text{VII.6})$$

avec des conditions aux limites de Dirichlet ou de Neumann pour la pression p , et vérifie de plus l'équation asymptotique monodimensionnelle posé sur la surface de discontinuité Σ et défini par

$$\begin{aligned} \nabla_{\tau} \cdot (b_f(s) v_f) &= b_f(s) h_f - \llbracket \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{n} \rrbracket, \\ \left[\frac{v_f}{\nabla_p \cdot \mathbf{n}} \right]_{\Sigma} &= -\frac{1}{\mu} \mathbf{K}_f \cdot (\nabla_{\Sigma} p - \rho \mathbf{g}), \\ p_f &= \bar{p}|_{\Sigma} + (2\xi - 1) \left(\frac{b_f(s)\mu}{4\mathbf{K}_{f,n}} \llbracket \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{n} \rrbracket \right), \end{aligned} \quad (\text{VII.7})$$

où τ , \mathbf{n} désignent respectivement la tangente et la normale à Σ , $\llbracket a \rrbracket$ et $\bar{a}|_{\Sigma}$ désignent resp. le saut et la moyenne d'une grandeur a discontinue à travers la surface Σ . De plus, $b_f(s)$ désigne l'épaisseur de la fracture à l'abscisse curviligne s . Enfin, p_f est la pression de fracture, $\nabla_{\tau} \cdot$ est l'opérateur de divergence de surface et ∇_{Σ} l'opérateur de gradient sur Σ défini par

$$\nabla_{\Sigma} p = \begin{bmatrix} \nabla_{\tau} p_f \\ \llbracket p \rrbracket \\ b_f \end{bmatrix}.$$

Dans le modèle ci-dessus p_f est la pression de fracture et v_f la vitesse de filtration longitudinale moyenne dans la fracture.

On ajoute à ce modèle la condition aux limites de Neumann $v_f = 0$ aux deux bords de la fracture. Le paramètre $\xi \geq \frac{1}{2}$ est un paramètre de quadrature apparaissant au cours de la dérivation formelle des équations et qui permet de retrouver diverses variantes de ce modèle présentes dans la littérature [BMTA, MJR05].

Nous montrons que ce problème couplé est bien posé (y compris quand $\xi = \frac{1}{2}$, ce qui semble être un cas important non traité dans [MJR05]) dans le cas de fractures totalement immergées dans la matrice poreuse. Puis nous proposons un schéma volumes finis pour le résoudre, dont nous montrons la convergence. Celui a pour avantage, en comparaison avec le schéma éléments finis Raviart-Thomas proposé dans [MJR05], de s'appliquer à toutes les géométries de fractures (totalement immergées ou pas) et toutes les valeurs de $\xi \geq 1/2$. En effet, quand $\xi = \frac{1}{2}$ le saut $[[\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{n}]]$ est seulement dans le dual de $H^{\frac{1}{2}}(\Sigma)$ et la formulation mixte proposée dans [MJR05] n'est plus adaptée au problème. Dans le cas $\xi > \frac{1}{2}$ cette approche fonctionne car on a alors une estimation de ce saut dans $L^2(\Sigma)$.

Nous illustrons ainsi la dépendance des solutions en fonction du paramètre de quadrature ξ , qui semble montrer que la valeur $\xi = \frac{1}{2}$ est celle qui fournit des solutions les plus fidèles au problème complet dans les divers régimes d'écoulements.

Voici un exemple de résultat numérique obtenu dans le cas d'une fissure verticale de forme conique située au milieu du domaine. L'épaisseur de la fracture vaut $2 \cdot 10^{-2}$ en haut du domaine et 10^{-3} en bas. Dans cet exemple, les perméabilités sont isotropes et valent 1 dans la matrice et 100 dans la fracture. Les conditions aux limites sont de type Dirichlet sur les bords gauche et droit du domaine, Neumann homogène sur les bords supérieur et inférieur et enfin Dirichlet sur les deux bouts de la fracture.

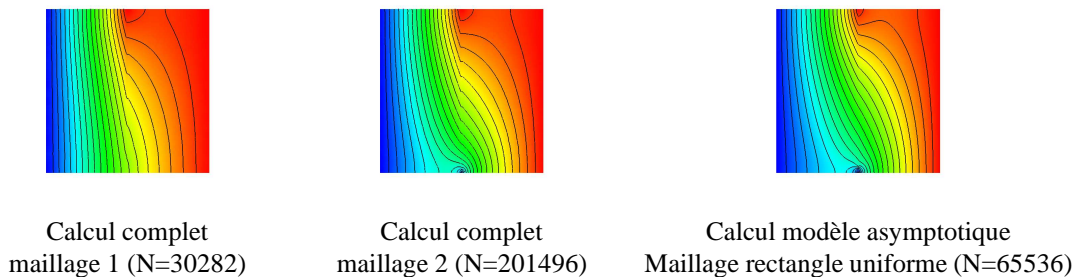


FIG. VII.6 – Comparaison des résultats pour le modèle de milieux poreux fissurés

Les deux dessins de gauche sur la figure VII.6 montrent les isovaleurs de la pression obtenues par le calcul de la solution du modèle complet sur deux maillages triangulaires très raffinés dans et au voisinage de la fracture (on utilise ici le schéma m-DDFV exposé dans le chapitre VI). Le premier maillage contient 30282 cellules et n'est pas suffisamment fin pour prendre en compte de façon satisfaisante la zone inférieure de la fracture. Le second contient 201496 mailles et permet de commencer à voir les effets de la condition aux limites en bas de la fracture. On observe sur le dessin de droite, que le calcul de la solution du modèle asymptotique proposé (VII.6)-(VII.7) sur un maillage cartésien uniforme de seulement 65536 mailles permet de retrouver une solution convenable du problème y compris sur la partie inférieure de la fracture. Le gain en terme de coût de calcul et de facilité de maillage du domaine grâce à l'utilisation de ce type de modèles est donc assez clair.

En guise de conclusion

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

ALBERT EINSTEIN

PROJETS ET PERSPECTIVES

Je conclus ce mémoire en donnant quelques éléments de perspective pour les années à venir, reprenant (en partie) celles mentionnées tout au long de ce mémoire. Certains des points décrits ci-dessus sont déjà des projets en cours, d'autres relèvent plutôt de perspectives à moyen terme.

Écoulements complexes

Deux grandes directions de travail possibles se dégagent suite aux résultats exposés dans les deux premiers chapitres :

- Tout d'abord il apparaît très clairement que le développement de méthodes numériques performantes pour les modèles de Cahn-Hilliard / Navier-Stokes triphasiques est essentiel pour pouvoir envisager l'exploitation de tels modèles avec une précision suffisante dans des géométries tridimensionnelles. L'étude d'algorithmes de raffinement local adaptatif pourrait être une solution, de même que le développement de méthodes d'éléments finis d'ordre plus élevé pour les paramètres d'ordre et les potentiels chimiques sans augmenter le degré des éléments utilisés pour la vitesse et la pression.

L'ajout du terme d'ordre élevé dans le potentiel de Cahn-Hilliard permettant de stabiliser le système dans les cas d'étalement total induit un certain nombre de problèmes de convergence de la méthode de Newton à chaque pas de temps qu'il serait important de mieux comprendre.

- D'autre part le développement de modèles à interfaces diffuses à $n \geq 4$ phases vérifiant des propriétés de consistance similaires à celles que nous avons introduites est encore un problème d'importance non résolu. De même, les modèles présentés ne sont pertinents que sous la condition $\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_2 \Sigma_3 + \Sigma_1 \Sigma_3 > 0$ qui n'a pas de sens physique clair et qui n'est pas satisfaite dans certains cas pratiques. Tout ceci nécessite probablement de considérer des formes encore plus générales d'énergies libres de Cahn-Hilliard, ce qui constitue à ce jour un problème totalement ouvert.

Concernant l'étude des conditions aux limites artificielles en sortie d'un écoulement, il y a là aussi plusieurs grandes questions en suspens :

- L'analyse de la méthode numérique consistant à calculer la solution à l'instant $n+1$ en prenant comme écoulement de référence la solution calculée à l'instant n .
- L'analyse du comportement de la solution quand on augmente la taille du domaine de calcul fictif. On s'attend, au moins dans des géométries simples, à ce que la solution du problème avec conditions aux limites artificielles converge vers la solution du problème dans le domaine infini.
- L'extension de ce type de conditions aux limites dans le cadre compressible, par exemple isotherme barotrope.

Méthodes de volumes finis

Les travaux présentés dans la seconde partie de ce mémoire ouvrent de nombreuses perspectives. L'étude des schémas volumes finis pour les équations elliptiques non-linéaires doit permettre de s'attaquer maintenant aux problèmes paraboliques dégénérés du type

$$\partial_t b(u) - \operatorname{div}(\varphi(t, z, u, \nabla u)) = f,$$

sous de bonnes hypothèses de monotonie sur la fonction b et bien entendu sur le flux φ . Par ailleurs, les schémas DDFV ont été récemment utilisés et étudiés par Delcourte, Domelevo et Omnes dans [DDO05] pour résoudre des systèmes linéaires plus complexes du type Stokes, Div/Rot, etc ... Il est donc naturel maintenant de tenter d'adapter toutes ces techniques aux problèmes de type Stokes à viscosité variable ou même Stokes non-newtonien dans lesquels le tenseur des contraintes dépend de façon non-linéaire du module du tenseur des taux de déformation :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}\left(\eta(x, |D(v)|)D(v)\right) + \nabla p = f, \\ \operatorname{div} v = 0. \end{cases}$$

Si la fonction η est discontinue en x (dans le cadre d'écoulements diphasiques par exemple), même si elle ne dépend pas du tenseur $D(v)$, il est crucial d'approcher les flux issus du tenseur des taux de déformation complet $D(v) = (\nabla v + {}^t\nabla v)/2$ et on ne peut pas mettre le problème sous une forme plus simple faisant apparaître le Laplacien. Il me semble que l'approche DDFV doit permettre de répondre à ces contraintes de part sa souplesse d'une part et de part le fait qu'elle préserve, par nature, les propriétés qualitatives (monotonie, symétrie, etc ...) des EDP auxquelles on s'intéresse. Cette approche permettrait également de pouvoir considérer des conditions aux limites en contrainte pour le problème de Stokes ce qui est un cas important comme on l'a vu dans le chapitre IV.

Du point de vue de l'analyse numérique, il me semble intéressant d'essayer de progresser dans l'étude de l'erreur dans les schémas numériques pour les problèmes non-linéaires lorsque la solution est peu régulière (dans un espace de Sobolev ou de Besov d'indice fractionnaire). Ce type de régularité est naturel dans les cas non-linéaires qui ne possèdent pas les bonnes propriétés de régularité elliptique du cas linéaire. Dans ce cadre, ou par exemple les résultats d'interpolation sont souvent inopérants (ou en tout cas délicats à mettre en oeuvre), de nouveaux outils techniques sont probablement nécessaires pour estimer directement l'erreur de consistance pour ce type de solutions.

Une des étapes cruciales dans cette direction serait de généraliser le résultat technique (Lemme 3.4 dans [11]) à la base des estimations d'erreur usuelles en volumes finis. Ce résultat donne essentiellement un contrôle précis de la différence entre la moyenne d'une fonction sur une arête et sa moyenne sur un volume de contrôle en fonction de l'intégrale sur le volume de contrôle (supposons-le convexe) de la puissance p -ième du module du gradient de cette fonction. Celui-ci s'obtient par l'utilisation de développements de Taylor.

Si ces résultats pouvaient être généralisés (*via* des outils différents des simples développements de Taylor) de façon à obtenir des bornes explicites en fonction de termes de dérivées fractionnaires du type

$$\int_{\kappa} \int_{\kappa} \left(\frac{|v(x) - v(y)|}{|x - y|^{\alpha}} \right)^p \frac{dx dy}{|x - y|^d}, \quad (\text{VII.8})$$

alors la méthode usuelle d'estimation d'erreur devrait s'appliquer sans souci et fournir des bornes d'erreurs dans ces cas de faible régularité. Des estimations faisant apparaître des quantités du type (VII.8) sont disponibles dans le cadre monodimensionnel mais l'extension aux dimensions supérieures ne semble pas immédiate.

Simulation numérique du problème des vagues en profondeur finie

En collaboration avec T. Colin, S. Labbé et D. Lannes, nous avons commencé à nous intéresser à la simulation numérique directe des équations d'Euler à surface libre en profondeur finie et avec fond éventuellement non-plat.

L'idée de ce travail provient des travaux de D. Lannes [Lan05] dans lequel il prouve l'existence et l'unicité locale des solutions de ces équations, sous une condition de Lévy pour le système linéarisé qui correspond physiquement au critère de Taylor. Pour ce faire, il a introduit, à partir de la formulation Eulérienne des équations, des changements de variable qui *diagonalisent* la partie principale du système.

Cette formulation des équations se prête bien à la simulation numérique du problème. En particulier, nous proposons un schéma de splitting en temps naturel (ou la discrétisation des termes de natures différentes peut être découpée) associé à des schémas de type Crank-Nicholson qui permette de conserver l'ordre 2 de la méthode.

Du point de vue de la discrétisation en espace, nous considérons un maillage uniforme pour les variables horizontales sur lequel les deux inconnues principales (la hauteur d'eau et le potentiel des vitesses) sont discrétisées. Bien entendu, les deux équations d'évolutions pour ces deux grandeurs (la condition cinématique de surface libre et la trace de l'équation de Bernoulli sur la surface) sont non-linéaires et couplées et font intervenir l'opérateur Dirichlet/Neumann qu'il est nécessaire de recalculer à chaque itération en temps.

La méthode proposée ne fait intervenir qu'un seul calcul de l'opérateur par pas de temps ce qui est un point crucial. Ce calcul se fait en construisant un maillage quadrangulaire structuré (mais non rectangle) à partir du maillage uniforme des coordonnées horizontales et de la hauteur d'eau calculée à l'itération considérée. Sur ce maillage non conforme nous pensons utiliser les schémas volumes finis DDFV (voir [DO05] et le chapitre VI) pour résoudre l'équation de Laplace. Ceux-ci ont l'avantage de présenter de bonnes propriétés de convergence quand le maillage se déforme et d'assurer la consistance des flux, c'est-à-dire de la dérivée normale du potentiel des vitesses à la surface, qui est exactement la quantité que l'on souhaite calculer.

Dans un premier temps, nous souhaitons étudier le comportement de la méthode numérique proposée par une étude de la convergence en maillage sur des cas tests basiques, ou plus complexes (l'onde solitaire de Tanaka par exemple). Ensuite, nous utilisons la discrétisation proposée pour étudier le domaine de validité des modèles asymptotiques dans le régime "*Ondes longues*" du type Boussinesq ou KdV. Des théorèmes d'estimation d'erreur pour ces modèles sont disponibles et il est intéressant de pouvoir déterminer si ces estimations sont précises. De la même façon nous souhaitons tester avec des données initiales de type train d'ondes, la validité de l'approximation de Schrödinger pour laquelle il n'existe pas, à ce jour, de théorème d'estimation d'erreur.

Approximation numérique du contrôle aux trajectoires des EDP paraboliques

En collaboration avec A. Benabdallah, F. Hubert, J. Le Rousseau et l'équipe de théorie du contrôle de l'université de Besançon nous souhaitons mettre en commun nos compétences en analyse numérique et en théorie du contrôle pour s'attaquer aux problèmes tout à fait actuels de l'analyse numérique des problèmes de contrôle dans le cadre parabolique. On s'intéressera par exemple aux questions suivantes :

- Peut-on établir des propriétés de contrôlabilité exacte uniforme (en un sens à préciser) pour la semi-discrétisation en espace de l'équation de la chaleur par exemple ? Des réponses partielles existent dans des cas particuliers (notamment les travaux de Zuazua et de son équipe sur le cas monodimensionnel) qui utilisent des techniques de preuve spécifiques et peu généralisables (voir également [LT06] où une notion de contrôlabilité uniforme plus faible est étudiée). Nous espérons adapter les techniques de type *inégalités de Carleman* au cadre discret (ou semi-discret). Ces techniques ont montré leur puissance ces dernières années dans l'étude de problèmes de contrôle théoriques. Dans le cas parabolique, ces techniques ont par exemple permis de montrer la contrôlabilité à zéro d'équations à coefficients non constants et même à coefficients discontinus (voir par exemple [BDLR05]).
- Comment utiliser l'outil numérique pour mieux comprendre les cas encore ouverts dans les problèmes de contrôle aux trajectoires d'équations de la chaleur semi-linéaires, ou des systèmes paraboliques ? L'idée est d'utiliser l'outil numérique pour explorer les questions théoriques encore ouvertes dans ce domaine.
- On peut également envisager d'utiliser cet outil pour comprendre la dépendance en le domaine de contrôle (intérieur ou frontière) du coût du contrôle, ce qui est encore un problème théorique pour lequel peu de résultats sont disponibles. En s'inspirant par exemple des travaux d'A. Münch (sur l'équation des ondes), on espère pouvoir proposer une méthode numérique itérative permettant d'estimer (pour une taille de domaine de contrôle fixée) la position du domaine de contrôle pour lequel le coût sera le plus faible.

TRAVAUX DE L'AUTEUR

LIVRE

- [1] F. Boyer, P. Fabrie : *Elements d'analyse pour l'étude de quelques modèles d'écoulements de fluides visqueux incompressibles*, Coll. Mathématiques et Applications, Vol. 52, Springer, 405 p. (2006).

ARTICLES PARUS OU ACCEPTÉS DANS DES RICL

- [2] F. Boyer : *Mathematical study of multiphase flow under shear through order parameter formulation*, Asymptotic Analysis Vol. 20 no 2, pp 175-212 (1999).
- [3] F. Boyer : *Nonhomogeneous Cahn-Hilliard fluids*, Annales de l'IHP : Analyse non linéaire, Vol. 18 no 2, pp 225-259 (2001).
- [4] F. Boyer : *A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows*, Computers and Fluids Vol. 31 no 1, pp 41-68 (2002).
- [5] F. Boyer, P. Fabrie : *Persistency of 2D perturbations of 1D solutions for a Cahn-Hilliard flow model under high shear*, Asymptotic Analysis Vol. 33 no 2, pp 107-151 (2003).
- [6] F. Boyer, L. Chupin, P. Fabrie : *Study of visco-elastic mixtures through a Cahn-Hilliard flow model*, European Journal of Mechanics - B Fluids, Vol. 23 no 5, pp 759-780 (2004).
- [7] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert : *Finite-volume schemes for the p -laplacian on cartesian meshes*, M^2AN , Vol. 38, no 6, pp. 931-959 (2004).
- [8] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert : *Besov regularity and new error estimates for finite volume approximations of the p -laplacian*, Numerische Mathematik, Vol. 100, no 4, pp. 565-592 (2005).
- [9] F. Boyer : *Trace theorems and spatial continuity properties for the solutions of the transport equation*, Differential and Integral Equations, Vol. 18, no 8, pp 891-934 (2005).
- [10] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert : *On the finite volume approximation of regular solutions of the p -laplacian*, IMA Journal on Numerical Analysis, IMA Journal on Numerical Analysis, Vol. 26, N°3, pp. 472-502, (2006).
- [11] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert : *Discrete duality finite volume schemes for Leray-Lions type elliptic problems on general 2D meshes*, Numerical Methods for PDEs, <http://dx.doi.org/10.1002/num.20170>, à paraître, (2006).
- [12] F. Boyer, C. Lapuerta : *Study of a three component Cahn-Hilliard flow model*, M^2AN , à paraître, (2006).

- [13] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert : *Discrete Besov framework for finite volume approximation of the p -laplacian on non-uniform cartesian grids*, ESAIM Proceedings, à paraître, (2006).
- [14] F. Boyer, P. Fabrie : *Outflow boundary conditions for the incompressible non-homogeneous Navier-Stokes equations*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Série B, à paraître, (2006).

ARTICLES SOUMIS DANS DES RICL

- [15] F. Boyer, F. Hubert : *Finite volume methods for linear and nonlinear elliptic problems with discontinuities*, soumis, (2006).

ARTICLES EN PRÉPARATION

- [16] F. Boyer : *Implicit definition of numerical fluxes for finite volume methods*, en préparation, (2006).
- [17] P. Angot, F. Boyer, F. Hubert : *Finite volume approximation of an asymptotic model for flows in fractured porous media*, en préparation, (2006).

THÈSE

- [18] F. Boyer : *Écoulements diphasiques de type Cahn-Hilliard*, Thèse de Doctorat, Université Bordeaux I, (2001), <http://www.cmi.univ-mrs.fr/~fboyer/publications/these.pdf>

ACTES DE CONGRÈS

— Congrès internationaux avec CL —

- [19] F. Boyer : *Theoretical and numerical study of multiphase flows through order parameter formulation*, EQUADIFF 99, International Conference on Differential Equations, Berlin, 1999, Ed. B. Fiedler, K. Gröger & J. Sprekels, Vol. 1, pp 488-490, World Scientific.
- [20] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert : *"Duplex" finite-volume schemes for nonlinear elliptic problems on general 2D meshes*, Finite Volumes for Complex Applications IV, Marrakech, pp. 365–376, Ed. F. Benkhaldoun, D. Ouazar & S. Raghay, Hermes Science (2005).
- [21] P. Angot, F. Boyer, F. Hubert : *Numerical modeling of flow in fractured porous media*, Finite Volumes for Complex Applications IV, Marrakech, pp. 249–260, Ed. F. Benkhaldoun, D. Ouazar & S. Raghay, Hermes Science (2005).
- [22] F. Boyer, C. Lapuerta : *A diffuse interface model for the numerical simulation of three-component flows*, Finite Volumes for Complex Applications IV, Marrakech, pp 153–162, Ed. F. Benkhaldoun, D. Ouazar & S. Raghay, Hermes Science (2005).

— Congrès nationaux avec CL —

- [23] F. Boyer, L. Chupin : *Etude numérique de mélanges visco-élastiques*, Congrès d'Analyse Numérique (2003).
- [24] C. Lapuerta, F. Boyer, B. Piar, M. Quintard, P. Angot : *Un modèle de Navier-Stokes / Cahn-Hilliard pour la simulation d'écoulements incompressibles de trois phases non miscibles*, Congrès Français de Mécanique, Troyes (2005).

RÉFÉRENCES

- [Aav02] I. Aavatsmark. An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. *Comput. Geosci.*, 6(3-4) :405–432, 2002. Locally conservative numerical methods for flow in porous media.
- [ABBM98a] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Bøe, and T. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. I. Derivation of the methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5) :1700–1716 (electronic), 1998.
- [ABBM98b] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. 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 (electronic), 1998.
- [ACM05] L. Ambrosio, G. Crippa, and S. Maniglia. Traces and fine properties of a BD class of vector fields and applications. *Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (6)*, 14(4) :527–561, 2005.
- [AGW04] B. Andreianov, M. Gutnic, and P. Wittbold. Convergence of finite volume approximations for a nonlinear elliptic-parabolic problem : a “continuous” approach. *SIAM J. Numer. Anal.*, 42(1) :228–251, 2004.
- [Amb04] L. Ambrosio. Transport equation and Cauchy problem for BV vector fields. *Invent. Math.*, 158(2) :227–260, 2004.
- [AMW98] D.M. Anderson, G.B. McFadden, and A.A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30 :139–165, 1998.
- [AT99] P.M. Adler and J.-F. Thovert. *Fractures and Fracture Networks*. Kluwer Acad., Amsterdam, 1999.
- [Bao00] W. Bao. Artificial boundary conditions for incompressible Navier-Stokes equations : a well-posed result. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 188(1-3) :595–611, 2000.
- [Bar70] C. Bardos. Problèmes aux limites pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre à coefficients réels ; théorèmes d’approximation ; application à l’équation de transport. *Ann. Sci. École Norm. Sup. (4)*, 3 :185–233, 1970.
- [BB99] J. W. Barrett and J. F. Blowey. Finite element approximation of a model for phase separation of a multi-component alloy with non-smooth free energy and a concentration dependent mobility matrix. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 9 :627–663, 1999.
- [BCMP87] C. Bègue, C. Conca, F. Murat, and O. Pironneau. À nouveau sur les équations de Stokes et de Navier-Stokes avec des conditions aux limites sur la pression. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 304(1) :23–28, 1987.
- [BDLR05] A. Benabdallah, Y. Dermenjian, and J. Le Rousseau. Carleman estimates for the one-dimensional heat equation with a discontinuous coefficient and applications to controllability. Technical report, LATP, Université de Provence, 2005. <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00017486>.
- [Ber99] F. Bertagnolio. Solution of the incompressible Navier-Stokes equations on domains with one or several open boundaries. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 31(7) :1061–1085, 1999.

- [BF94] C.-H. Bruneau and P. Fabrie. Effective downstream boundary conditions for incompressible Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 19(8) :693–705, 1994.
- [BF96] C.-H. Bruneau and P. Fabrie. New efficient boundary conditions for incompressible Navier-Stokes equations : a well-posedness result. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 30(7) :815–840, 1996.
- [BFR97] C.-H. Bruneau, P. Fabrie, and P. Rasetarinera. An accurate finite difference scheme for solving convection-dominated diffusion equations. *Internat. J. Num. Methods Fluids*, 24 :169–183, 1997.
- [BL93] J. W. Barrett and W. B. Liu. Finite element approximation of the p -Laplacian. *Math. Comp.*, 61(204) :523–537, 1993.
- [BMTA] I.I. Bogdanov, V.V. Mourzenko, J.-F. Thovert, and P.M. Adler. Effective permeability of fractured porous media in steady-state flow. *Water Resour. Res.*, 107.
- [Bru00] C.-H. Bruneau. Boundary conditions on artificial frontiers for incompressible and compressible Navier-Stokes equations. *M²AN Math. Model. Numer. Anal.*, 34(2) :303–314, 2000. Special issue for R. Temam’s 60th birthday.
- [Ces84] M. Cessenat. Théorèmes de trace L^p pour des espaces de fonctions de la neutronique. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 299(16) :831–834, 1984.
- [Ces85] M. Cessenat. Théorèmes de trace pour des espaces de fonctions de la neutronique. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 300(3) :89–92, 1985.
- [CHH04] R. Cautrès, R. Herbin, and F. Hubert. The Lions domain decomposition algorithm on non-matching cell-centred finite volume meshes. *IMA J. Numer. Anal.*, 24(3) :465–490, 2004.
- [Cho89] S.-S. Chow. Finite element error estimates for nonlinear elliptic equations of monotone type. *Numer. Math.*, 54(4) :373–393, 1989.
- [Chu03] L. Chupin. Existence result for a mixture of non Newtonian flows with stress diffusion using the Cahn-Hilliard formulation. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 3(1) :45–68, 2003.
- [Chu04] L. Chupin. Some theoretical results concerning diphasic viscoelastic flows of the Oldroyd kind. *Adv. Differential Equations*, 9(9-10) :1039–1078, 2004.
- [Chu05] L. Chupin. Boundary layers for stress diffusive perturbation in viscoelastic fluids. *Appl. Math. Lett.*, 18(6) :641–647, 2005.
- [CMP94] C. Conca, F. Murat, and O. Pironneau. The Stokes and Navier-Stokes equations with boundary conditions involving the pressure. *Japan. J. Math. (N.S.)*, 20(2) :279–318, 1994.
- [CPT06] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. Solving the fully coupled heart and torso problems of electrocardiology with a 3D discrete duality finite volume method. *soumis*, 2006. <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00016825>.
- [CVV99] Y. Coudière, J.-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two-dimensional convection-diffusion problem. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 33(3) :493–516, 1999.
- [DDO05] S. Delcourte, K. Domelevo, and P. Omnes. Discrete duality finite volume method for second order elliptic problems. In D. Ouazar & S. Raghy F. Benkhaldoun, editor, *Finite Volumes for Complex Applications IV, Marrakech*, pages 447–358. Hermes Science, 2005.
- [DdT94] J. I. Diaz and F. de Thélin. On a nonlinear parabolic problem arising in some models related to turbulent flows. *SIAM J. Math. Anal.*, 25(4) :1085–1111, 1994.
- [DE05] J. Droniou and R. Eymard. A mixed finite volume scheme for anisotropic diffusion problems on any grid. *soumis*, 2005. <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00005565>.
- [Des96] B. Desjardins. A few remarks on ordinary differential equations. *Comm. Partial Differential Equations*, 21(11-12) :1667–1703, 1996.
- [Des97a] B. Desjardins. Global existence results for the incompressible density-dependent Navier-Stokes equations in the whole space. *Differential Integral Equations*, 10(3) :587–598, 1997.
- [Des97b] B. Desjardins. Linear transport equations with initial values in Sobolev spaces and application to the Navier-Stokes equations. *Differential Integral Equations*, 10(3) :577–586, 1997.
- [DL89] R. J. DiPerna and P.-L. Lions. Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces. *Invent. Math.*, 98(3) :511–547, 1989.

- [DO05] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume method for the Laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 39(6) :1203–1249, 2005.
- [Dro05] J. Droniou. Finite volume approximations for fully non-linear elliptic equations in divergence form. *soumis*, 2005. <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00009614>.
- [EGH00] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.
- [EGH06] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A cell-centred finite-volume approximation for anisotropic diffusion operators on unstructured meshes in any space dimension. *IMA J. Numer. Anal.*, 26(2) :326–353, 2006.
- [Fai92] I. Faille. A control volume method to solve an elliptic equation on a two-dimensional irregular mesh. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 100(2) :275–290, 1992.
- [FFN⁺02] I. Faille, E. Flauraud, F. Nataf, S. Pégaz-Fiornet, F. Schneider, and F. Willien. A new fault model in geological basin modelling. Application of finite volume scheme and domain decomposition methods. In *Finite volumes for complex applications, III (Porquerolles, 2002)*, pages 529–536. Lab. Anal. Topol. Probab. CNRS, Marseille, 2002.
- [FS90] M. Feistauer and V. Sobotíková. Finite element approximation of nonlinear elliptic problems with discontinuous coefficients. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 24(4) :457–500, 1990.
- [GCC88] G. A. Greene, J. C. Chen, and M. T. Conlin. Onset of entrainment between immiscible liquid layers due to rising gas bubbles. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(6) :1309–1317, 1988.
- [Glo84] R. Glowinski. *Numerical methods for nonlinear variational problems*. Springer Series in Computational Physics. Springer-Verlag, New York, 1984.
- [GM75] R. Glowinski and A. Marrocco. Sur l’approximation, par éléments finis d’ordre un, et la résolution, par pénalisation-dualité, d’une classe de problèmes de Dirichlet non linéaires. *Rev. Française Automat. Informat. Recherche Opérationnelle*, 9(R-2) :41–76, 1975.
- [GNS98] H. Garcke, B. Nestler, and B. Stoth. On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 115(1-2) :87–108, 1998.
- [GNS99] H. Garcke, B. Nestler, and B. Stoth. A multi phase field : numerical simulations of moving phase boundaries and multiple junctions. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 60(1) :295–315, 1999.
- [GR03] R. Glowinski and J. Rappaz. Approximation of a nonlinear elliptic problem arising in a non-Newtonian fluid flow model in glaciology. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(1) :175–186, 2003.
- [Her00] F. Hermeline. A finite volume method for the approximation of diffusion operators on distorted meshes. *J. Comput. Phys.*, 160(2) :481–499, 2000.
- [Her03] F. Hermeline. Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192(16-18) :1939–1959, 2003.
- [HRT96] J. G. Heywood, R. Rannacher, and S. Turek. Artificial boundaries and flux and pressure conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 22(5) :325–352, 1996.
- [HS89] L. Halpern and M. Schatzman. Artificial boundary conditions for incompressible viscous flows. *SIAM J. Math. Anal.*, 20(2) :308–353, 1989.
- [Jac99] D. Jacqmin. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, 155 :96–127, 1999.
- [Jac00] D. Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 402 :57–88, 2000.
- [KKL04a] J. Kim, K. Kang, and J. Lowengrub. Conservative multigrid methods for Cahn-Hilliard fluids. *J. Comput. Phys.*, 193(2) :511–543, 2004.
- [KKL04b] J. Kim, K. Kang, and J. Lowengrub. Conservative multigrid methods for ternary Cahn-Hilliard systems. *Commun. Math. Sci.*, 2(1) :53–77, 2004.
- [KL05] J. Kim and J. Lowengrub. Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces Free Bound.*, 7(4) :435–466, 2005.
- [Lan05] D. Lannes. Well-posedness of the water-waves equations. *J. Amer. Math. Soc.*, 18(3) :605–654, 2005.

- [Lap06] C. Lapuerta. *Echanges de masse et de chaleur entre deux phases liquides stratifiées dans un écoulement à bulles*. PhD thesis, Université de Provence, 2006.
- [LB93a] W. B. Liu and J. W. Barrett. A further remark on the regularity of the solutions of the p -Laplacian and its applications to their finite element approximation. *Nonlinear Anal.*, 21(5) :379–387, 1993.
- [LB93b] W. B. Liu and J. W. Barrett. A remark on the regularity of the solutions of the p -Laplacian and its application to their finite element approximation. *J. Math. Anal. Appl.*, 178(2) :470–487, 1993.
- [Ler04] N. Lerner. Transport equations with partially BV velocities. *Ann. Sc. Norm. Super. Pisa Cl. Sci. (5)*, 3(4) :681–703, 2004.
- [Lio96] P.-L. Lions. *Mathematical topics in fluid mechanics, Tome 1 : Incompressible models*, volume 3 of *Oxford Lecture Series in Mathematics and Applications*. Oxford University Press, New York, 1996.
- [Liu99] W. B. Liu. Degenerate quasilinear elliptic equations arising from bimaterial problems in elastic-plastic mechanics. *Nonlinear Anal.*, 35(4, Ser. A : Theory Methods) :517–529, 1999.
- [Liu00] W. B. Liu. Finite element approximation of a nonlinear elliptic equation arising from bimaterial problems in elastic-plastic mechanics. *Numer. Math.*, 86(3) :491–506, 2000.
- [LL65] J. Leray and J.-L. Lions. Quelques résultats de Višik sur les problèmes elliptiques non linéaires par les méthodes de Minty-Browder. *Bull. Soc. Math. France*, 93 :97–107, 1965.
- [LP05a] C. Le Potier. Schéma volumes finis monotone pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages de triangles non structurés. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 341(12) :787–792, 2005.
- [LP05b] C. Le Potier. Schéma volumes finis pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages non structurés. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 340(12) :921–926, 2005.
- [LT98] J.S. Lowengrub and L. Truskinovsky. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions. *Proc. Royal Soc. of London, Serie A*, 454 :2617–2654, 1998.
- [LT06] S. Labbé and E. Trélat. Uniform controllability of semidiscrete approximations of parabolic control systems. *Syst. Cont. Letters*, 55(7) :597–609, 2006.
- [Mis00] S. Mischler. On the trace problem for solutions of the Vlasov equation. *Comm. Partial Differential Equations*, 25(7-8) :1415–1443, 2000.
- [MJR05] V. Martin, J. Jaffré, and J. E. Roberts. Modeling fractures and barriers as interfaces for flow in porous media. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26(5) :1667–1691, 2005.
- [MKH98] K. Matsuzaka, T. Koga, and T. Hashimoto. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :5441, 1998.
- [Nor97] J. Nordström. On extrapolation procedures at artificial outflow boundaries for the time-dependent Navier-Stokes equations. *Appl. Numer. Math.*, 23(4) :457–468, 1997.
- [NSN03] S.A. Nazarov and M. Specovius-Neugebauer. Nonlinear artificial boundary conditions with pointwise error estimates for the exterior three dimensional Navier-Stokes problem. *Math. Nachr.*, 252 :86–105, 2003.
- [NSNV04] S.A. Nazarov, M. Specovius-Neugebauer, and J.H. Videman. Nonlinear artificial boundary conditions for the Navier-Stokes equations in an aperture domain. *Math. Nachr.*, 265 :24–67, 2004.
- [Pia04] B. Piar. PELICANS : Un outil d’implémentation de solveurs d’équations aux dérivées partielles. Note Technique 2004/33, IRSN, 2004.
- [Pie05] C. Pierre. *Modélisation et simulation de l’activité électrique du coeur dans le thorax, analyse numérique et méthodes de volumes finis*. PhD thesis, Université de Nantes, 2005. <http://tel.ccsd.cnrs.fr/tel-00010705>.
- [PRR⁺04] M. Picasso, J. Rappaz, A. Reist, M. Funk, and H. Blatter. Numerical simulation of the motion of a two-dimensional glacier. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 60(5) :995–1009, 2004.
- [Sim78] J. Simon. Caractérisation d’espaces fonctionnels. *Boll. Un. Mat. Ital. B (5)*, 15(2) :687–714, 1978.
- [Sim81] J. Simon. Régularité de la solution d’un problème aux limites non linéaires. *Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (5)*, 3(3-4) :247–274 (1982), 1981.
- [Sim90] J. Simon. Nonhomogeneous viscous incompressible fluids : existence of velocity, density, and pressure. *SIAM J. Math. Anal.*, 21(5) :1093–1117, 1990.

- [SSC02] K. A. Smith, F. J. Solis, and D. L. Chopp. A projection method for motion of triple junctions by level sets. *Interfaces and Free Boundaries*, 4(3) :239–261, 2002.
- [Tou97] L. Tournette. Artificial boundary conditions for the linearized compressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 137(1) :1–37, 1997.
- [Tou98] L. Tournette. Artificial boundary conditions for the linearized compressible Navier-Stokes equations. II. The discrete approach. *J. Comput. Phys.*, 144(1) :151–179, 1998.
- [YFLS04] P. Yue, J. Feng, C. Liu, and J. Shen. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 515 :293–317, 2004.
- [Žen90] A. Ženíšek. The finite element method for nonlinear elliptic equations with discontinuous coefficients. *Numer. Math.*, 58(1) :51–77, 1990.