



HAL
open science

Etude théorique et numérique des écoulements avec transition de phase

Hélène Mathis

► **To cite this version:**

Hélène Mathis. Etude théorique et numérique des écoulements avec transition de phase. Mathématiques [math]. Université de Strasbourg, 2010. Français. NNT : . tel-00516683v1

HAL Id: tel-00516683

<https://theses.hal.science/tel-00516683v1>

Submitted on 10 Sep 2010 (v1), last revised 30 Sep 2010 (v2)

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.

INSTITUT DE RECHERCHE MATHÉMATIQUE AVANCÉE
Université Louis Pasteur et C.N.R.S. (UMR 7501)
7, rue René Descartes
67084 STRASBOURG Cedex

Étude théorique et numérique des écoulements avec transition de phase

par Hélène MATHIS

Mots-clés : Écoulements diphasiques compressibles, changement de phase liquide-vapeur, système hyperbolique, méthode volumes finis, méthode Galerkin discontinu, magnétohydrodynamique, transformée de Legendre rapide.

Classification mathématique : 76T10, 76M12, 76W05, 65M60, 80A, 52A41.

Table des matières

1	Introduction générale	1
I	Quelques méthodes de résolution numériques de modèles complexes de fluides compressibles	11
2	Méthode Lagrange-projection pour la simulation de bulles diphasiques	13
2.1	Problème physique considéré	16
2.1.1	Modèle de Keller-Miksis	16
2.2	Modèle compressible	20
2.3	Schéma numérique	26
2.3.1	L'approche eulérienne	26
2.3.2	L'approche lagrangienne	27
2.3.3	Étape Arbitrary Lagrangian Eulerian	29
2.3.4	Étape de projection	33
2.3.5	Extension à l'ordre 2	34
2.4	Résultats numériques	36
2.4.1	Test de validation pour $d = 1$	36
2.4.2	Bulle faiblement comprimée	37
2.4.3	Bulle fortement comprimée : cas raide	37
2.5	Conclusion	38
3	Schéma équilibre pour la simulation d'une bulle monophasique	45
3.1	Modèle mathématique et propriétés	46
3.2	Construction du schéma équilibre	49
3.3	Solveur de Riemann approché VFRoe-ncv	51
3.3.1	Construction du solveur approché	51
3.3.2	Correction entropique [HHM10a]	54
3.4	Propriétés du schéma équilibre	55
3.5	Résultats numériques	57
3.6	Conclusion	67
4	Approche Galerkin discontinu pour la magnétohydrodynamique	69
4.1	Discrétisation en espace	72
4.2	Discrétisation en temps	79
4.2.1	Intégration par la méthode d'Adams-Bashforth	79
4.2.2	Méthode de pas de temps local	83

4.3	Limiteur de pentes	85
4.4	Application aux équations de la MHD	88
4.4.1	Modèle mathématique	90
4.4.2	Le problème de Riemann de la MHD : étude d'un modèle simplifié	92
4.5	Applications numériques	103
4.5.1	Cas test monodimensionnels	103
4.5.2	Résultats numériques bidimensionnels	115
4.5.3	Instabilités de Kelvin Helmholtz	119
4.6	Conclusion	122
II Étude de la thermodynamique de changement de phase : construction de lois d'état admissibles		123
5	Thermodynamique du changement de phase	125
5.1	Loi de comportement et hypothèses	126
5.1.1	Définition de loi d'état d'une phase pure	126
5.1.2	Description du changement de phase avec un seul fluide	130
5.2	Thermodynamique de changement de phase (description à deux fluides)	132
5.2.1	Mélange immiscible	133
5.2.2	Cas miscible	137
5.2.3	Formulations intensives	139
5.3	Conclusion	142
6	Approche numérique de la transformée de Legendre	145
6.1	Rappels et propriétés	146
6.2	Algorithme de Transformée de Legendre	151
6.2.1	Transformée de Legendre de fonctions affines par morceaux	151
6.3	Algorithme de TLR unidimensionnel : synthèse	155
6.3.1	Extension aux dimensions supérieures	157
6.4	Conclusion	162
7	Construction de lois d'état admissibles	163
7.1	Changement de variables et isothermes	163
7.1.1	Conjuguées de lois d'état complètes	163
7.1.2	Correspondance $(\Psi, \square, Conv(\mathbb{R}^n)) - (\max, +, Conv(\mathbb{R}^n))$	165
7.1.3	Courbes isothermes	166
7.2	Application du procédé de convexification au modèle de van der Waals	167
7.3	Lois d'états de mélange diphasique	172
7.3.1	Loi d'état des gaz parfaits et raides	176
7.3.2	Mélange immiscible de deux gaz parfaits	176
7.3.3	Mélange miscible de deux gaz parfaits	182
7.3.4	Mélanges de deux gaz raides	184
7.4	Conclusion	189
8	Conclusion générale et perspectives	191

Bibliographie

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Cette thèse traite de la modélisation et de l'approximation numérique des écoulements compressibles de fluides complexes. Nous sommes plus particulièrement intéressés au cas des écoulements multiphasiques avec transition de phase liquide-vapeur.

En se référant au diagramme de phase présenté en figure 1.0.1, on observe que le changement de phase liquide-vapeur peut être effectué essentiellement de deux manières simples. Partant du point L , désignant un état liquide, on entre en phase gazeuse :

- soit en baissant la pression, à température constante, jusqu'à atteindre la pression de vaporisation.
- soit en augmentant la température, à pression constante, par apport extérieur de chaleur, jusqu'à atteindre la température d'ébullition,

La cavitation correspond au premier phénomène thermodynamique. Il se traduit par la formation de poches et de bulles de vapeur au sein d'un milieu liquide initialement homogène [F⁺95]. Le liquide, peut par exemple être soumis localement à une baisse de pression. Il entre alors dans une phase métastable : une bulle de vapeur et de gaz se crée. Puis après une phase transitoire, si la bulle est transportée dans une zone de l'écoulement où la pression est plus élevée, la vapeur se recondense et la bulle disparaît.

Le deuxième cas correspond par exemple au cas où la bulle est créée par chauffage laser. L'apport intense d'énergie sur une zone très concentrée peut même conduire à des dissociations moléculaires et à l'apparition de gaz non recondensables. Le processus de recondensation s'accompagne alors d'un phénomène d'oscillations du rayon de la bulle. Lorsque les oscillations s'arrêtent, la bulle ne contient plus de vapeur mais seulement le gaz non condensable.

Dans ce manuscrit nous aborderons la modélisation mathématique de ce type de phénomènes et la résolution numérique des modèles proposés.

Une des complexités de ces écoulements réside dans le traitement de l'interface liquide-gaz. Parmi les méthodes qui permettent l'étude de la dynamique d'interfaces, nous privilégions l'approche eulérienne. Ces méthodes, dites de capture de front (front capturing methods) par opposition aux méthodes lagrangiennes de suivi de front (front tracking methods), sont particulièrement bien adaptées à la

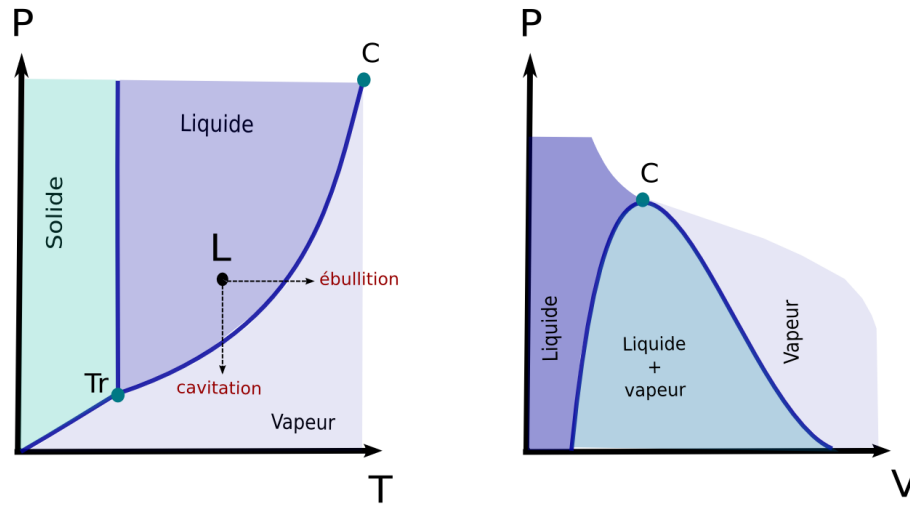


FIG. 1.0.1 – Diagramme des états d'un corps et courbes de changement de phase.

résolution numérique, car le maillage du domaine de calcul reste fixe.

Les modèles que nous étudions sont constitués de deux éléments fondamentaux. D'une part, un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) du premier ordre constitué de lois de conservation traduit le bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie du système physique. D'autre part, ce système doit être fermé par une ou plusieurs lois de comportement pour que sa résolution soit possible. Cette loi de comportement doit être choisie soigneusement, puisqu'elle conditionne les bonnes propriétés du système (hyperbolicité, existence d'une entropie de Lax). Il est bien connu que ce type de système est mal posé sans condition d'entropie et peut développer en temps fini des solutions discontinues. Au niveau numérique, ceci se traduit par diverses difficultés : nécessité de conditions d'entropie discrète, oscillations de Gibbs dans les chocs.

D'autres difficultés plus spécifiques, liées aux cas qui nous intéressent, apparaissent.

On distingue d'une part des difficultés de type numérique.

- l'interface liquide-gaz nécessite un traitement particulier. Il est bien connu par exemple que les schémas conservatifs classiques de Godunov conduisent à des imprécisions rendant ces schémas inutilisables en pratique (nous nous référons aux travaux de Karni [Kar96], Abgrall et Saurel [SA99a], Barberon *et al.* [BHR03], Lagoutière [Lag00]).
- Nos modèles contiennent des termes sources qui permettent de prendre en compte le changement de phase ou des géométries particulières. Il est nécessaire de développer des méthodes adaptées au traitement de ces termes sources de manière à éviter, là encore, de grandes imprécisions ou une mauvaise capture des comportements asymptotiques.
- Nos modèles, étant compressibles, admettent souvent des vitesses d'ondes très différentes. La vitesse du son peut par exemple être de quelques mètres par seconde dans la zone de mélange liquide-vapeur, tandis que la vitesse du son dans le liquide est de l'ordre du millier de mètres par seconde. Ces

fortes disparités nécessitent des techniques adaptées à ce phénomène, qui permettent d'améliorer la précision, à nombre de mailles fixé, ainsi que les performances.

Du point de vue de la modélisation, des difficultés subsistent également.

- Les lois de comportement, qui permettent de calculer le tenseur des contraintes (la pression dans notre cas) en fonction des autres variables thermodynamiques (la masse volumique et l'énergie) doivent être construites de façon à vérifier certaines propriétés de stabilité.
- Elles doivent décrire de façon fidèle le comportement thermodynamique des fluides à simuler. Ceci peut nécessiter de stocker ces lois d'état sous forme de tables.
- La manipulation efficace de ces tables suppose l'utilisation d'outils numériques à définir.

Au cours de cette thèse, nous allons aborder partiellement chacune de ces problématiques.

Le plan de ce mémoire est le suivant.

Première partie : quelques méthodes de résolution numériques de modèles complexes de fluides compressibles

Les systèmes d'équations que nous souhaitons approcher numériquement se mettent tous sous la forme :

$$\partial_t(\omega W) + \nabla(\omega F(W)) = \omega S(W), \quad (1.1)$$

où $W \in \mathbb{R}^m$ est la fonction inconnue dépendant de la variable d'espace x et du temps t :

$$\begin{aligned} W : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^+ &\rightarrow \Omega \\ (x, t) &\mapsto W(x, t). \end{aligned}$$

Le domaine Ω désigne l'espace des états admissibles inclus dans \mathbb{R}^4 . La fonction $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^4$ est la fonction flux et $S : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^4$ correspond au terme source. Le terme ω désigne l'élément de volume.

Nous abordons diverses techniques numériques pour ces systèmes.

Méthode *Lagrange-projection* pour la simulation de bulles diphasiques

Dans le premier chapitre, il s'agit de modéliser l'évolution d'une bulle sphérique de gaz immergée dans un liquide et présentant de fortes oscillations. Le système global est décrit par les équations d'Euler, auxquelles on adjoint une loi d'état caractérisant le comportement thermodynamique de chaque phase. On suppose que le système ne présente pas de transfert de masse. Une variable de couleur est introduite pour identifier les phases liquide et gazeuse. La pression du fluide dépend de cette variable de sorte que les phases liquide et gazeuse sont respectivement décrites par une loi de gaz raide et une loi de gaz parfait. La variable de couleur est transportée par le fluide et permet le suivi de l'interface liquide-gaz. De manière à

s'affranchir d'une modélisation tridimensionnelle délicate, on se place en géométrie sphérique.

Malgré son aspect anodin, ce modèle s'avère particulièrement délicat à simuler numériquement. Le calcul, qui est presque monodimensionnel puisque nous avons supposé la symétrie sphérique, peut durer plusieurs jours sur un ordinateur de bureau actuel. Il est de plus nécessaire de traiter soigneusement l'interface, faute de quoi le calcul est peu précis, voire instable.

Le modèle complet peut se mettre sous la forme (1.1). Les termes sources sont issus de la formulation en coordonnées sphériques. On s'intéresse tout d'abord à la solution de problème de Riemann associé au système (1.1) monodimensionnel. Il s'agit d'un problème de Cauchy dont la donnée initiale est discontinue *i.e.*

$$W(x, t = 0) = \begin{cases} W_L, & \text{si } x < 0, \\ W_R, & \text{si } x > 0, \end{cases}$$

avec W_L et W_R dans Ω . On se restreint à la classe des solutions autosimilaires pour lesquelles la solution W est exprimée en fonction du rapport x/t . La solution cherchée est composée d'états constants séparés par des ondes. Nous rappellerons les résultats de Rouy [Rou00] : le problème de Riemann associé au système (1.1) admet toujours une solution entropique, pour des fluides suivant la loi des gaz raides, quitte à autoriser l'apparition du vide.

Puis on s'intéresse à la résolution numérique du système. L'utilisation d'une approche eulérienne conservative de capture d'interface engendre l'apparition d'oscillations de pression à l'interface liquide-gaz.

Il semble donc plus indiqué d'adopter le suivi d'interface sur maillage lagrangien. Cependant au cours du calcul, l'approche lagrangienne conduit à des volumes de contrôle très petits, ce qui rend la condition de stabilité du schéma plus restrictive. Nous décidons donc de combiner les avantages des deux méthodes au moyen des techniques *Lagrange-projection* et *Arbitrary Lagrangian Eulerian* (ALE) : le maillage étant fixe, seule l'interface est déplacée à la vitesse du fluide. Ces techniques ont été développées par de nombreux auteurs dont Hirt *et al.* [HAC74] pour l'aspect ALE et Kokh et Lagoutière [KL10] pour les schémas Lagrange-projection.

L'originalité de notre méthode réside dans l'étape de projection pour les mailles d'interface. Lorsque le volume de contrôle mitoyen de l'interface devient trop petit, la maille comprimée est fusionnée à sa voisine de même couleur, le calcul des flux étant réalisé sur cette cellule fusionnée. À certains pas de temps bien choisis, la maille comprimée est supprimée, tandis que de l'autre côté de l'interface, la cellule élargie est scindée en deux pour conserver le nombre de mailles initial. Le fait que la projection n'est effectuée que de temps en temps nous permet d'obtenir un schéma rigoureusement conservatif sans diffusion de l'interface. Une extension à l'ordre 2 en espace est réalisée par une méthode MUSCL [Ber05]. Le schéma est appliqué à la simulation d'une bulle de gaz immergée dans un liquide. Les résultats numériques sont comparés au modèle physique de Keller-Miksis [KM80], détaillé en début de chapitre.

Schéma équilibre pour la simulation d'une bulle monophasique

Nous avons vu que considérer le problème en coordonnées sphériques ajoute un terme source au système de lois de conservation considéré. Le système de bulle

sphérique est alors similaire à un modèle d'écoulement en tuyère de section variable, le terme source étant fonction de la section. Il est bien connu que ce type de systèmes avec termes sources peut présenter certaines pathologies numériques lorsqu'on cherche à approcher numériquement des solutions stationnaires ou des solutions en temps long (citons par exemple les travaux de Seguin [GHS03b, CLS04] ou de Bouchut [Bou04]). Nous proposons donc dans le deuxième chapitre un schéma équilibre adapté au traitement du terme source $S(W)$. L'approche adoptée s'inspire de celle de Greenberg et Leroux dans le cas scalaire [GLBN97]. La section constante est traitée comme une inconnue artificielle du système : une équation supplémentaire sur la section est ajoutée. De cette façon, on crée un autre champ caractéristique qui s'avère linéairement dégénéré. Ainsi le système ne contient plus de terme source mais devient non-conservatif. Il est de plus résonant c'est-à-dire que pour certaines valeurs de W , les valeurs propres de la matrice jacobienne du flux coïncident, de sorte que la matrice n'est pas diagonalisable. Cette classe de problème a été étudiée par Isaacson et Temple (pour le cas conservatif, on consultera [IMPT92], le cas non conservatif étant traité dans [IT95] pour des équations scalaires) puis par LeFloch et Goatin [LG04] dans le cadre des écoulements en tuyère. Par ailleurs, puisque le système est non-conservatif, il est nécessaire de définir les relations de Rankine-Hugoniot. Nous utilisons pour cela classiquement les invariants de Riemann de l'onde stationnaire. La construction de notre schéma équilibre repose sur un solveur de Riemann approché pour évaluer les flux aux interfaces. Notre choix s'est porté sur le schéma VFRoe-ncv introduit dans [BGH00] (dans le cas conservatif). Ce flux numérique est basé sur une linéarisation des équations écrites dans un certain jeu de variables primitives. Pour garantir les bonnes propriétés de notre schéma équilibre (préservation des états stationnaires notamment), nous choisissons comme jeu de variables les invariants de Riemann liés à l'onde supplémentaire.

Bien que précis, le schéma VFRoe-ncv approche mal les ondes de détente sonique. Il est nécessaire d'utiliser une correction entropique. Au passage, nous proposons une nouvelle correction entropique qui consiste à augmenter localement la viscosité numérique du solveur de Riemann VFRoe-ncv, de façon non paramétrique. Nous montrons que dans le cas scalaire, ce choix conduit à un schéma monotone. Le chapitre est complété par des simulations numériques attestant du bon comportement du schéma global.

Approche Galerkin discontinu pour la magnétohydrodynamique

L'approche *Lagrange-projection* présentée au chapitre 2, bien qu'ayant de bonnes propriétés (stabilité, interface gaz-liquide non diffusée), ne permet pas d'obtenir une précision suffisante, même sur maillage fin. De plus, le principe de « moyenne géométrique », sur lequel repose la méthode rend délicate l'extension à l'ordre 2 en temps. Seule une extension en espace est réalisée, ce qui implique que le schéma est linéairement instable et nécessite des conditions de stabilité restrictives. Puisqu'il semble difficile d'améliorer la méthode ALE et de l'étendre à la dimension supérieure, nous avons décidé de revenir à des méthodes numériques purement eulériennes.

Le cas-test des oscillations de la bulle présenté au chapitre 1 s'avère cependant particulièrement raide. En effet, initialement le gaz est à une pression et une

masse volumique très faibles. Au cours du calcul, le rayon de la bulle devient très proche de zéro et la pression devient très grande au centre de la bulle. Ces très fortes variations interdisent en pratique le moindre « undershoot » de la méthode numérique. Nous n'avons donc pas pu appliquer une méthode d'ordre élevé dans ce contexte. Nous nous sommes donc limités à un système complexe de type (1.1), celui de la magnétohydrodynamique, pour des cas-tests moins raides.

Nous nous intéressons à des schémas d'éléments finis discontinus, encore appelés Galerkin discontinu. Ils offrent un compromis entre les méthodes de volumes finis et les méthodes d'éléments finis [CS01], [HAM⁺04]. La solution approchée du système (1.1) est cherchée dans l'espace des fonctions L^2 , dont la restriction à chaque cellule du maillage est polynomiale (l'approximation est donc discontinue aux interfaces des cellules). Un ordre de précision élevé en espace peut être obtenu par un polynôme de degré élevé. À chaque interface, un problème de Riemann est résolu par un flux numérique adéquat. Le schéma ainsi semi-discretisé en espace est entropique [Bar06].

Après intégration sur chaque cellule, le système semi-discretisé en espace conduit à un système d'équations différentielles du premier ordre. Il est évidemment recommandé d'utiliser une méthode d'intégration en temps dont la précision est adaptée au degré des polynômes en espace. Notons W_n le vecteur solution (qui contient les coefficients des polynômes sur l'ensemble des mailles) au pas de temps t_n . Les méthodes les plus communes pour résoudre numériquement le système différentiel sont sans doute celles de Runge-Kutta. On cite par exemple les travaux de Cockburn *et al* [CS98, CS91, CS01] ou de Burbeau *et al*. [BSB01]. Ces méthodes à un pas approchent la valeur W_{n+1} à l'instant t_{n+1} en utilisant uniquement la valeur approchée W_n . Si la méthode choisie est d'ordre k , il sera nécessaire de faire k appels à la fonction de flux pour évaluer la solution sur un pas de temps. Nous décidons ici de favoriser les méthodes d'Adams-Bashforth qui ne nécessitent qu'un appel au flux par pas de temps. Dans certains cas (dépendant de la condition de stabilité), ces méthodes à pas multiples sont donc moins coûteuses que l'intégration de type Runge-Kutta [CM84].

Un autre avantage fondamental de cette méthode est qu'elle facilite l'usage d'une technique de pas de temps local. Il s'agit de faire évoluer la solution avec des pas de temps différents contrôlés par la taille locale des mailles [MS07]. La résolution en temps demeure conservative, ce qui est difficile à assurer pour un schéma de type Runge-Kutta (à ce sujet, le lecteur pourra consulter les travaux de Piperno [Pip06] et Dumbser *et al*. [DBTM08]).

Contrairement aux méthodes d'éléments finis, le schéma Galerkin discontinu n'impose pas la continuité aux interfaces des cellules. Il est donc possible de définir l'ordre d'approximation localement. Si l'approximation est constante par maille, la diffusion induite par le décentrement est suffisante pour assurer la stabilité du schéma. Lorsque des polynômes de degré plus élevé sont utilisés, le schéma produit des oscillations non physiques dans les chocs. Dans ce cas il est nécessaire d'utiliser un limiteur de pentes après le calcul des flux pour prévenir ce comportement [KDW08], [BSB01]. Nous proposons ici un limiteur simple de construction, conservatif et entropique, bien adapté aux problèmes unidimensionnels.

La méthode a été développée pendant le CEMRACS 2008, dans le cadre du projet GaDMHD, en collaboration avec C. Altmann et T. Belat (sous la direction

de M. Gutnic, P. Helluy et E. Sonnendrücker) et a donné lieu à la publication suivante [ABG⁺09]. Il s'agissait d'élaborer un code Galerkin discontinu 3D parallèle pour la résolution de systèmes de lois de conservation quelconques. L'approche Galerkin discontinu étant bien adaptée à la modélisation de fluide conducteur, nous nous sommes intéressés au système hyperbolique des équations de la magnétohydrodynamique. Elles se composent des équations d'Euler couplées à l'équation d'induction magnétique. Si le champ magnétique $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$ est à divergence nulle à l'instant initial, il est facile de montrer que :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$

pour tous les temps. Cette propriété est importante pour des raisons physiques car elle exprime l'absence de charges magnétiques libres.

Or en général, après discrétisation, des erreurs numériques apparaissent et la divergence du champ magnétique a tendance à dériver au cours du temps. Il est alors possible que le comportement du système devienne non physique. De nombreuses techniques ont été mises au point pour traiter le problème, nous considérerons celle introduite par Dedner *et al.* [DKK⁺02]. Elle consiste à ajouter une inconnue supplémentaire, qui couple la contrainte de divergence au système hyperbolique. Les erreurs de divergence sont transportées en dehors du domaine à une vitesse donnée. Le système ainsi corrigé reste hyperbolique, la masse volumique, le moment, l'induction magnétique et l'énergie totale sont également conservées.

Le système de la MHD idéale n'est pas strictement hyperbolique, au sens où ses valeurs propres peuvent coïncider dans certain cas, par exemple lorsque les conditions initiales sur le champ magnétique sont coplanaires. Les ondes composées apparaissent dans les solutions du problème de Riemann [Tor03b, Tor03a]. On propose dans le chapitre 4 une étude d'un modèle simplifié introduit par Rho Shyn Myong [Myo96] qui illustre cette propriété.

Deuxième partie : construction de lois d'état admissibles pour la transition de phase

La seconde partie de la thèse est consacrée à la construction rigoureuse de lois d'état pour la modélisation d'écoulements avec transition de phase.

Comme nous l'avons dit précédemment, les modèles à interface diffuse supposent que le système de lois de conservation considéré soit fermé avec une loi d'état capable de décrire la thermodynamique du mélange liquide-gaz. L'avantage de cette approche réside dans l'utilisation d'un schéma numérique unique permettant de résoudre le même système d'équations en tout point de l'écoulement.

Rappelons que l'évolution du fluide est décrite par les équations d'Euler, auxquelles on adjoint une loi d'état qui définit la pression du fluide comme une fonction de la masse volumique et de l'énergie. Selon les principes de la thermodynamique, cette loi de pression doit satisfaire des contraintes de convexité qui assurent, notamment, l'hyperbolicité du système d'Euler.

L'équation de van der Waals est un modèle classique de transition de phase. Il est bien connu que cette loi d'état n'est pas globalement convexe. De ce fait, les équations du fluide sont de type hyperbolique/elliptique [MP89]. Pour retrouver une loi d'état admissible, il est nécessaire d'appliquer la construction de Maxwell (ou loi des aires égales) [DMV05], dont le calcul numérique peut s'avérer coûteux.

Dans un contexte industriel, l'usage de lois analytiques de type gaz parfaits ou van der Waals est insuffisant pour l'obtention de résultats réalistes. Il est souvent nécessaire d'utiliser des lois d'état tabulées. Les outils d'approximation standards, tels que l'interpolation polynomiale, ne préservent en général pas la convexité. L'usage de telles lois peut alors fausser la résolution de l'écoulement et entraîner des comportements non physiques. Nous avons pour objectif, dans cette seconde partie, de développer une méthode générale pour la construction de lois d'état tabulées pour le changement de phase liquide-vapeur.

Thermodynamique du changement de phase

Nous commençons par rappeler dans le chapitre 5 des principes de thermodynamique des mélanges. On choisit de décrire un corps par son énergie extensive, fonction du volume, de la masse et de l'entropie du fluide. De façon classique [LE94], l'énergie d'un mélange hors équilibre est donnée par la somme des énergies de chaque phase. Le second principe de la thermodynamique implique que l'énergie du mélange doit atteindre un minimum à l'équilibre. Le problème du calcul de la loi de mélange se réduit donc à un problème d'optimisation convexe. L'ensemble de contraintes, sur lequel on résout le problème d'optimisation, joue un rôle particulier. Ces contraintes sont différentes selon que l'on considère le cas d'un mélange immiscible ou d'un mélange miscible. Que le mélange soit miscible ou immiscible, nous montrons que l'énergie extensive du mélange se définit comme une inf-convolution des énergies de chaque phase.

Afin d'incorporer la loi d'état dans un code de CFD, mais aussi pour réduire la dimension du problème, il est indispensable de traduire ce résultat sur une loi d'état écrite sur les variables intensives. Deux types d'énergies intensives sont introduites : l'énergie massique (ou spécifique) et l'énergie volumique, cette dernière s'avérant plus adaptée à la description du mélange miscible. Le résultat majeur de ce chapitre réside dans la détermination d'une structure algébrique pour calculer des lois d'état intensives de mélange : nous montrons que l'énergie volumique du mélange miscible est l'inf-convolution des énergies volumiques de chaque phase. Dans le cas d'un mélange immiscible, il faut calculer l'enveloppe convexe du minimum des deux énergies. Ces opérations assurent la convexité de l'énergie, requise pour garantir l'hyperbolicité du système d'Euler. De plus, ce formalisme permet de retrouver simplement de nombreuses propriétés des lois de changement de phase.

Approche numérique de la transformée de Legendre

Dans ce chapitre, on commence par rappeler le lien entre la transformée de Legendre (TL) et les opérations, décrites au chapitre précédent, qui permettent de calculer l'énergie d'un mélange miscible ou immiscible.

- la TL d'une inf-convolution est une addition,
- la TL d'un minimum est un maximum.

Cette opération préserve de plus la convexité. Ainsi, après transformée de Legendre, les deux opérations permettant de calculer l'énergie de mélange deviennent extrêmement simples. Il s'agit des lois + et max.

Afin d'exploiter cette simplicité des calculs dans le domaine transformé par Legendre, il est important de fournir un outil de calcul numérique de la TL.

Or un autre avantage crucial de la transformée de Legendre est qu'elle admet, de même que la transformée de Fourier, une version discrète et un algorithme rapide pour le calcul numérique [Bre89], [Luc96, Luc97]. Nous proposons une adaptation de l'algorithme de Lucet [Luc97]. Cet algorithme consiste à calculer la transformée de Legendre d'une approximation affine par morceau de la fonction que l'on souhaite transformer. L'algorithme est d'abord détaillé dans le cas monodimensionnel. Il repose sur diverses astuces pour obtenir un algorithme rapide ainsi qu'un traitement efficace des bords du domaine d'étude. L'extension aux dimensions supérieures repose sur la propriété de factorisation [Luc97] de la TL : seules des transformées 1D interviennent dans la transformée de Legendre multidimensionnelle. Il s'ensuit que les propriétés de convergence et de complexité s'appliquent également au cas 2D. Le chapitre est complété par différentes illustrations numériques uni- et bi-dimensionnelles qui attestent du bon comportement de notre algorithme.

Construction de lois d'état admissibles

Le dernier chapitre est consacré aux applications des outils numériques développés pour le calcul de lois d'état de mélange. Le principe général consiste d'abord à tabuler la loi d'état physique ou analytique de chaque phase. On applique alors aux tables une transformée de Legendre discrète. Dans le domaine de Legendre les opérations de mélange sont extrêmement simples (il suffit d'appliquer des max ou des +). Une seconde transformée de Legendre sur la table résultante permet de revenir au domaine de calcul initial. Notre construction permet donc un calcul pratique très simple des lois de pression tabulées pour les mélanges avec transition de phase. Notre première application numérique consiste en la convexification de la loi de van der Waals. Nous montrons qu'appliquer successivement deux transformées de Legendre équivaut à la construction de Maxwell (loi des aires égales). On s'attache ensuite à contruire des lois d'état de mélanges binaires. Considérant que chaque phase est décrite par un gaz parfait, on retrouve numériquement les résultats présentés par Jaouen [Jao01] et Helluy et Seguin [HS06]. La généralité de notre approche nous permet de construire des lois plus complexes, pour lesquelles l'énergie du mélange n'admet pas d'expression analytique. On traitera en particulier le mélange de deux gaz raides. Enfin, nous présenterons diverses expériences numériques pour le cas d'un mélange miscible.

Publications Les travaux présentés dans ce manuscrit ont fait l'objet de publications.

1. Les résultats du chapitre 2 ont été présentés au congrès FVCA 5 et sont détaillés dans les actes de congrès sous la référence :

Helluy, P., Mathis, H., Müller, S., *An ALE averaging approach for the computing of bubble oscillations*. Finite volumes for complex applications V, 487–494, ISTE, London, 2008.

Un article plus complet, qui compare la méthode Lagrange-projection proposée ci-après à une approche de type Glimm, est en cours d'élaboration.

2. Le chapitre 3 a donné lieu à une publication dans les actes du congrès de l'AIAA :

Helluy P., Hérard J.M., Mathis H., *A well-balanced approximate Riemann*

solver for variable cross-section compressible flows. AIAA paper 2009-3540, <http://www.aiaa.org/>, 2009. Une version étendue est soumise pour publication.

Le schéma équilibre proposé est articulé autour du flux de VFRoe-ncv, pour lequel nous avons établi deux nouvelles corrections entropiques. Celles-ci sont présentées dans la note DOI 10.1016/j.crme.2010.07.007 éditée aux Comptes Rendus de Mécanique :

Helluy P., Hérard J.-M., Mathis H., Müller S., *A simple parameter-free entropy correction for approximate Riemann solvers*, hal-00466999, 2010.

3. Les travaux concernant le schéma Galerkin discontinu appliqué à la magnétohydrodynamique ont été développés en partie au CEMRACS 2008 et publiés sous la référence suivante :

Altmann, C., Belat, T., Gutnic, M., Helluy, P., Mathis, H., Sonnendrücker, E., Angulo, W., Hérard, J.-M., *A local time-stepping discontinuous Galerkin algorithm for the MHD system*. ESAIM, Proc. 28, 33-54, 2009.

4. La seconde partie du manuscrit traite de la construction de lois d'état de mélange en transition de phase au moyen des algèbres $(\max, +)$ et de la transformée de Legendre. La méthode que nous proposons est, à notre connaissance, nouvelle et est détaillée dans l'article suivant, accepté pour publication dans la revue M3AS :

Helluy P., Mathis H., *Pressure laws and fast Legendre transform*, hal-00424061, 2010.

QUELQUES MÉTHODES DE
RÉSOLUTION NUMÉRIQUES DE
MODÈLES COMPLEXES DE FLUIDES
COMPRESSIBLES

Nous proposons dans cette partie deux schémas numériques adaptés à la modélisation d'écoulements diphasiques sans transfert de masse. Le modèle mathématique considéré dans les deux cas repose sur les équations d'Euler écrites en coordonnées sphériques. Le système est non-conservatif de part son terme source géométrique. L'ajout d'une variable de couleur, advectée à la vitesse du fluide, nous permettra le suivi de l'interface. La première approche consiste en un schéma de type *Lagrange-projection* adapté au traitement de l'interface. Le traitement du terme source est étudié dans le chapitre 3. On y construit un schéma équilibre, articulé autour du solveur approché VFRoe-ncv, pour lequel on propose de nouvelles corrections entropiques. Le chapitre 4 concerne la mise en œuvre d'un schéma Galerkin discontinu appliqué aux équations de la magnétohydrodynamique.

MÉTHODE LAGRANGE-PROJECTION POUR LA SIMULATION DE BULLES DIPHASIQUES

On s'intéresse dans ce chapitre à un écoulement diphasique eau-air. En particulier, il s'agit de modéliser la dynamique d'une bulle de gaz dans un liquide. Lorsque les fluctuations de pression sont fortes, il est classique d'observer des zones de cavitation dans la phase liquide. Mais on se restreint dans ce chapitre au cas où la transition de phase peut être négligée. La bulle est par exemple remplie d'air et il n'y a pas de transfert de masse avec le liquide. Chaque phase doit être modélisée par une loi adaptée à son comportement thermodynamique. La phase gazeuse est décrite par une loi de gaz parfait. Pour le liquide, on choisit une loi de gaz raide relativement réaliste tout en restant simple d'emploi.

La modélisation théorique et numérique de fluide monophasique compressible est un sujet largement étudié et globalement bien compris. La difficulté supplémentaire dans le cas diphasique réside dans la représentation de l'interface entre les deux fluides. On distingue deux approches pour traiter les interfaces :

- Les méthodes lagrangiennes se caractérisent par un maillage du domaine de calcul qui suit l'écoulement. Elles permettent un suivi naturel de l'interface entre les deux phases et une bonne précision. Cependant, si la topologie de l'interface subit trop de déformations, ces algorithmes manquent de généralité.
- Les méthodes eulériennes reposent sur l'utilisation d'un maillage fixe, sur lequel évolue le fluide. L'écoulement peut présenter des fluctuations importantes sans que cela n'entrave le calcul. Cependant, la diffusion numérique, liée à la discrétisation des termes d'advection, entraîne souvent une mauvaise résolution de l'interface.

Les schémas lagrangiens, de part leur manque de généralité sont de moins en moins employés (malgré quelques notables exceptions, comme par exemple [GKM⁺85]) et ces dernières années de nombreux efforts ont été faits pour améliorer la précision des schémas eulériens. Il se trouve en effet que la plupart des schémas eulériens conservatifs donne de très mauvais résultats à l'interface entre les deux fluides [BHR03], [Abg96], [Kar96]. Ce manque de précision est appelé « oscillation de pres-

sion » par certains auteurs, bien qu'il s'agisse moins d'une instabilité que d'une imprécision. Karni dans [Kar96] propose une nouvelle approche pour éliminer les « oscillations » à l'interface. En dehors de l'interface, les équations conservatives sont résolues par une méthode eulérienne. À l'interface, une équation non conservative sur la pression est résolue. Le schéma non-conservatif global préserve les états de pression et vitesse constantes.

De nombreuses autres approches ont été développées pour prévenir les oscillations à l'interface. Abgrall et Saurel [SA99b] ont proposé un schéma basé sur la convection non conservative des paramètres des lois d'état des gaz raides (une extension de cette technique aux lois de pression quelconques est développée dans [GHS02]). Le schéma préserve les discontinuités de contact mais introduit un petit transfert de masse entre les deux phases. Une autre approche consiste à calculer les flux à l'interface en résolvant deux problèmes de Riemann monophasiques. Il s'agit des méthodes *ghost fluid*, introduites par Fedkiw *et al.* [FAMO99] et reprises notamment par Müller *et al.* [MBK⁺09].

Dans ce premier chapitre, nous allons tenter d'utiliser une approche intermédiaire entre l'approche lagrangienne et l'approche eulérienne. La modélisation tridimensionnelle du problème étant délicate, on se place d'abord en 1D, en coordonnées sphériques. Nous allons appliquer un schéma eulérien dans tout le domaine de calcul, sauf à l'interface où nous utiliserons un schéma lagrangien. Notre approche est donc similaire à l'approche *Arbitrary Lagrangian Eulerian* (ALE) [Hir73]. Ce schéma est d'une bonne précision, il conserve les états à vitesse et pression constante pour une bulle mono-dimensionnelle. Cependant, il nécessite à certains pas de temps le retour à un maillage eulérien. L'originalité de notre méthode repose sur l'adaptation du pas de temps en fonction de la position de l'interface et le fait que le retour à la grille eulérienne n'a pas lieu à tous les pas de temps. Notre approche a des liens avec les techniques Lagrange-projection développées entre autres par Després et Lagoutière [DL01], Kokh et Lagoutière [KL10].

Une autre difficulté provient des effets tridimensionnels qui conduisent à des détentes et compressions extrêmement violentes de la bulle. Enfin, l'écart de vitesse entre la matière et les ondes acoustiques conduit à des durées de calcul importantes (plusieurs jours sur un ordinateur de bureau), bien qu'il s'agisse de calcul mono-dimensionnels ! En dépit de ces difficultés, nous obtenons des résultats relativement satisfaisants. Pour améliorer la précision, il faut utiliser des outils de calcul nettement plus sophistiqués [MBK⁺09].

Le plan de ce chapitre est le suivant.

Dans un premier temps, on détaille un modèle physique décrivant la dynamique d'une bulle sphérique de gaz plongée dans un liquide. Il s'agit du modèle de Keller-Miksis [KM80] et d'un cas particulier appelé modèle de Rayleigh-Plesset [F⁺95]. Reposant sur la résolution d'une équation différentielle ordinaire, il décrit l'évolution du rayon d'une bulle sphérique en fonction du temps, sans toutefois donner d'information sur la propagation des ondes acoustiques dans le milieu. En s'appuyant sur l'article de Müller *et al.* [MBK⁺09], on explicite le choix des conditions initiales et le calcul du rayon d'équilibre nécessaire à la résolution numérique de l'équation différentielle de Keller-Miksis.

Puisque l'on souhaite à terme caractériser les profils de pression et de vitesse

dans chaque phase, il faut introduire un second modèle. Celui de Keller-Miksis sera utilisé à titre comparatif. Dans un second temps nous présentons ce second modèle. En supposant que les deux phases forment un milieu continu, l'écoulement est décrit par les équations d'Euler. Afin de distinguer la phase liquide de la phase gazeuse, on introduit l'indicatrice du milieu gazeux φ . La position de l'interface est déterminée par une équation portant sur φ . Rappelons que le domaine est monodimensionnel axisymétrique. On s'intéresse aux propriétés mathématiques du modèle. Les résultats de Barberon *et al.* [BHR03] relatifs au problème de Riemann seront brièvement rappelés. Le problème de Riemann étant globalement bien posé, nous décidons d'utiliser dans les simulations numériques un solveur de Riemann exact.

La troisième partie est consacrée à la construction du schéma numérique Arbitrary Lagrangian Eulerian. On commence par décrire le principe des méthodes eulériennes et lagrangiennes. Sur un exemple simple, on illustre les oscillations de pression qui interviennent à l'interface d'un écoulement bifluide résolu par une méthode eulérienne conservative. On constate alors qu'une approche hybride est plus adaptée au problème : en dehors de l'interface, on utilise un schéma conservatif eulérien tandis qu'une approche lagrangienne est appliquée à l'interface. Ce choix permet d'assurer que la fonction de couleur φ ne prend ses valeurs que dans $\{0, 1\}$ (absence de diffusion numérique de l'interface). La condition de stabilité est établie de façon classique. L'originalité de la méthode réside dans l'étape de projection. Lorsque l'interface se déplace vers la gauche, par exemple, la taille de la cellule adjacente C_i diminue. L'idée est de fusionner la cellule C_i et sa voisine C_{i-1} et de calculer le bilan des flux sur la réunion de ces deux cellules. Le pas de temps est ensuite calculé sur toutes les cellules hormis la cellule fusionnée et ajusté si besoin. Il s'agit d'une technique utilisée par Nussbaum [Nus07] dans un autre contexte.

Enfin, on détaille succinctement l'extension à l'ordre 2 en espace par une méthode MUSCL. On se réfère aux articles de Harten [HLVL83] ou Berthon [Ber05], la liste étant non exhaustive. L'extension à l'ordre 2 en temps semble délicate et n'est pas abordée ici. En effet, en utilisant une méthode de Runge-Kutta 2 par exemple, l'évaluation en temps ne garantirait plus que $\varphi = 0$ ou 1. L'interface ne serait plus alors parfaitement résolue.

Différents tests numériques complètent le chapitre. On donne tout d'abord un test de validation 1D qui démontre le bon comportement de notre schéma. Puis la méthode est appliquée à la modélisation d'une bulle de gaz dans un liquide. Dans les calculs, on observe que la bulle oscille autour d'une position d'équilibre. Les oscillations peuvent être d'amplitude plus ou moins grandes en fonction du rayon et du niveau de raréfaction du gaz de la bulle à l'instant initial. On propose deux tests pour lesquels le rayon d'équilibre est choisi respectivement grand et petit. Le premier test concerne donc une bulle présentant de petites oscillations, l'autre test correspondant à de fortes oscillations. Dans les deux cas, on étudie l'ordre 1 et 2 en espace sur différents maillages. Les résultats sont comparés au modèle de Keller Miksis.

2.1 Problème physique considéré

Considérons une bulle de gaz initialement dilatée, dans un liquide. La pression dans la bulle est supposée très faible. Par conséquent, le rayon de la bulle va avoir tendance à diminuer. Après un certain temps un rayon d'équilibre s'établit. On s'intéresse à la phase transitoire, c'est-à-dire à la position de l'interface liquide-gaz au cours du temps. Introduite par Rayleigh en 1917, l'équation de Rayleigh-Plesset décrit la dynamique d'une bulle sphérique de gaz dans un liquide. Le modèle de Keller-Miksis [KM80], que l'on détaille ci-dessous, en est une généralisation.

2.1.1 Modèle de Keller-Miksis

On se place en géométrie axisymétrique et l'on considère toutes les dimensions de l'espace $d = 1, 2$ ou 3 ($r \in \mathbb{R}^+$ désigne la variable d'espace et $t \in \mathbb{R}^+$ le temps). Pour un gaz parfait isentropique, la pression dépend du rayon R de la bulle selon l'équation :

$$p_b(R) = KR^{-d\gamma}, \quad (2.1)$$

où γ désigne le coefficient polytropique et K une constante déterminée par le gaz considéré. On suppose que la pression $p_b(R)$ dans la bulle est égale à la pression du fluide $p(r, t)$ à l'interface $r = R$:

$$p_b(R) = p(R, t),$$

et qu'il existe un potentiel de vitesse $\Phi(r, t)$. La vitesse $R'(t)$ de la surface de la bulle est égale à la vitesse du fluide à l'interface :

$$R'(t) = \partial_r \Phi(R, t). \quad (2.2)$$

Le potentiel de vitesse, la densité ρ et la pression p satisfont les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement :

$$\partial_t \rho + \partial_r \Phi \partial_r \rho + \rho \Delta \Phi = 0, \quad (2.3)$$

$$\rho(\partial_{rt} \Phi + \partial_r \Phi \partial_{rr} \Phi) + \partial_r p = 0. \quad (2.4)$$

On cherche R , ρ , p et Φ satisfaisant (2.1)-(2.4), connaissant leurs conditions initiales.

En supposant $\Phi_\infty = 0$ et p_∞ constante, puis en intégrant (2.4) entre r et $+\infty$, il vient :

$$-\partial_t \Phi - \frac{1}{2}(\partial_r \Phi)^2 + \int_p^{p_\infty} \frac{1}{\rho} dp = 0. \quad (2.5)$$

La vitesse du son c satisfait $c^2 = \partial_\rho p$ [MP89], soit en injectant dans (2.5) et en différenciant par rapport à t , on obtient :

$$\partial_{tt} \Phi + \partial_r \Phi \partial_{rt} \Phi + \frac{c^2}{\rho} \partial_t \rho = 0. \quad (2.6)$$

D'après (2.3), on peut éliminer $\partial_t \rho$ de (2.6) et se ramener à

$$\frac{1}{c^2} \partial_{tt} \Phi - \Delta \Phi = -\frac{1}{c^2} (\partial_r \Phi \partial_{rt} \Phi) + \frac{\partial_r \rho \partial_r \Phi}{\rho}. \quad (2.7)$$

Pour un fluide quasi incompressible, c^2 est grand et $\partial_r \rho$ petit. Le membre de droite est donc négligeable par rapport au terme de gauche. On suppose également $\rho = \rho_0$ constante. On se ramène alors à l'équation des ondes :

$$\frac{1}{c^2} \partial_{tt} \Phi - \Delta \Phi = 0. \quad (2.8)$$

Par ailleurs, de la formule (2.5) on déduit :

$$p = p_\infty - \rho_0 \left(\partial_t \Phi + \frac{1}{2} (\partial_r \Phi)^2 \right). \quad (2.9)$$

Notons $\delta(R)$ la différence des pressions divisée par ρ :

$$\delta(R) = \frac{1}{\rho} (p_b(R) - p_\infty) = \frac{1}{\rho} (K R^{-d\gamma} - p_\infty), \quad (2.10)$$

c'est-à-dire en $r = R(t)$:

$$\delta(R) = -\partial_t \Phi - \frac{1}{2} (\partial_r \Phi)^2. \quad (2.11)$$

On écrit la solution générale de (2.8), pour f et g deux fonctions arbitraires,

$$\Phi(r, t) = \frac{1}{r} f \left(t - \frac{r}{c_0} \right) + \frac{1}{r} g \left(t + \frac{r}{c_0} \right), \quad (2.12)$$

que l'on injecte dans (2.11) :

$$\delta(R) = c_0 R'(t) + \frac{c_0}{R} \Phi(R, t) - \frac{1}{2} (R'(t))^2 - \frac{2}{R} g' \left(t + \frac{a}{c_0} \right). \quad (2.13)$$

Dérivant (2.11) et utilisant (2.5) pour éliminer Φ_t , on se ramène à l'équation de Keller-Miksis :

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{R'(t)}{c_0} \right) R(t) R''(t) + \frac{3}{2} R'(t)^2 \left(1 - \frac{R'(t)}{3c_0} \right) = \\ \left(1 + \frac{R'(t)}{c_0} \right) \frac{p_b(t) - p_0}{\rho_0} + \frac{R(t)}{\rho_0 c_0} p_b'(t). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Choix des conditions initiales

L'équation (2.14) doit être assortie de conditions initiales portant sur $R(0)$ et $R'(0)$. On prend habituellement $R'(0) = 0$. Dans [MBK⁺09] les auteurs utilisent les paramètres suivants,

$$\gamma = 4/3, \quad c_0 = 1482 \text{ m.s}^{-1}, \quad \rho_0 = 998 \text{ kg.m}^{-3}, \quad p_0 = 10^5 \text{ Pa}. \quad (2.15)$$

En particulier les rayons $R(0)$ et R_{eq} sont obtenus expérimentalement :

$$R(0) = 0.7469 \times 10^{-3} \text{ m} \quad R_{eq} = 0.692 \times 10^{-4} \text{ m}. \quad (2.16)$$

En supposant l'écoulement incompressible, c'est-à-dire la vitesse du son c infinie, on se ramène au modèle de Rayleigh-Plesset.

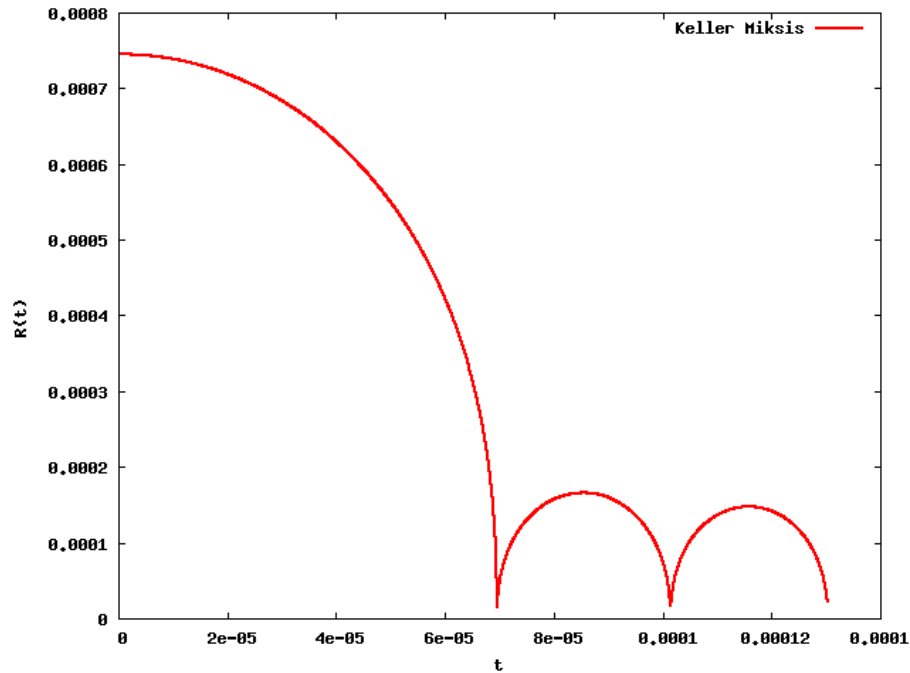


FIG. 2.1.1 – Modèle de Keller-Miksis : évolution du rayon R de la bulle en fonction du temps t . L'amortissement du rayon de la bulle est dû aux effets de compressibilité. Les paramètres choisis sont donnés en (2.15) et (2.16).

La résolution numérique de ces équations différentielles (par Maple) nous fournit l'évolution du rayon de la bulle en fonction du temps (voir figures 2.1.1 et 2.1.2). On observe des oscillations dont l'amplitude décroît pour le modèle de Keller-Miksis contrairement au modèle de Rayleigh-Plesset. L'amortissement est lié à la compressibilité (absente du modèle de Rayleigh-Plesset) : les ondes acoustiques en dissipant l'énergie, amortissent les oscillations. Notons que lorsque c est assez grand, il est possible d'appliquer le théorème de Cauchy-Lipschitz à l'équation différentielle (2.14). De ce fait, le rayon est une fonction régulière du temps et ne présente pas de point de rebroussement comme le laisse supposer la figure 2.1.1. Pour s'en convaincre, nous avons réalisé un zoom sur le point près duquel $R'(t)$ change de signe (voir figure 2.1.3).

Détermination des pressions et températures d'équilibre

Ni le modèle de Keller-Miksis ni le modèle proposé par la suite ne suppose de transfert de masse dans le gaz non condensable. Seul le choix du rayon d'équilibre R_{eq} fixe le niveau de gaz dans la bulle, *i.e.* le nombre constant de moles ν . Le rayon d'équilibre est le rayon tel que la pression dans la bulle est égale à la pression agissant de l'extérieur. Cela traduit un équilibre statique qui, en absence de termes de tension de surface, s'écrit :

$$p(R_{eq}) = p_0. \quad (2.17)$$

On suppose de plus l'équilibre thermique :

$$T(R_{eq}) = T_0, \quad (2.18)$$

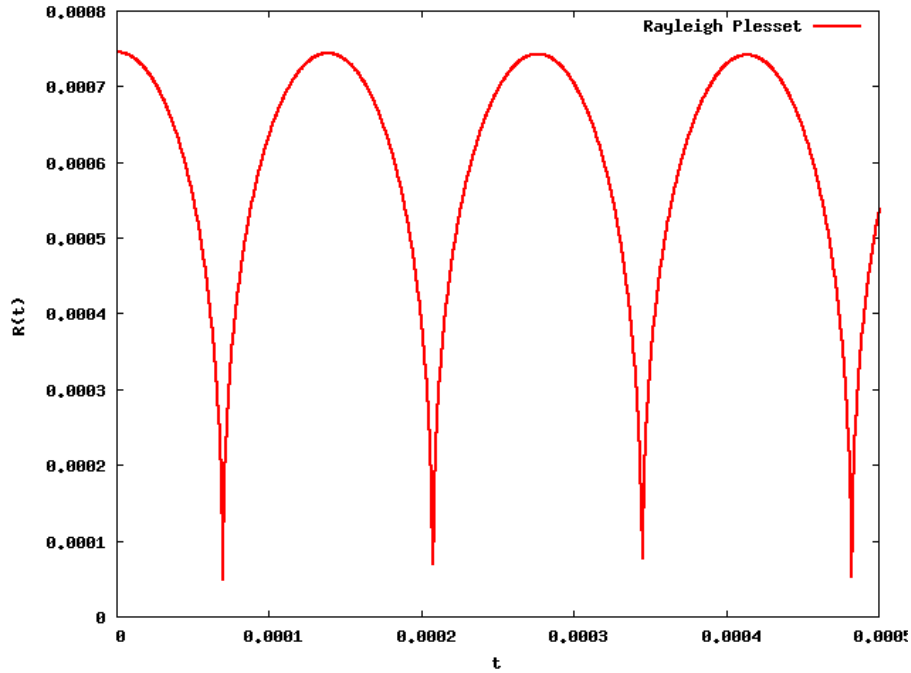


FIG. 2.1.2 – Modèle de Rayleigh-Plesset : évolution du rayon R de la bulle en fonction du temps t . Ce modèle suppose le fluide incompressible (*i.e.* la vitesse du son infinie). Le rayon de la bulle n'est plus amorti. Les conditions initiales sont données en (2.15) et (2.16).

où T_0 désigne la température dans le liquide. La loi des gaz parfaits s'écrit :

$$pV = \nu RT,$$

avec $R = 8,314472 \text{ J.mol.K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits. On en déduit le nombre de moles dans la bulle :

$$\nu = \nu_{eq} = \frac{p_{eq} V_{eq}}{T_{eq} R}. \quad (2.19)$$

La bulle étant supposée sphérique, son volume à l'équilibre vérifie :

$$V_{eq}(R_{eq}) = \frac{4\pi R_{eq}^3}{3}.$$

La pression dans la bulle, pour un rayon R_b donné, se déduit de la loi adiabatique :

$$p(R_b) = p_{eq} \left(\frac{R_{eq}^3}{R_b^3} \right)^\gamma. \quad (2.20)$$

Connaissant le nombre de moles ν_{eq} et le volume $V(R_b) = \frac{4\pi R_b^3}{3}$, on détermine la température du gaz parfait

$$T(R_b) = \frac{p(R_b)V(R_b)}{\nu R} = p(R_b) \left(\frac{R_{eq}^3}{p_{eq} R_b^3} \right) = T_{eq} \left(\frac{R_{eq}^3}{R_b^3} \right)^{\gamma-1}. \quad (2.21)$$

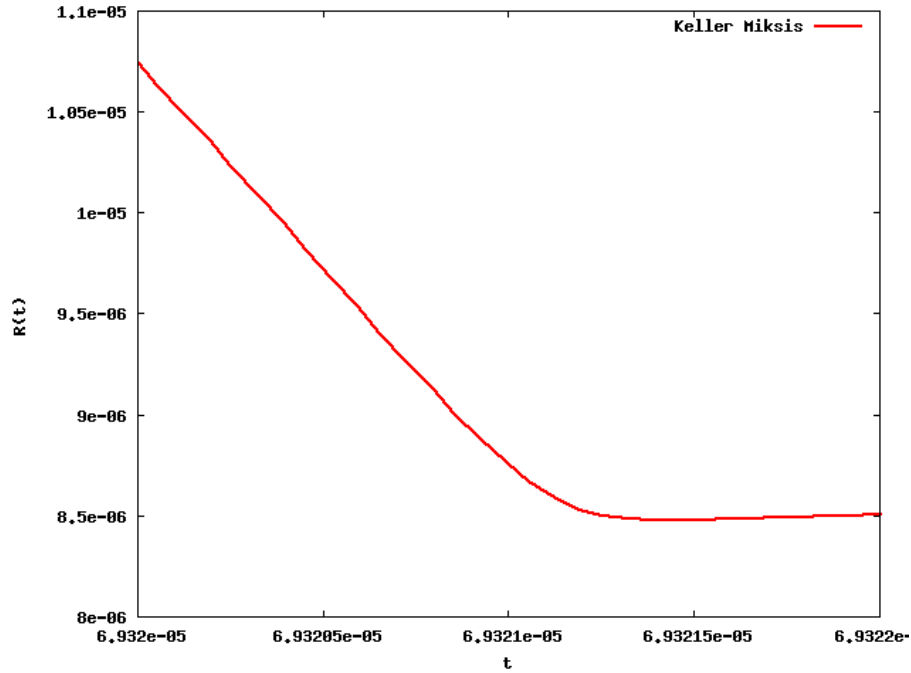


FIG. 2.1.3 – Modèle de Keller-Miksis : évolution du rayon R de la bulle en fonction du temps t . Contrairement à ce que laisse supposer la figure 2.1.1, le rayon de la bulle est une fonction régulière du temps et ne présente pas de point de rebroussement.

A titre d'exemple, on définit les paramètres dans le cas d'une bulle soumise à une forte compression (ces valeurs seront utilisées au paragraphe 2.4.3). Le rayon d'équilibre est fixé à $R_{eq} = 0.692 \times 10^{-4}$ m. Dans le liquide la température est $T_0 = 293.15$ K. Les densités et pressions de référence sont les mêmes que précédemment. Pour un rayon initial, et donc maximal, $R_b = 0.7469 \times 10^{-3}$ m, on déduit des formules (2.20) et (2.21) la pression et la température dans la bulle :

$$p(R_b) = 4.579 \text{ Pa} \quad T(R_b) = 16.9 \text{ K}. \quad (2.22)$$

La densité initiale étant $\rho_0 = 1.186 \text{ kg.m}^{-3}$, on en déduit :

$$\rho(R_b) = 0.957 \times 10^{-3} \text{ kg.m}^{-3}.$$

Les modèles de Keller-Miksis et Rayleigh-Plesset décrivent la dynamique de la bulle sans toutefois donner d'information sur la propagation des ondes acoustiques dans le milieu. Or on souhaiterait caractériser les profils de pressions et vitesses dans chaque phase. On propose donc un second modèle, plus général : l'écoulement est supposé monofluide compressible, chaque phase étant décrite par une loi d'état adaptée. Les résultats numériques seront comparés à ceux du modèle de Keller-Miksis.

2.2 Modèle compressible

On choisit de décrire le fluide par les variables macroscopiques que sont la masse volumique ρ , la vitesse \mathbf{u} et l'énergie interne e , dépendant de la variable

d'espace $x \in \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2$ et 3 et du temps $t \in \mathbb{R}^+$. L'évolution dynamique du fluide obéit aux principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. En négligeant les effets de dissipation thermique et visqueuse et la gravité, on obtient le système d'équations d'Euler :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p) = 0, \\ \partial_t(\rho E) + \operatorname{div}((\rho E + p)\mathbf{u}) = 0, \end{cases} \quad (2.23)$$

où $E = \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + e$ est l'énergie totale du fluide.

Afin d'identifier les phases gazeuse et liquide, on introduit la quantité φ , indicatrice de la région liquide, telle que :

$$\varphi(x, t) = \begin{cases} 0, & \text{dans la phase gazeuse,} \\ 1, & \text{dans la phase liquide.} \end{cases} \quad (2.24)$$

L'interface se déplaçant à la vitesse du fluide, la quantité φ satisfait donc l'équation :

$$\partial_t(\rho \varphi) + \operatorname{div}(\rho \varphi \mathbf{u}) = 0, \quad (2.25)$$

qui assure qu'il n'y a pas de transfert de masse entre les phases. Une relation supplémentaire est nécessaire pour clore le système. On y ajoute une loi d'état, définissant la pression

$$\Pi(\rho, \varepsilon, \varphi) = (\gamma(\varphi) - 1)\rho\varepsilon - \gamma(\varphi)\pi(\varphi), \quad (2.26)$$

avec

$$\gamma(0) = \gamma_{vap}, \quad \gamma(1) = \gamma_{liq}, \quad \pi(0) = \pi_{vap} = 0, \quad \pi(1) = \pi_{liq}.$$

Ainsi la phase gazeuse suit une loi de gaz parfait tandis que la phase liquide est décrite par une loi de gaz raide.

Remarque 2.2.1. Ces lois d'état seront plus détaillées au chapitre 7.

Les coefficients $\gamma(\varphi)$ et $\pi(\varphi)$ dépendent de la thermodynamique du fluide et sont en général déduits de l'expérience. On pose ensuite :

$$p(x, t) = \Pi(\rho(x, t), e(x, t), \varphi(x, t)). \quad (2.27)$$

Puisque l'on s'intéresse à la dynamique d'une bulle sphérique, il est plus commode de se placer en géométrie axisymétrique. Considérant le changement de variable :

$$(x, y, z) \mapsto (r, \theta, \psi), \quad (2.28)$$

tel que

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad x = r \sin \theta \cos \psi, \quad y = r \sin \theta \sin \psi, \quad z = r \cos \theta,$$

on définit les fonctions

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(r, t) &= \rho(x, y, z, t), & \tilde{u}(r, t) &= u(x, y, z, t), & \tilde{p}(r, t) &= p(x, y, z, t), \\ \tilde{\varphi}(r, t) &= \varphi(x, y, z, t), & \tilde{E}(r, t) &= E(x, y, z, t). \end{aligned}$$

Puis en supposant l'écoulement invariant par rotation, on a :

Proposition 2.2.2. *Le système (2.23) s'écrit de façon équivalente :*

$$\begin{cases} \partial_t(r^{d-1}\tilde{\rho}\tilde{\varphi}) + \partial_r(r^{d-1}\tilde{\rho}\tilde{\varphi}\tilde{u}) = 0, \\ \partial_t(r^{d-1}\tilde{\rho}(1-\tilde{\varphi})) + \partial_r(r^{d-1}\tilde{\rho}(1-\tilde{\varphi})\tilde{u}) = 0, \\ \partial_t(r^{d-1}\tilde{\rho}\tilde{u}) + \partial_r(r^{d-1}(\tilde{\rho}\tilde{u}^2 + \tilde{p})) = (d-1)\tilde{p}r^{(d-2)}, \\ \partial_t(r^{d-1}\tilde{\rho}\tilde{E}) + \partial_r(r^{d-1}(\tilde{\rho}\tilde{E} + \tilde{p})\tilde{u}) = 0. \end{cases} \quad (2.29)$$

Par souci de lisibilité, on s'affranchit désormais des $\tilde{\cdot}$.

Propriétés mathématiques

On s'intéresse maintenant aux propriétés mathématiques de ce modèle et au problème de Riemann associé, qui s'avèrera utile pour la construction du schéma numérique. On considère le système (2.29) exprimé comme

$$\partial_t W + \partial_r f(W) = S(W, r) \quad (2.30)$$

avec

$$W = \begin{pmatrix} \rho\varphi \\ \rho(1-\varphi) \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad f(W) = \begin{pmatrix} \rho\varphi u \\ \rho(1-\varphi)u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix}$$

$$\text{et } S(W, r) = \begin{pmatrix} (1-d)r^{-1}\rho\varphi u \\ (1-d)r^{-1}\rho(1-\varphi)u \\ (1-d)r^{-1}\rho u^2 \\ (1-d)r^{-1}(\rho E + p)u \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

On rappelle brièvement quelques définitions concernant l'hyperbolicité (pour plus de détails, on se référera à [GR91], [GR96], [LeV92]).

Définition 2.2.3. *Si les valeurs propres de la matrice jacobienne du flux*

$$A(W) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial W_j}(W) \right)_{1 \leq i, j \leq 4}$$

sont réelles et A diagonalisable, le système est dit hyperbolique.

Proposition 2.2.4. *Muni de la loi d'état (2.26) le système (2.30) est hyperbolique quand*

$$p + \pi(\varphi) \geq 0.$$

Démonstration. Soient $s = s(\rho, e, \varphi)$ l'entropie

$$s = \frac{p + \pi(\varphi)}{\rho^{\gamma(\varphi)}},$$

et c la vitesse du son d'un gaz raide

$$c = \sqrt{\gamma(\varphi) \frac{p + \pi(\varphi)}{\rho}}. \quad (2.32)$$

On introduit le vecteur de variables primitives $Y = (\rho, u, s, \varphi)^T$ et le changement de variables bijectif $Y = Y(W)$. Le système (2.30) admet une formulation équivalente :

$$\partial_t Y + \tilde{A}(Y) \partial_r Y = \tilde{S}(Y, r), \quad (2.33)$$

pour laquelle

$$\tilde{A}(Y) = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \rho|_s} & u & \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial s|_\rho} & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

Alors, la matrice jacobienne du flux admet pour valeurs propres :

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u + c, \quad \lambda_4 = u, \quad (2.35)$$

et pour vecteurs propres :

$$r_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{c}{\rho} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_2 = \begin{pmatrix} -\frac{\partial p}{\partial s|_\rho} \\ 0 \\ c^2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c}{\rho} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Les valeurs propres sont réelles si et seulement si $c \geq 0$ *i.e.* si

$$p + \pi(\varphi) \geq 0.$$

□

Remarque 2.2.5. Le modèle thermodynamique autorise les pressions négatives (ou tensions) ce qui n'est pas physiquement exclu (cf. [F⁺95]).

Rappels concernant la solution du problème de Riemann monodimensionnel

La construction d'un solveur de type Godunov nécessite de connaître la solution du problème de Riemann. On rappelle ici brièvement le cadre mathématique et un résultat énoncé dans [Rou00] et [BHR03] (pour plus de détails, on renvoie les lecteurs aux ouvrages [GR96], [LeV92]). Considérons le problème de Riemann associé au système (2.30) et (2.26) :

$$\begin{cases} \partial_t W + \partial_x f(W) = 0, \\ W(x, 0) = \begin{cases} W_L & \text{si } x < 0, \\ W_R & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (2.37)$$

On s'intéresse aux solutions faibles au sens des distributions du problème *i.e.* à la construction de solutions autosimilaires $W(x, t) = \mathcal{R}\left(\frac{x}{t}, W_L, W_R\right)$. Le principe de construction de la solution repose sur l'hyperbolicité du système. La solution est constituée de différentes ondes dans le plan (x, t) qui correspondent aux vitesses caractéristiques. La donnée des vecteurs propres et des valeurs propres nous permet

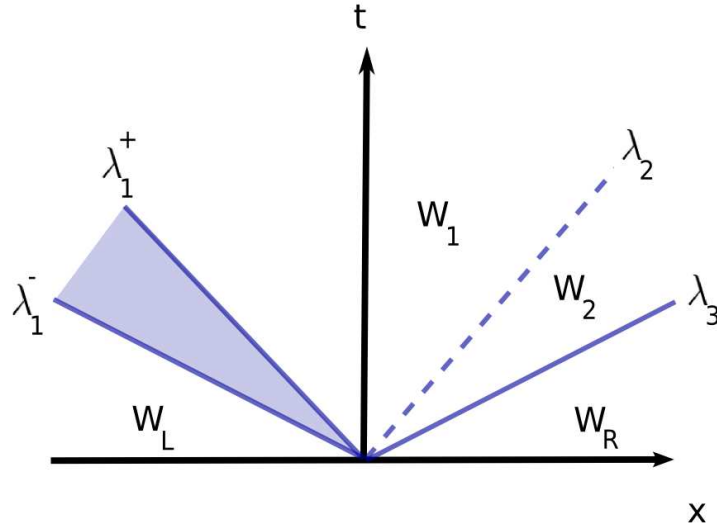


FIG. 2.2.1 – Ondes de la solution du problème de Riemann (2.38).

de caractériser les 4 champs caractéristiques. Les champs 2 et 4 sont linéairement dégénérés, *i.e.*

$$(\nabla \lambda_{2,4}) \cdot r_{2,4} = 0.$$

Les champs 1 et 3 sont vraiment non linéaires :

$$(\nabla \lambda_{1,3}) \cdot r_{1,3} \neq 0.$$

La solution du problème de Riemann correspond à la juxtaposition d'états constants séparés par des ondes de détente, de chocs ou des discontinuités de contact, *i.e.*

$$\mathcal{R}(\xi, W_L, W_R) = \begin{cases} W_L & \text{si } \xi \leq \lambda_1^-, \\ W_1 & \text{si } \lambda_1^+ \leq \xi \leq \lambda_2, \\ W_2 & \text{si } \lambda_2 \leq \xi \leq \lambda_3^-, \\ W_R & \text{si } \xi \geq \lambda_3^+, \end{cases} \quad (2.38)$$

où W_1 et W_2 sont les états intermédiaires et λ_i , $i = \{1, 2, 3\}$ les vitesses caractéristiques telles que :

$$\lambda_1^- \leq \lambda_{1+} < \lambda_2 < \lambda_{3-} \leq \lambda_{3+}. \quad (2.39)$$

Le schéma 2.2.1 illustre la répartition des ondes dans l'espace (x, t) . Si $\lambda_i^- < \lambda_i^+$, la i -onde vraiment non linéaire est une détente. Les invariants de Riemann étant constants dans une détente, on en déduit la solution $\mathcal{R}(\xi, W_L, W_R)$, pour $\lambda_i^- < \xi < \lambda_i^+$. Si la i -onde est une discontinuité de vitesse σ , les relations de Rankine-Hugoniot s'écrivent

$$\sigma(W_a - W_b) = f(W_a) - f(W_b),$$

les indices (a) et (b) désignant les états constants de part et d'autre de la discontinuité. On introduit la vitesse relative $v_i = u_i - \sigma$, $i = a$ ou b . Alors on a

[GR96] :

$$M = \rho_a v_a = \rho_b v_b, \quad (2.40)$$

$$\rho_a v_a^2 + p_a = \rho_b v_b^2 + p_b, \quad (2.41)$$

$$\left(\rho_a \left(e_a + \frac{1}{2} v_a^2 \right) + p_a \right) v_a = \left(\rho_b \left(e_b + \frac{1}{2} v_b^2 \right) + p_b \right) v_b, \quad (2.42)$$

$$\rho_a v_a \varphi_a = \rho_b v_b \varphi_b. \quad (2.43)$$

Si $M = 0$, les masses volumiques ρ_a et ρ_b étant non nulles, les vitesses v_a et v_b sont nulles. Les valeurs u et p sont constantes et φ peut être discontinue. L'onde est une discontinuité de contact se propageant à la vitesse $v_a = v_b = \sigma$. Si $M \neq 0$, il s'agit d'une onde de choc : la quantité φ est constante à la traversée de l'onde vraiment non linéaire.

Remarque 2.2.6. Les quantités u et φ ne pouvant être simultanément discontinues, la dernière équation du système non conservatif (2.33) est bien définie.

Rappelons que les indices 1 et 2 désignent les états intermédiaires de la solution du problème de Riemann. On a donc :

$$p_1 = p_2 = p^*, \quad (2.44)$$

$$\varphi_1 = \varphi_L, \quad (2.45)$$

$$\varphi_2 = \varphi_R, \quad (2.46)$$

et en absence de vide :

$$u_1 = u_2 = u^*. \quad (2.47)$$

On introduit la fonction (pour $a = L$ ou R)

$$\Xi_a(p^*) = \begin{cases} \Phi_a(p^*) & \text{si } p^* \geq p_a, \\ \Psi_a(p^*) & \text{si } p^* \leq p_a, \end{cases}$$

avec

$$\begin{aligned} \Phi_a(p^*) &= \sqrt{(p^* - p_a)(1/\rho_a - h_a(p^*))}, \\ \Psi_a(p^*) &= \frac{2}{\gamma_a - 1} \sqrt{\frac{\gamma_a}{\rho_a} (p_a + \pi_a)} \left(\left(\frac{p^* + \pi_a}{p_a + \pi_a} \right)^{\frac{\gamma_a - 1}{2\gamma_a}} - 1 \right), \\ h_a(p^*) &= \frac{1}{\rho_a} \frac{(\gamma_a + 1)(p_a + \pi_a) + (\gamma_a - 1)(p^* + \pi_a)}{(\gamma_a + 1)(p^* + \pi_a) + (\gamma_a - 1)(p_a + \pi_a)}. \end{aligned}$$

Alors on a :

$$u_1 = u_L - \Xi_L(p^*), \quad (2.48)$$

$$u_2 = u_R + \Xi_R(p^*). \quad (2.49)$$

Le problème de Riemann est résolu dès lors que l'on connaît p^* .

Théorème 2.2.7. [Rou00] *Le problème de Riemann admet une unique solution à densité positive si les états W_L et W_R satisfont :*

$$u_R - u_L \leq -\Xi_R(p) - \Xi_L(p), \quad (2.50)$$

où $p = \inf(\pi_L, \pi_R)$. La pression $p^* \geq -p$ est l'unique solution de

$$u_L - \Xi_L(p^*) = u_R + \Xi_R(p^*). \quad (2.51)$$

Si l'inégalité (2.50) est fautive, on introduit une zone de vide :

Théorème 2.2.8. [Rou00] *Si $u_R - u_L > -\Xi_R(p) - \Xi_L(p)$, le problème de Riemann admet encore une solution entropique. Par exemple, si $p = \pi_L$, on a $p^* = -p$, $\rho_1 = 0$, $u_2^* = u_R + \Xi_R(p^*)$, $u_1^* = u_L - \Xi_L(p^*)$ et en général $u_1^* \neq u_2^*$.*

2.3 Schéma numérique

Revenons au modèle de bulle de gaz plongée dans un liquide. Au cours du temps, l'interface liquide-gaz évolue suivant l'équation (2.25) page 21. Il s'agit de construire un schéma numérique adapté au suivi de l'interface. On distingue grossièrement deux types d'approches :

- les méthodes eulériennes : le système de coordonnées est fixé par rapport au repère de référence.
- les méthodes lagrangiennes : le système de coordonnées évolue suivant l'écoulement.

Dans un premier temps, on détaille les principes et propriétés des deux méthodes. Nous verrons ensuite que la modélisation de bulle nécessite de combiner les deux approches. Nous proposerons donc un schéma hybride utilisant à la fois des idées des méthodes Arbitrary Lagrangian Eulerian et des méthodes Lagrange-projection.

2.3.1 L'approche eulérienne

Cette approche consiste à considérer l'équation de transport de φ sous forme conservative. L'avantage est de pouvoir traiter chaque phase de manière simple au moyen d'outils classiques (schémas de volumes finis conservatifs de type godunov [HLVL83]). Dans ce type d'approche, le maillage est fixe et l'interface ne subit aucun traitement particulier. Son évolution est visualisée en fin de calcul. On parle de « front capturing method ». Bien que simple à mettre en œuvre, cette approche présente un inconvénient majeur : la diffusion numérique est très importante et altère la résolution de l'interface. On propose dans ce paragraphe une illustration de ce phénomène. Considérons le système conservatif (2.30) et (2.26). Le domaine d'étude unidimensionnel est discrétisé en volumes de contrôle C_i centrés en x_i tels que :

$$C_i =]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[.$$

Le pas d'espace h vérifie $x_i = ih$, le pas de temps étant noté τ . On cherche une approximation de W sur la cellule C_i au temps $t_n = n\tau$. La formulation conservative au sens des volumes finis est :

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\tau}{h} \left(F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \quad (2.52)$$

État gauche W_L	État droit W_R
$\rho_L = 10 \text{ kg/m}^3$	$\rho_R = 1 \text{ kg/m}^3$
$u_L = 50 \text{ m/s}$	$u_R = 50 \text{ m/s}$
$p_L = 1,1^5 \text{ Pa}$	$p_R = 1^5 \text{ Pa}$
$\gamma_L = 1,4$	$\gamma_R = 1,1$
$\pi_L = 0$	$\pi_R = 0$

TAB. 2.1 – Données initiales du problème de Riemann présenté en figure 2.3.1.

telle que :

$$\tau \leq \max_i \frac{h}{|u_{i\pm\frac{1}{2}}^n| + c_{i\pm\frac{1}{2}}^n}. \quad (2.53)$$

Les flux numériques $F_{i\pm\frac{1}{2}}$ sont donnés par un schéma de Godunov. A chaque arête $x_{i\pm\frac{1}{2}}$, on résout un problème de Riemann

$$\mathcal{W}_{i+1/2}^n = R(0, W_i^n, W_i^{n+1}). \quad (2.54)$$

Les conditions initiales (cf. tableau 2.1) sont données dans l'intervalle d'étude $]-0.5, 0.5[$ et le temps final est $t = 1 \text{ ms}$. Le nombre de cellules est 400 et CFL=0.9.

La position de l'interface gaz-liquide correspond à la discontinuité de contact, au travers de laquelle la pression doit être constante. Or le profil de pression présente une imprécision catastrophique de type « oreilles de lapin » (voir figure 2.3.1). L'utilisation d'autres solveurs de Riemann n'améliore pas la précision, ni même le passage à l'ordre 2 par une méthode MUSCL (l'extension à l'ordre 2 sera détaillé au paragraphe 2.3.5). Pour remédier au problème, Saurel et Abgrall [SA99b] ont proposé un traitement non conservatif de l'équation de transport de φ . Tandis que les équations de conservation de masse, de la quantité de mouvement et d'énergie sont résolues de façon conservative, l'équation non-conservative est résolue de manière à préserver les états (u, p) constants. Leur méthode est développée pour des lois thermodynamiques très restrictives. Dans [GHS03a], les auteurs étudient l'approche dans le cas de lois d'état quelconques, en utilisant les schémas de Godunov [God59] et VFRoe [BGH00] [GM96].

L'approche eulérienne est donc une méthode coûteuse puisqu'elle nécessite beaucoup plus de mailles que les méthodes lagrangiennes, à précision égale.

2.3.2 L'approche lagrangienne

L'approche lagrangienne est basée sur le suivi de l'interface. On parle de « front tracking method ». Le maillage, et en particulier l'interface, se déforme au gré de l'écoulement. Comme précédemment on considère le système (2.26)-(2.30). Le maillage étant supposé mobile, la position des cellules C_i^n et des points x_i^n dépend du temps t_n . Le pas d'espace vérifie :

$$h_i^n = x_{i+\frac{1}{2}}^n - x_{i-\frac{1}{2}}^n. \quad (2.55)$$

Les arêtes du maillage se déplacent à une vitesse arbitraire v , *i.e.*

$$x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = x_{i+\frac{1}{2}}^n + \tau^n v_{i+\frac{1}{2}}^n. \quad (2.56)$$

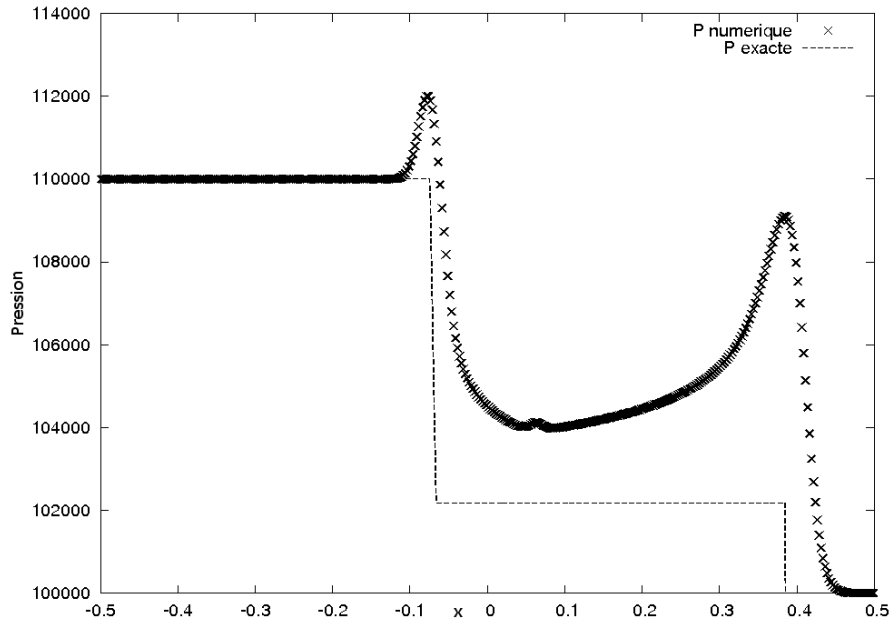


FIG. 2.3.1 – Résolution eulérienne du problème de Riemann pour les conditions initiales données en table 2.1 : évolution de la pression en fonction du temps. La courbe en pointillés correspond à la solution exacte. La courbe de croix est obtenue par un schéma de Godunov conservatif.

Nous établirons la condition de stabilité lagrangienne au paragraphe suivant. Supposons connue une approximation W^n de W au temps t^n en $x \in C_i^n$:

$$W(t^n, x) \simeq W_i^n. \quad (2.57)$$

On calcule la solution exacte du problème suivant :

$$\begin{cases} \partial_t U + \partial_x f(U) = 0 \\ U(0, x) = W^n(x), \quad x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.58)$$

en tenant compte de la vitesse du fluide aux arêtes. L'intégration du système (2.30) sur le trapèze espace-temps $\left] x_{i-\frac{1}{2}}^n, x_{i+\frac{1}{2}}^n \right[\times] t_n, t_{n+1} [$ donne :

$$\begin{aligned} 0 &= h_i^{n+1} W_i^{n+1} - h_i^n W_i^n \\ &+ \tau_n \left(f \left(\mathcal{R} \left(v_{i+\frac{1}{2}}^n, W_i^n, W_{i+1}^n \right) \right) - v_{i+\frac{1}{2}}^n \mathcal{R} \left(v_{i+\frac{1}{2}}^n, W_i^n, W_{i+1}^n \right) \right) \\ &- \tau_n \left(f \left(\mathcal{R} \left(v_{i-\frac{1}{2}}^n, W_{i-1}^n, W_i^n \right) \right) - v_{i-\frac{1}{2}}^n \mathcal{R} \left(v_{i-\frac{1}{2}}^n, W_{i-1}^n, W_i^n \right) \right). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Si la vitesse de l'interface $v_{i+\frac{1}{2}}^n$ est nulle, le schéma revient au schéma de Godunov eulérien. Si la vitesse $v_{i+\frac{1}{2}}^n$ est égale à la vitesse de la discontinuité de contact du problème de Riemann entre les cellules C_i^n et C_{i+1}^n , alors le contact est parfaitement résolu (pour le système unidimensionnel $d = 1$). Une dernière étape peut consister à projeter les nouvelles variables conservatives sur le maillage initial, on obtient alors un schéma de type Lagrange-projection [KL10].

La topologie de l'interface et son traitement constituent la difficulté majeure des méthodes lagrangiennes. En cas de fortes déformations, les volumes de contrôle peuvent devenir extrêmement petits (c'est d'ailleurs le cas en géométrie axisymétrique, au voisinage de l'axe de rotation). De ce fait, les conditions de stabilité deviennent très contraignantes. Cependant à quantité de mailles égale, ces méthodes sont plus précises que les approches eulériennes.

2.3.3 Étape Arbitrary Lagrangian Eulerian

La simulation numérique d'un écoulement diphasique en géométrie axisymétrique présente certaines difficultés, qui déterminent le type de schéma à utiliser. Puisque la bulle de cavitation présente un mouvement de « rebond », le suivi d'interface semble être approprié. Mais lorsque la bulle devient très petite, les volumes de contrôle deviennent également très petits, ce qui rend la condition CFL fortement contraignante : un schéma lagrangien n'est pas adapté. Réciproquement la résolution de l'interface par une approche eulérienne n'est pas suffisamment précise. Une approche hybride Arbitrary Lagrangian Eulerian semble plus adéquate : en-dehors de l'interface, on utilise un schéma conservatif eulérien, tandis qu'une approche lagrangienne est appliquée à l'interface.

On se place en géométrie axisymétrique. Le domaine Ω est divisé en N volumes de contrôle C_i^n , de centre de gravité r_i , susceptibles de se déplacer à la vitesse du fluide entre les temps t^n et t^{n+1} :

$$C_i^n =]r_{i-\frac{1}{2}}^n, r_{i+\frac{1}{2}}^n[.$$

On impose que le côté gauche $r_{-\frac{1}{2}}^n$ de la cellule C_0^n est fixe. À $t = 0$ on suppose que l'interface liquide-gaz coïncide avec une interface de cellule du maillage. On note $\tau^n = t^{n+1} - t^n$ le pas de temps. Entre les temps t^{n+1} et t^n , les côtés d'une cellule C_i^n se déplacent à la vitesse relative $v_{i+\frac{1}{2}}^n$:

$$r_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = r_{i+\frac{1}{2}}^n + v_{i+\frac{1}{2}}^n \tau^n. \quad (2.60)$$

Si $v_{i+\frac{1}{2}}^n = 0$, le maillage reste fixe, on retrouve la formulation eulérienne. Si $v_{i+\frac{1}{2}}^n = u_{i+\frac{1}{2}}^n$, la vitesse ALE correspond à la vitesse lagrangienne. Comme dans le cadre lagrangien, les volumes, centres de gravité et surfaces évoluent en fonction du temps et sont définis par :

$$V_i^n = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}^n}^{r_{i+\frac{1}{2}}^n} r^{d-1} dr, \quad (2.61)$$

$$r_i^n = \frac{1}{V_i^n} \int_{r_{i-\frac{1}{2}}^n}^{r_{i+\frac{1}{2}}^n} r^d dr, \quad (2.62)$$

$$S_{i+\frac{1}{2}}^n = \left(r_{i+\frac{1}{2}}^n \right)^{d-1}. \quad (2.63)$$

On considère le système (2.29) muni de la loi de pression (2.26), soit :

$$\partial_t (r^{d-1}W) + \partial_r (r^{d-1}f(W)) = g(W), \quad (2.64)$$

$$\text{où } W = \begin{pmatrix} \varphi\rho \\ (1-\varphi)\rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}, f(W) = \begin{pmatrix} \varphi\rho u \\ (1-\varphi)\rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix} \text{ et } g(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ (d-1)pr^{d-2} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Supposons qu'au temps t^n on connaisse une approximation W^n de la solution exacte W . L'approximation est constante sur chaque cellule :

$$W(t^n, r) \simeq W^n(r) = W_i^n, \quad r \in C_i^n.$$

La formulation volume fini s'obtient en intégrant le système de lois de conservation sur le rectangle espace-temps :

$$Q =]r_{i-\frac{1}{2}}^n, r_{i+\frac{1}{2}}^n[\times]t_n, t_{n+1}[.$$

L'intégrale sur le bord revient à la somme suivante :

$$\begin{aligned} & \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} W(r, t^{n+1}) dr + \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} W(r, t^n) dr \\ & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(W(r_{i+\frac{1}{2}}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(W(r_{i-\frac{1}{2}}, t)) dt \\ & = \int_{t^n}^{t^{n+1}} g(W(r_{i-\frac{1}{2}}, t)) dt. \end{aligned}$$

En notant

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(W(r_{i+\frac{1}{2}}, t)) dt,$$

l'approximation des flux sortant de la cellule C_i^n et G_i^n l'approximation du terme source, on obtient la formulation suivante :

$$V_i^{n+1}W_i^{n+1} - V_i^nW_i^n + \tau^n \left(S_{i+\frac{1}{2}}^n F_{i+\frac{1}{2}}^n - S_{i-\frac{1}{2}}^n F_{i-\frac{1}{2}}^n \right) = \tau^n G_i^n. \quad (2.65)$$

On choisit d'évaluer les flux numériques par un schéma de Godunov. A chaque arête, le flux est donné par la résolution du problème de Riemann cartésien :

$$\begin{cases} W_t + f(W_x) = 0, \\ W(0, t) = \begin{cases} W_L & \text{si } x < 0, \\ W_R & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (2.66)$$

D'après la proposition 2.2.7, le problème admet toujours une solution globale dans notre cas :

$$\mathcal{R}(x/t, W_L, W_R) = W(x, t).$$

Dans le schéma de Godunov standard, la résolution se fait en $x/t = 0$. Dans notre cas, il faut tenir compte de la vitesse des arêtes. On désigne par

$$W_{i+\frac{1}{2}}^n = \mathcal{R}(v_{i+\frac{1}{2}}^n, W_i^n, W_{i+1}^n)$$

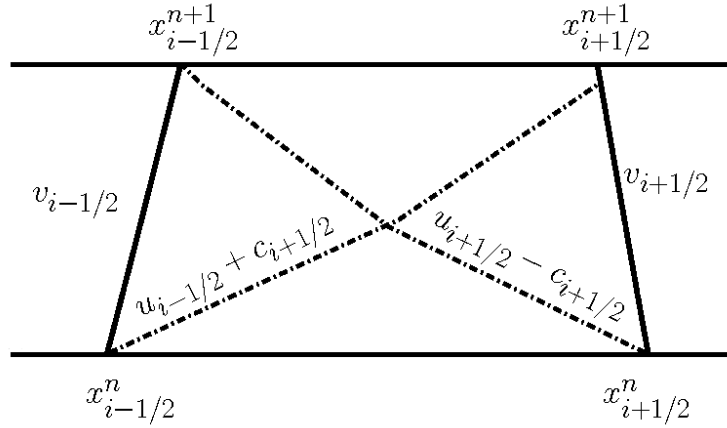


FIG. 2.3.2 – Condition de CFL lagrangienne.

la solution du problème de Riemann sur l'arête $i + \frac{1}{2}$. Le flux ALE est alors donné par :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = f(W_{i+\frac{1}{2}}^n) - v_{i+\frac{1}{2}}^n W_{i+\frac{1}{2}}^n. \quad (2.67)$$

Il reste à expliciter l'approximation du terme source :

$$\int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} (d-1)pr^{d-2} dr. \quad (2.68)$$

En observant que :

$$(d-1)pr^{d-2} = (r^{d-1}p)' - r^{d-1}p'(r), \quad (2.69)$$

on obtient donc une approximation du premier ordre :

$$G_i^n = p_i^n (S_{i+\frac{1}{2}}^n - S_{i-\frac{1}{2}}^n). \quad (2.70)$$

Le schéma ainsi construit vérifie

Proposition 2.3.1. *Si la vitesse de l'interface est la vitesse lagrangienne, i.e. $v_{k+\frac{1}{2}}^n = u_{k+\frac{1}{2}}^n$ tel que $\varphi_k^n \neq \varphi_{k+1}^n$ le schéma a de bonnes propriétés :*

- Les discontinuités de contact pures instationnaires sont préservées pour $d = 1$.
- L'interface est « parfaitement » résolue : $\forall i, \varphi_i^n(1 - \varphi_i^n) = 0$.

Cette dernière propriété assure notamment qu'il n'y a pas de transfert de masse entre les deux phases.

Condition de stabilité

On établit maintenant une condition de stabilité approximative de l'étape ALE. Pour ce faire, considérons d'abord une cellule C_i^n d'un maillage lagrangien, dont les interfaces se déplacent aux vitesses $v_{i\pm 1/2}$ (voir figure 2.3.2). Le pas de temps

doit assurer que les points $x_{i\pm 1/2}$ restent ordonnés au cours du temps, *i.e.* que les volumes V_i restent positifs pour $i = 0, \dots, n$, et que les ondes, se propageant aux vitesses $u_{i\pm 1/2} \pm c_{i\pm 1/2}$, n'atteignent pas les bords de la cellule C_i^{n+1} . Les positions d'interface vérifient :

$$\begin{aligned} x_{i-1/2}^{n+1} &= x_{i-1/2}^n + \tau^n \max(u_{i-1/2} + c_{i-1/2}, v_{i-1/2}), \\ x_{i+1/2}^{n+1} &= x_{i+1/2}^n + \tau^n \min(u_{i+1/2} - c_{i+1/2}, v_{i+1/2}), \end{aligned}$$

ce qui revient à :

$$\begin{aligned} x_{i-1/2}^n + \tau^n \max(u_{i-1/2} + c_{i-1/2}, v_{i-1/2}) < \\ x_{i+1/2}^n + \tau^n \min(u_{i+1/2} - c_{i+1/2}, v_{i+1/2}). \end{aligned} \quad (2.71)$$

On se place maintenant à l'intérieur de la maille C_i et on s'affranchit des indices $i \pm 1/2$ (répétons que nous allons calculer une approximation de la condition CFL exacte). Les ondes réfléchies après intersection doivent être confinées dans la cellule C_i , ce que l'on traduit par :

$$\min(u_i - c_i, v_{i+1/2})\tau^n + x_{i+1/2} > x_{i-1/2} + v_{i-1/2}\tau^n, \quad (2.72)$$

$$\max(u_i + c_i, v_{i-1/2})\tau^n + x_{i-1/2} < x_{i+1/2} + v_{i+1/2}\tau^n. \quad (2.73)$$

Plaçons nous maintenant dans le cadre ALE et supposons que seule l'interface liquide-gaz en $i + 1/2$ se déplace vers la gauche à la vitesse $u_{i+1/2} < 0$. Les autres interfaces étant fixes, on a $v_{i-1/2} = 0$. La relation (2.72) implique

$$(u_i - c_i)\tau^n + x_{i+1/2} > x_{i-1/2},$$

soit

$$\tau^n < \frac{h_i^n}{c_i + |u_i|}. \quad (2.74)$$

En résumé les vitesses aux interfaces des cellules de contrôle au temps t^n vérifient :

$$v_{i+\frac{1}{2}}^n = 0, \quad \text{en dehors de l'interface, i.e. pour } \varphi_i^n = \varphi_{i+1}^n, \quad (2.75)$$

$$v_{i+\frac{1}{2}}^n = u_{i+\frac{1}{2}}^n, \quad \text{à l'interface, i.e. pour } \varphi_i^n \neq \varphi_{i+1}^n. \quad (2.76)$$

La condition de stabilité de l'étape ALE que nous utilisons est :

$$\tau^n \leq \max_i \frac{h_i^n}{c_i + |u_i|}. \quad (2.77)$$

On constate que la condition CFL du schéma ALE est similaire à celle utilisée dans la méthode eulérienne.

Remarque 2.3.2. Lorsque les deux arêtes du maillage se déplacent (c'est-à-dire dans une configuration lagrangienne), il faut considérer deux cas pour expliciter (2.73). Si l'interface est subsonique, on a :

$$(u_i + c_i)\tau^n + x_{i-1/2} < x_{i+1/2} + u_i\tau^n,$$

ce qui revient à

$$\tau^n < \frac{h_i^n}{c_i}. \quad (2.78)$$

Si l'interface est supersonique, la relation (2.73) correspond à

$$x_{i-1/2} < x_{i+1/2} + u_i \tau^n,$$

soit

$$\tau^n < \frac{h_i^n}{u_i}. \quad (2.79)$$

2.3.4 Étape de projection

A la fin de l'étape ALE, on suppose que l'interface coïncide avec une arête $r_{i+1/2}^n$ du maillage, c'est-à-dire que $\varphi_i = 0$ et $\varphi_{i+1} = 1$. Pour fixer les idées, supposons que la pression soit plus importante dans le liquide que dans la bulle. Le rayon de la bulle est dans une phase décroissante. L'interface liquide-gaz se déplace donc de la droite vers la gauche (voir les figures 2.3.3 à 2.3.5) et le volume de la cellule C_i diminue. Sous contrainte de la condition CFL (2.77), le calcul ne pourra pas se poursuivre si le volume de contrôle C_i disparaît. Or la situation est fréquente lorsque le rayon de la bulle diminue. De même, lorsque la bulle se dilate, la cellule C_{i+1} tend à disparaître. Afin de pouvoir continuer le calcul au delà du pas de temps imposé par la condition de CFL, on adapte un procédé développé dans [Nus07] et [GHHN08]. L'idée est de fusionner les cellules C_{i-1} et C_i à la gauche de l'interface et de calculer le bilan des flux sur cette grande cellule. Cela revient à faire la moyenne des variables W sur ces deux cellules à la fin du pas de temps. De cette manière, on assure que l'interface est parfaitement résolue :

$$\forall i, \varphi_i^n (1 - \varphi_i^n) = 0.$$

Le pas de temps est ensuite calculé sur l'ensemble des cellules hormis C_i d'après la formule (2.77) :

$$\tau^n \leq \max_{j \neq i} \frac{h_j^n}{c_j + |u_j|}.$$

Il faut également s'assurer que la grande cellule ne disparaisse pas lors de l'implosion de la bulle. On fait en sorte que seule la cellule C_i soit éliminée. On désigne par \tilde{t}_n le temps auquel la cellule C_i disparaît :

$$\tilde{t}_n = \frac{r_{i+1/2}^n - r_{i-1/2}^n}{|v_{i+1/2}^n - v_{i-1/2}^n|}. \quad (2.80)$$

On observe que ce temps peut être éventuellement infini. Puisque la cellule C_i disparaît, on divise la cellule C_{i+1} en deux de manière à conserver N mailles (voir la figure 2.3.5). Enfin on fixe le pas de temps selon la relation :

$$\tau^n = \min(\tilde{t}_n, \tau^n). \quad (2.81)$$

Ce choix du pas de temps implique que la cellule C_i disparaît et la cellule C_{i+1} est découpée seulement lorsque $\tau^n = \tilde{t}_n$. L'algorithme de disparition-découpage

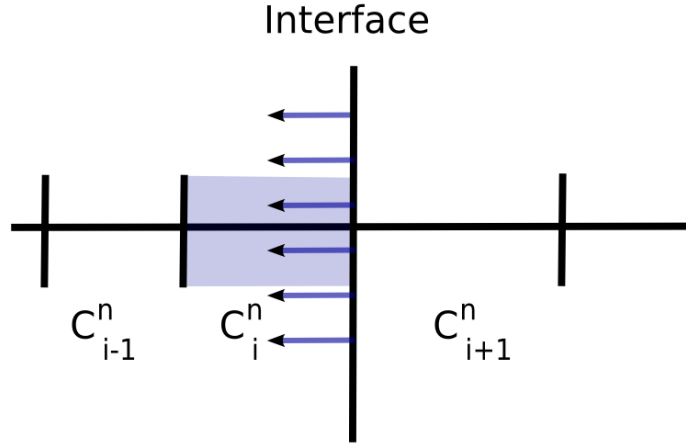


FIG. 2.3.3 – L’interface se déplace de la gauche vers la droite. La cellule C_i^n tend à disparaître.

et d’ajustement du pas de temps a lieu environ tout les c/u pas de temps, ce qui n’est pas trop pénalisant pour le pas de temps lorsque $c \gg u$. Notons que cette approche est théoriquement généralisable aux dimensions supérieures et pour des maillages quelconques. L’implémentation serait cependant relativement compliquée. Il y aurait aussi un risque que le pas de temps global soit ajusté plus souvent, ce qui serait pénalisant pour le temps de calcul. Il faudrait donc augmenter la méthode par une technique de pas de temps local. La complexité est sans doute trop importante...

2.3.5 Extension à l’ordre 2

Dans la perspective d’améliorer la précision du schéma, une approche MUSCL a été envisagée. On reprend ici la description faite par Harten dans [HLVL83] ; le lecteur pourra se référer aux ouvrages [LeV92], [GR96] ou [Tor99]. Si $d = 1$, au pas de temps $n + 1$, la solution numérique dans chaque cellule est la valeur moyenne de la solution exacte du problème d’évolution, initialisé par la solution constante par morceaux du pas de temps précédent. Au moyen d’un développement de Taylor, on reconstruit la solution exacte à n’importe quel ordre à partir des valeurs moyennes. En dimension 1 d’espace, l’approximation est affine :

$$W(t_n, x) \simeq W^n(x) = W_i^n + s_i^n(x - x_i), \quad x \in C_i. \quad (2.82)$$

La valeur W_i^{n+1} est obtenue par le schéma volumes finis (2.65) mais en utilisant les pentes s_i^n pour calculer les valeurs aux interfaces :

$$f_n^{i+\frac{1}{2}} = f \left(\mathcal{R} \left(0, W_i^n + \frac{h_i}{2} s_i^n, W_{i+1}^n - \frac{h_{i+1}}{2} s_{i+1}^n \right) \right). \quad (2.83)$$

Pour déterminer la pente s_i^n dans la cellule C_i , on utilise les valeurs moyennes W_{i-1}^n , W_i^n et W_{i+1}^n . On note a la pente décentrée à gauche, b la pente centrée et

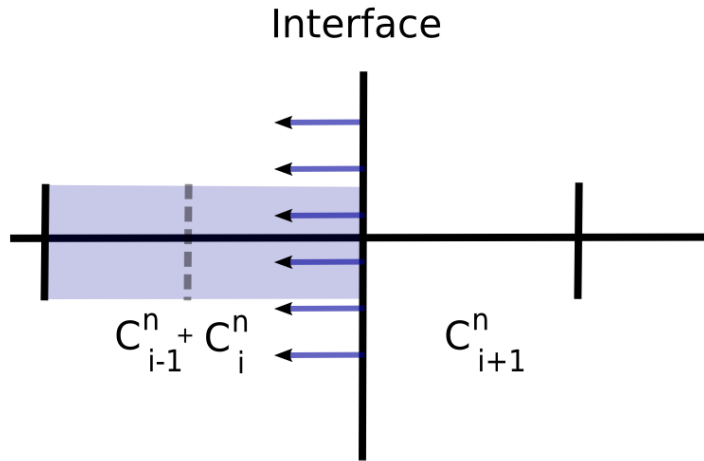


FIG. 2.3.4 – Les cellules C_{i-1}^n et C_i^n sont fusionnées. Le bilan des flux est calculé sur la cellule $C_{i-1}^n + C_i^n$.

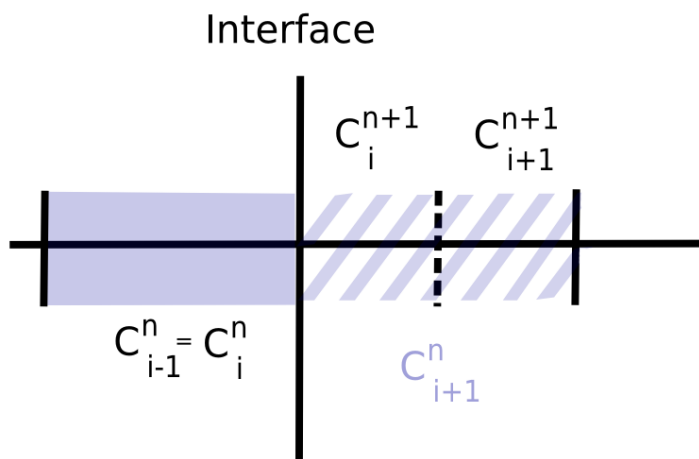


FIG. 2.3.5 – Pour retrouver le nombre de mailles initial, la cellule C_{i+1}^n est divisée, à la fin de certains pas de temps, en deux cellules C_i^{n+1} et C_{i+1}^{n+1} .

c la pente décentrée à droite telles que :

$$a = 2 \frac{W_i^n - W_{i-1}^n}{h_i + h_{i-1}}, \quad (2.84)$$

$$b = 2 \frac{W_{i+1}^n - W_{i-1}^n}{h_{i-1} + 2h_i + h_{i+1}}, \quad (2.85)$$

$$c = 2 \frac{W_{i+1}^n - W_i^n}{h_{i+1} + h_i}. \quad (2.86)$$

De manière à avoir un schéma d'ordre 2 à variation totale décroissante, il faut choisir un calcul non linéaire de s_i^n [vL79]. On rappelle la définition du limiteur \minmod .

Définition 2.3.3. *soit $E \in \mathbf{R}$ un ensemble non vide. On introduit*

$$\minmod(E) = \begin{cases} \inf E & \text{si } E \in \mathbf{R}^+, \\ \sup E & \text{si } E \in \mathbf{R}^-, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.87)$$

En prenant $s_i^n = \minmod(\{a, b, c\})$, on assure que le schéma d'ordre 2 en espace est TVD (pour une équation scalaire). Pour obtenir un schéma d'ordre 2 en temps, il est possible d'utiliser une méthode d'intégration du type Runge-Kutta d'ordre 2 ou Euler amélioré. Mais l'approximation au temps $n + \frac{1}{2}$ ne garantit plus $\varphi = 0$ ou 1 et engendre de la diffusion numérique sur la quantité φ : l'interface est mal résolue. On se limite donc à une extension au second ordre en espace. Le schéma d'ordre 2 est donc linéairement instable et nous contraint à utiliser de petites conditions CFL.

2.4 Résultats numériques

Ce dernier paragraphe est consacré à l'étude numérique du schéma. On s'intéresse tout d'abord à la validation de cette méthode sur un cas test unidimensionnel. Le schéma est ensuite appliqué à la simulation d'écoulements liquide-gaz en géométrie sphérique. On propose deux tests différant par la valeur du rayon initial de la bulle de gaz. On compare différentes discrétisations et les versions du schéma numérique d'ordre 1 et 2 en espace. Tous les calculs sont effectués sous la condition de stabilité (2.77).

2.4.1 Test de validation pour $d = 1$

A titre de validation, on propose un test monodimensionnel dont les données initiales sont données en table 2.2. Le domaine $[0, 4R_b]$ est discrétisé en 500 cellules avec $R_b = 0.7469 \times 10^{-4}$ m. Le temps final est $t = 10^{-7}$ s et $CFL = 0.8$. Les résultats numériques des figures 2.5.1, 2.5.2 et 2.5.3 concernent la masse volumique, la vitesse et la pression (les solutions sont présentées constantes par mailles, ce qui explique le profil « en escalier »). On observe une bonne adéquation entre la solution exacte et la solution numérique, étant donnée la finesse du maillage, mais surtout l'absence des perturbations sur la pression que l'on obtiendrait avec un schéma de Godunov classique.

État gauche W_L	État droit W_R
$u_L = 0 \text{ m.s}^{-1}$	$u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$
$p_l = 72567.68 \text{ Pa}$	$p_R = 10^5 \text{ Pa}$
$\rho_L = 0.92 \text{ kg.m}^{-3}$	$\rho_R = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$
$\varphi_L = 0$	$\varphi_R = 1$

TAB. 2.2 – Données initiales pour le test 1D (correspondant aux figures 2.5.1 à 2.5.3) et le cas d’une bulle faiblement comprimée (correspondant à la figure 2.5.4).

2.4.2 Bulle faiblement comprimée

On s’intéresse aux oscillations d’une bulle sphérique initialement faiblement dilatée. Les résultats numériques sont comparés au modèle de Keller-Miksis présenté au paragraphe 2.1. Les calculs sont effectués sur le domaine $\Omega = [0, AR_b]$, avec $A = 20$, dans la direction radiale. On rappelle que le rayon d’équilibre est $R_{eq} = 0.692 \times 10^{-4} \text{ m}$. En choisissant un rayon maximal $R_{\max} = 0.7469 \times 10^{-4} \text{ m}$, on s’assure que les oscillations sont de faible amplitude. La vitesse du son vérifiant la condition :

$$c = \sqrt{\gamma(\varphi) \frac{p + \pi(\varphi)}{\rho}}, \quad (2.32)$$

on en déduit que

$$\pi_{liq} = \frac{c_{liq,0}^2 - \rho_{liq,0}}{\gamma_{liq}} - p_{liq,0}. \quad (2.88)$$

On suppose donc que $p_{liq,0} \ll \pi_{liq}$. Les paramètres de référence sont : $\gamma_{vap} = 1,4$, $\gamma_{liq} = 3$, $p_{liq,0} = 10^5 \text{ Pa}$, $\rho_{liq,0} = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$. Pour diminuer la viscosité numérique du schéma, on se donne une vitesse du son plus faible que la vitesse du son physique dans le liquide $c_{liq,0} = 50 \text{ m.s}^{-1}$, soit $\pi_{liq} \simeq 833333,33 \text{ Pa}$. Les données initiales figurent dans le tableau 2.2.

Le temps de calcul est limité par le temps nécessaire à une onde pour aller de l’interface au mur et revenir. Le maillage choisi est non uniforme de façon à ce que les cellules de l’origine soient 9 fois plus petites que celles de droite. La figure 2.5.4 présente les résultats obtenus pour différents maillages et différents ordres. Les courbes présentent un « retard » au rebond. Le schéma d’ordre 2 sur une grille de 200 cellules réalise des oscillations d’amplitude comparable au modèle de Keller-Miksis. Rappelons que le modèle de Keller-Miksis est une approximation de l’écoulement réel. Il doit être considéré comme une solution de référence mais non comme la solution exacte...

2.4.3 Bulle fortement comprimée : cas raide

Comme précédemment le domaine considéré est $\Omega = [0, AR_b]$ avec cette fois $R_b = 0.7469 \times 10^{-3} \text{ m}$. Le rayon maximal étant dix fois supérieur au rayon d’équilibre, la compression de la bulle est nettement plus brutale que précédemment. De plus, on fixe la vitesse du son dans le liquide à $c_0 = 1500 \text{ m.s}^{-1}$ (les autres valeurs de référence sont identiques au cas précédent). En imposant $\gamma_2 = 1.1$ selon

État gauche W_L	État droit W_R
$u_L = 0 \text{ m.s}^{-1}$	$u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$
$p_l = 4.5787 \text{ Pa}$	$p_R = 10^5 \text{ Pa}$
$\rho_L = 0.000925 \text{ kg.m}^{-3}$	$\rho_R = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$
$\varphi_L = 0$	$\varphi_R = 1$

TAB. 2.3 – Données initiales du cas d’une bulle fortement comprimée (correspondant à la figure 2.5.8).

la formule (2.88), on a $\pi_2 = 2045454545,454 \text{ Pa}$. Il est courant dans la littérature de voir des valeurs d’exposants polytropiques plus élevées pour l’eau (voir par exemple [CS97]). Pour que les variations de la vitesse du son soient de faible amplitude, il faut que l’intervalle de pression soit grand, soit $p_{liq,0} \ll \pi_{liq}$. Or la formule (2.88) implique que plus γ_2 est petit plus π_{liq} plus grand. Avec ce choix, on assure ainsi que la vitesse du son dans le liquide varie peu. Les conditions initiales sont consignées dans le tableau 2.3. La figure 2.5.8 représente l’évolution du rayon de la bulle sur différents maillages pour le schéma d’ordre 1 ou 2. On constate qu’il est nécessaire de considérer un maillage très fin pour obtenir des résultats satisfaisants, contrairement à l’exemple de la bulle faiblement comprimée. Le schéma d’ordre 2 présente des oscillations, puisqu’il n’est d’ordre 2 qu’en espace. Ceci est bien en accord avec conclusion du paragraphe 2.3.5. Le calcul d’ordre 2 avec 3000 cellules présente la meilleure adéquation avec la courbe obtenue par le modèle Keller-Miksis. Cependant le calcul est abandonné pour des questions de stabilité. Le schéma d’ordre 1 à 10 000 mailles produit un léger retard au rebond, mais la première oscillation donne une bonne approximation de la décroissance du rayon de la bulle. Les autres rebonds sont cependant trop amortis. Le schéma reste coûteux en terme de temps de calcul : le plus long calcul, correspondant aux 10 000 cellules, a duré environ trente heures sur un ordinateur de bureau.

Nous présentons également les tracés de pression, de vitesse et de masse volumique (voir figures 2.5.5 à 2.5.7). On constate qu’un saut de pression apparaît à l’interface à $10 \mu\text{s}$. Ce phénomène n’est pas expliqué. Il peut s’agir d’une prise en compte imprécise du terme source.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à la modélisation d’une bulle sphérique de gaz plongée dans un liquide. Le modèle mathématique proposé repose sur les équations d’Euler, considérées en coordonnées sphériques. De manière à décrire de façon fidèle les phénomènes thermodynamiques, les lois des gaz parfaits et raides sont choisies pour représenter les phases gazeuse et liquide respectivement. De façon classique, on a introduit une variable de couleur φ pour indiquer la phase liquide, de sorte que l’évolution de l’interface liquide-gaz est décrite par une équation de transport sur φ .

Pour éviter les oscillations de pression qui interviennent aux interfaces des écoulements diphasiques traités de manière eulérienne, on a choisi d’adapter un schéma *Arbitrary Lagrangian Eulerian*. En dehors de l’interface, le système est

résolu de manière conservative par une approche eulérienne. L'interface, qui coïncide avec une arête du maillage, est traitée de façon lagrangienne et évolue avec l'écoulement.

L'originalité de notre schéma réside dans l'étape de projection. Lorsque la bulle de gaz est comprimée, le volume de contrôle vers lequel se dirige l'interface est fortement comprimé et tend à disparaître. Pour pallier le problème, nous proposons de fusionner les deux cellules adjacentes à l'interface. De cette manière, les volumes des cellules restent minorés. Les flux numériques sont calculés sur la cellule fusionnée, ce qui revient à effectuer la moyenne des variables conservatives sur les deux cellules fusionnées à la fin du pas de temps. À intervalles réguliers, on applique un algorithme de suppression-découpage. Cette étape n'est pas systématique et n'est effectuée que lorsque le volume de la cellule comprimée s'annule. Le pas de temps est calculé selon une formulation eulérienne classique, mais ne tient pas compte de la maille fusionnée. Pour que la projection soit exacte sur la fraction de masse, le pas de temps est ensuite adapté si besoin.

L'extension à l'ordre 2 en espace par une méthode MUSCL est également présentée. L'extension à l'ordre 2 en temps n'est par contre pas envisagée. L'évaluation des variables au temps intermédiaire implique une diffusion sur la quantité φ . De ce fait une extension d'ordre en temps induirait de la diffusion au niveau de l'interface et du transfert de masse.

Ainsi construit, notre schéma résout parfaitement l'interface et préserve les états de pression et vitesse constantes en une dimension.

Différents résultats numériques ont été proposés pour valider notre schéma. Il est manifeste que le schéma est plus adapté à la modélisation de bulle de gaz faiblement comprimée dans le liquide. L'amplitude des oscillations du rayon de la bulle est du même ordre que celle obtenue avec le modèle de Keller-Miksis. Le cas d'une bulle fortement comprimée nécessite plus de précision. Ce qui nous amène à étudier actuellement d'autres pistes de travail.

La méthode *Real Ghost-Fluid* donne des résultats très satisfaisants pour le test d'une bulle fortement comprimée. Citons par exemple les travaux de Müller *et al.* [MBK⁺09]. Il s'agit cependant d'une approche multirésolution, très complexe à mettre en œuvre. Puisque l'on souhaite conserver une méthode simple, on s'intéressera plutôt à une technique d'échantillonnage de type Glimm [GMM81] [Tor99]. La stratégie assure les mêmes propriétés que la mise à jour lagrangienne (en particulier les états de pression et vitesse constantes sont préservés en dimension 1). L'interface est avancée statistiquement à la bonne vitesse. Aucune étape de remaillage ni d'adaptation du pas de temps n'est nécessaire. Cette méthode est de plus bien adaptée à l'implémentation sur carte graphique (GPU) ce qui permettrait d'accélérer considérablement les calculs.

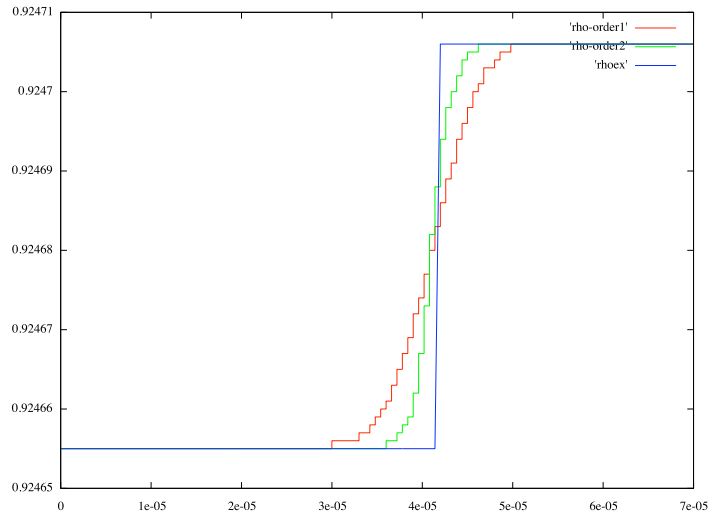


FIG. 2.5.1 – Test de validation pour $d = 1$: profil de masse volumique sur le domaine $[0, AR_b]$ à $t = 10^{-7}$ s.

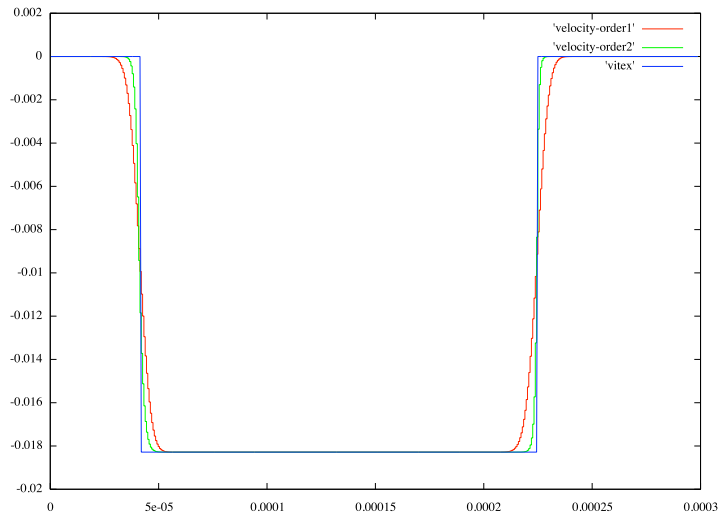


FIG. 2.5.2 – Test de validation pour $d = 1$: profil de vitesse sur le domaine $[0, AR_b]$ à $t = 10^{-7}$ s.

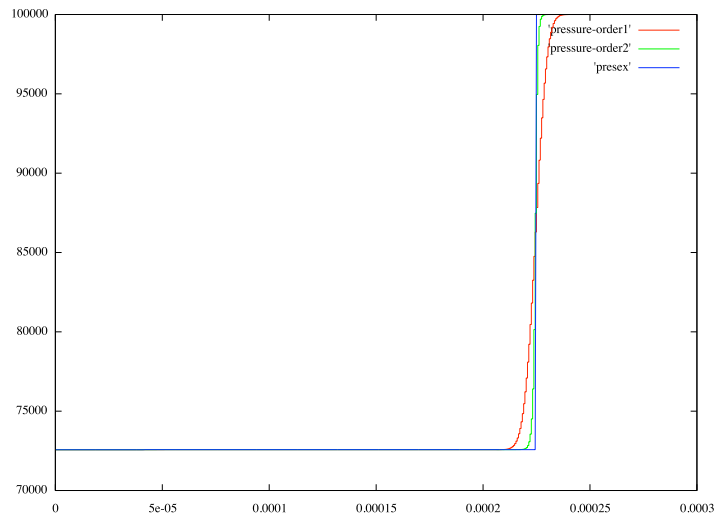


FIG. 2.5.3 – Test de validation pour $d = 1$: profil de pression sur le domaine $[0, AR_b]$ à $t = 10^{-7}$ s.

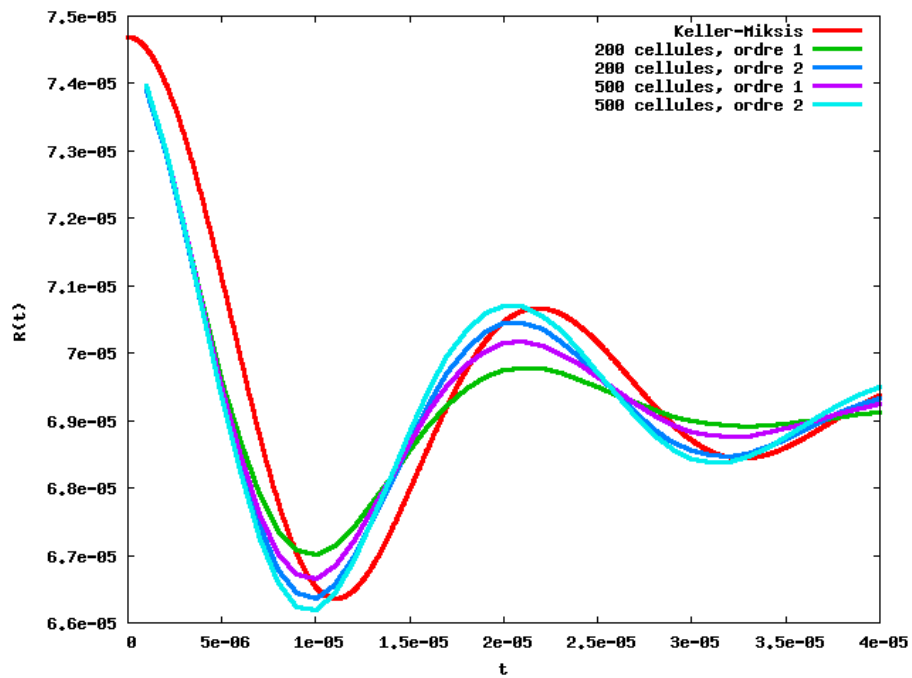


FIG. 2.5.4 – Cas test d'une bulle faiblement comprimée : évolution du rayon de la bulle en fonction du temps.

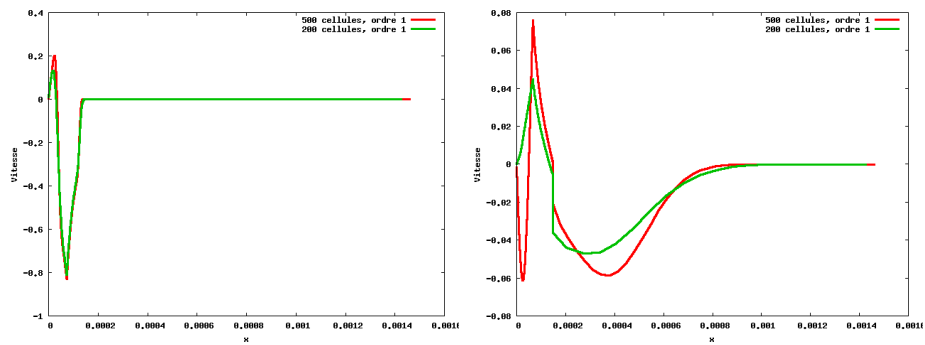


FIG. 2.5.5 – Vitesse à $1 \mu s$ et $10 \mu s$.

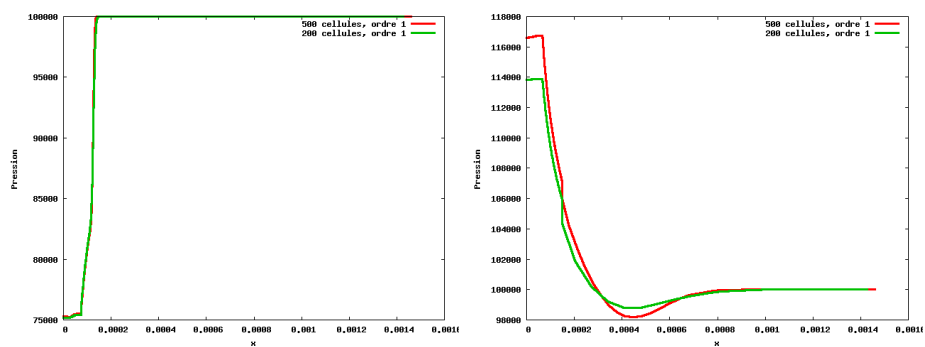


FIG. 2.5.6 – Pression à $1 \mu s$ et $10 \mu s$.

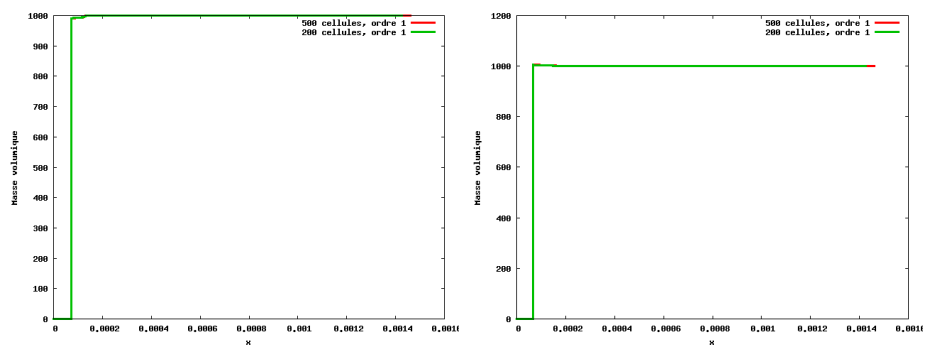


FIG. 2.5.7 – Masse volumique à $1 \mu s$ et $10 \mu s$.

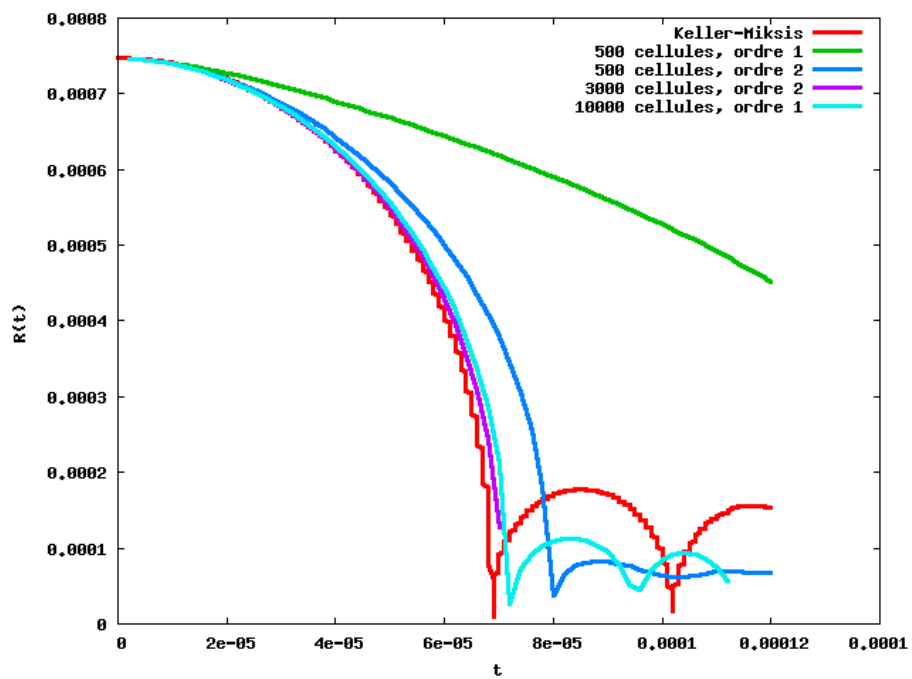


FIG. 2.5.8 – Cas test d'une bulle fortement comprimée : évolution du rayon de la bulle en fonction du temps.

SCHEMA ÉQUILIBRE POUR LA SIMULATION D'UNE BULLE MONOPHASIQUE

Le passage aux coordonnées sphériques introduit un terme source géométrique dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement des équations d'Euler. Le système est alors équivalent à un modèle d'écoulement dans une tuyère de section variable. En effet, posant $A(r) = r^{d-1}$ la section de la tuyère, le système introduit précédemment devient :

$$\partial_t(\rho A) + \partial_r(\rho A u) = 0, \quad (3.1)$$

$$\partial_t(\rho A u) + \partial_r(A(\rho u^2 + p)) = p \partial_r A, \quad (3.2)$$

$$\partial_t(A \rho E) + \partial_r(A u(\rho E + p)) = 0, \quad (3.3)$$

$$\partial_t(\rho A \varphi) + \partial_r(\rho A \varphi u) = 0. \quad (3.4)$$

A noter que ce modèle convient également aux écoulements en milieux poreux, A désignant alors le coefficient de porosité du domaine. La prise en compte numérique du terme au second membre de l'équation (3.2) peut être délicate (mauvaise approximation des états stationnaires, par exemple). Pour traiter les variations de section, on adopte la technique introduite dans [GLBN97]. On considère la section A comme une inconnue artificielle et on ajoute au système (3.1) l'équation évidente :

$$\partial_t A = 0. \quad (3.5)$$

Alors le système d'équations s'écrit comme un système hyperbolique sous forme non conservative, mais il ne contient plus de terme source. Nous verrons que l'introduction de cette nouvelle inconnue introduit dans le système une nouvelle onde stationnaire et linéairement dégénérée. Malheureusement, le système est dans certains cas résonant : lorsque les valeurs propres $u \pm c$ s'annulent, les ondes vraiment non linéaires et linéairement dégénérées se superposent et la matrice jacobienne du flux n'est alors plus diagonalisable. Les systèmes résonants (voir définition 2.2.3) ont fait l'objet de nombreuses études dont [GMP84] et [Liu87], le cas non-conservatif étant développé dans [LG04]. Dans cette configuration les schémas

numériques peuvent converger vers de mauvaises solutions. Dans [GLBN97] et [CLS04], les auteurs proposent un schéma équilibre pour traiter un système de lois de conservation avec terme source. Ils utilisent un solveur de type Godunov, basé sur la résolution exacte du problème de Riemann avec termes sources. Ce solveur peut s'avérer complexe et extrêmement coûteux en terme de temps de calcul. S'appuyant sur ce schéma, diverses approches ont été développées récemment, notamment dans [KT05] et [AW04], pour traiter les écoulements compressibles en tuyère. Le solveur exact est remplacé par un solveur de Rusanov. On choisit ici d'utiliser le solveur de Riemann approché de type VFRoe-ncv [BGH00], en privilégiant un jeu particulier de variables primitives. Ce solveur a déjà été étudié dans le cas d'autres lois de conservation avec termes sources, les équations de Saint-Venant (on pourra consulter [GHS03b] et [CLS04]). Facile d'implémentation, ce schéma s'avère très précis et fiable mais nécessite une correction entropique. On propose un jeu de variables primitives garantissant le bon comportement du schéma pour préserver les états équilibre, ce qui semble indispensable pour assurer la convergence vers les bonnes solutions du système [GH10b]. On choisit de prendre comme variables primitives les invariants de Riemann associés à l'onde stationnaire. De cette manière, nous verrons que les ondes stationnaires seront parfaitement préservées. Quelques expériences numériques viennent confirmer la validité de cette approche.

3.1 Modèle mathématique et propriétés

On se restreint à l'étude monodimensionnelle du problème. On désigne par $A(r) > 0$ le profil de la section. Dans le cadre d'écoulements à symétrie cylindrique (resp. sphérique), on a $A(r) = 2\pi r$ (resp. $A(r) = 4\pi r^2$). La section ne varie pas en fonction du temps. Comme précédemment le fluide est caractérisé par sa densité $\rho(r, t)$, l'énergie interne $e(r, t)$ et la vitesse $u(r, t)$. L'interface liquide-vapeur est donnée par la quantité $\varphi(r, t)$, telle que :

$$\varphi(r, t) = \begin{cases} 0, & \text{dans la phase gazeuse,} \\ 1, & \text{dans la phase liquide.} \end{cases} \quad (2.24)$$

En notant $W = (A, \rho A, \rho Au, \rho AE, \rho A\varphi)$ le vecteur de variables conservatives, on introduit une forme condensée du système (3.1) :

$$\partial_t W + \partial_r f(W) = g(W). \quad (3.6)$$

$$\text{avec } f(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho Au \\ \rho Au^2 + Ap \\ A(\rho E + p)u \\ \rho A\varphi u \end{pmatrix} \text{ et } g(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ p\partial_r A \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

L'énergie totale du fluide est $E = e + \frac{1}{2}u^2$. La pression $\Pi(\rho, e, \varphi)$ vérifie :

$$\Pi(\rho, e, \varphi) = (\gamma(\varphi) - 1)\rho e - \gamma(\varphi)\pi(\varphi). \quad (2.26)$$

et on pose $p(r, t) = \Pi(\rho(r, t), e(r, t), \varphi(r, t))$.

Remarque 3.1.1. L'approche peut être étendue à des thermodynamiques quelconques (autres que des gaz raides (2.26)) [HHM10b].

L'hyperbolicité du système découle de l'hyperbolicité du système (2.30) :

Proposition 3.1.2. *Le système (3.6) a pour valeurs propres*

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_1 = u, \quad \lambda_2 = u - c, \quad \lambda_3 = u + c, \quad \lambda_4 = u, \quad (3.7)$$

où c vérifie (2.32). L'ensemble des vecteurs propres à droite associés $r_k(W)$ forme une base de \mathbb{R}^5 tant que $|u| \neq c$.

Remarque 3.1.3. Lorsque $u = c$ (resp. $u = -c$), les valeurs propres λ_0 et λ_2 (resp. λ_0 et λ_3) coïncident et la matrice jacobienne du flux n'est pas diagonalisable. Le système est dit résonant (voir définition 2.2.3). Le modèle étant non strictement hyperbolique et non conservatif de par le terme $p\partial_r A$, se pose la question de la non-unicité des solutions entropiques du problème de Riemann associé. Cette classe de problème a été étudiée par Isaacson et Temple (pour le cas conservatif, on consultera [IMPT92], le cas non conservatif étant traité dans [IT95] pour des équations scalaires) puis par LeFloch et Goatin [LG04] dans le cadre des écoulements en tuyère.

On peut facilement caractériser les champs :

Proposition 3.1.4. *Les champs 0, 1 et 2 sont linéairement dégénérés. Les champs 3 et 4 sont vraiment non linéaires.*

Afin de poursuivre l'étude mathématique du système, on introduit les quantités suivantes :

- l'entropie $s = \frac{p + \pi(\varphi)}{\rho\gamma(\varphi)}$,
- la quantité de mouvement $Q = \rho Au$,
- l'enthalpie totale $H = e + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2}$.

Proposition 3.1.5. *Notons $\eta = A\rho \ln(s)$ et $G = A\rho \ln(s)u$ le couple entropie-flux. Alors toute solution régulière $W(x, t)$ de (3.6) satisfait*

$$\partial_t \eta + \nabla \cdot G = 0. \quad (3.8)$$

On rappelle la définition d'un invariant de Riemann :

Définition 3.1.6. *Une fonction régulière $I : F \rightarrow \mathbb{R}$ est appelée k -invariant de Riemann si*

$$\forall W \in F, \quad \text{grad}_W I(W) \cdot r_k(W) = 0.$$

Pour chaque valeur propre, il existe quatre invariants de Riemann dont les gradients sont linéairement indépendants. On choisit comme invariants de Riemann indépendants les quantités suivantes :

Proposition 3.1.7. *Les invariants de Riemann associés à la vitesse caractéristique λ_0 sont :*

$$I_1^0 = \varphi \quad I_2^0 = s \quad I_3^0 = Q \quad I_4^0 = H. \quad (3.9)$$

Les invariants de Riemann associés aux ondes linéairement dégénérées 1 et 4 sont :

$$\begin{aligned} I_1^1 &= A & I_2^1 &= s & I_3^1 &= u & I_4^1 &= p, \\ I_1^4 &= A & I_2^4 &= \varphi & I_3^4 &= u & I_4^4 &= p. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Intéressons-nous maintenant aux ondes de chocs du système (3.6). Une onde de choc allant d'un état gauche W_L à un état droit W_R , se propageant à la vitesse σ , doit satisfaire les relations de saut de Rankine-Hugoniot. Comme le système est non-conservatif, on peut choisir les relations de saut. Pour l'équation triviale (3.5), le saut doit satisfaire :

$$\sigma[A] = 0,$$

où $[\cdot] = \cdot_R - \cdot_L$. Dès lors soit la section A est constante, soit la vitesse σ est nulle (le choc est alors stationnaire). Supposons que le choc corresponde à une section A constante. Le second membre de (3.6) disparaît et l'on se ramène aux équations d'Euler (2.23) et aux relations de saut (2.40)-(2.43). Supposons que la vitesse du choc soit nulle. La section A est discontinue en $x = 0$ et vérifie (3.5). La seule discontinuité de A coïncide avec l'onde stationnaire. Comme le champ caractéristique associé est linéairement dégénéré, les invariants de Riemann y sont constants. Le système étant non-conservatif, le choix des relations de saut doit être précisé. Il est naturel ici de choisir les invariants de Riemann associés à l'onde λ_0 pour les définir :

$$[\varphi] = 0, \quad [s] = 0, \quad [Q] = 0, \quad [H] = 0. \quad (3.11)$$

Remarque 3.1.8. Du point de vue de la physique, ces relations ne sont pas vérifiées lorsque la section varie beaucoup. Plus précisément, la relation $[s] = 0$ est mise en défaut [GH10a].

Une solution régulière stationnaire du système (3.1) est indépendante du temps et vérifie le système privé des dérivées temporelles, c'est-à-dire le système d'équations différentielles ordinaires suivant (muni d'une condition initiale) :

$$\partial_x(A\rho u) = 0, \quad (3.12)$$

$$\partial_x(A(\rho u^2 + p)) = p\partial_x A, \quad (3.13)$$

$$\partial_x(Au(\rho E + p)) = 0, \quad (3.14)$$

$$\partial_x(A\rho\varphi u) = 0. \quad (3.15)$$

Proposition 3.1.9. *Les invariants de Riemann associés à l'onde 0 sont conservés au travers d'une solution régulière stationnaire de (3.1).*

Démonstration. Considérons un système non conservatif

$$\partial_t W + A(W)\partial_x W = 0,$$

tel que $A(W)$ admette une valeur propre $\lambda_0(W)$ nulle. Notons

$$R_1(W), \dots, R_{m-1}(W)$$

les invariants de Riemann de l'onde stationnaire. Alors pour $1 \leq i \leq m-1$ fixé :

$$\partial_x R_i(W) = \nabla R_i \partial_x W.$$

Étant donnée W une solution stationnaire du système, on a $A(W)\partial_x W = 0$. Donc $\partial_x W$ est colinéaire au vecteur propre $r_0(W)$ de $A(W)$ associé à la valeur propre $\lambda_0(W)$, *i.e.*

$$\partial_x W = \alpha(W)r_0(W).$$

On en déduit que

$$\partial_x R_i(W) = \nabla R_i \alpha(W) r_0(W) = 0,$$

ce qui signifie que les invariants de Riemann $R_i(W)$, $1 \leq i \leq m-1$, sont constants au travers de l'onde stationnaire. \square

Considérant le jeu de variables $Z = (A, \varphi, s, Q, H)^T$, on a

Proposition 3.1.10. *Pour des solutions $Z(x, t)$ régulières, le système (3.6) s'écrit :*

$$\partial_t Z + C(Z) \partial_x Z = 0, \quad (3.16)$$

avec

$$C(Z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & A \left(\frac{\partial p}{\partial \varphi} - \rho \frac{\partial h}{\partial \varphi} \right) & A \left(\frac{\partial p}{\partial s} - \rho \frac{\partial h}{\partial s} \right) & u & \rho A \\ 0 & \frac{\partial p}{\partial \varphi} & \frac{u}{\rho} \frac{\partial p}{\partial s} & \frac{c^2}{\rho A} & u \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

3.2 Construction du schéma équilibre

On reprend les principes du schéma équilibre énoncés par Greenberg et Leroux dans [GL96] et appliqué aux écoulements en tuyère dans [KT05] et [AW04].

Le domaine unidimensionnel est décomposé en volumes de contrôle $C_i =]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[$, centrés en x_i . Le pas d'espace est noté h_i . L'approximation au sens des volumes finis de W dans la maille i au temps t^n vérifie :

$$W_i^n \simeq \frac{1}{h_i} \int_{C_i} W(x, t^n) dx. \quad (3.18)$$

Le pas de temps $\tau^n = t^{n+1} - t^n$ doit satisfaire une condition CFL du type :

$$\tau^n \leq \max_i \frac{h_i}{|u_i| + c_i}. \quad (3.19)$$

La variable discrète A_i est supposée être constante par maille. Par application de la formule de Stokes, l'intégration du système de lois de conservation sur le quadrilatère espace-temps $]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[\times]t^n, t^{n+1}[$ donne :

$$\begin{aligned} h_i(W_i^{n+1} - W_i^n) &+ \tau^n (F_{i+1/2,-}(Z_i^n, Z_{i+1}^n) - F_{i-1/2,+}(Z_i^{n-1}, Z_i^n)) \\ &+ \tau^n A_i (G_{i+1/2,-}(Z_i^n, Z_{i+1}^n) - G_{i-1/2,+}(Z_i^{n-1}, Z_i^n)) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Les flux numériques $F_{i+1/2,-}$ et $G_{i+1/2,-}$ sont définis par :

$$F_{i+1/2,-}(Z_i^n, Z_{i+1}^n) = f(W(Z_{i+1/2,-})), \quad (3.21)$$

$$G_{i+1/2,-}(Z_i^n, Z_{i+1}^n) = g(W(Z_{i+1/2,-})). \quad (3.22)$$

Les états d'interface $Z_{i+1/2,-}$ et $Z_{i-1/2,+}$ sont déterminés par un schéma de VFRoe-ncv, que l'on rappelle au paragraphe 3.3.

Il est important de noter que le changement de variables $W \rightarrow Z$ n'est pas inversible (*a fortiori* il en est de même pour le changement de variables $Z \rightarrow Y$, où $Y = (A, \rho, u, p, \varphi)$ désigne le vecteur de variables primitives). Soit Z^* l'état obtenu par le schéma de VFRoe à l'interface des cellules C_i et C_{i+1} . Pour en déduire le vecteur de variables conservatives W^* correspondant, on est amené à déterminer les zéros ρ^* de la fonction

$$F(\rho) = \frac{\gamma}{\gamma-1} s \rho^{\gamma-1} + \frac{Q^2}{2\rho^2 A^2} - H, \quad (3.23)$$

où γ , s , Q , et H sont donnés, ainsi que A .

Proposition 3.2.1.

1. La fonction F admet un minimum en

$$\rho_{\min} = \left(\frac{Q^2}{\gamma s A^2} \right)^{\frac{1}{\gamma+1}}.$$

2. Si $Q = 0$, F admet une unique racine :

$$\rho^* = \left(\frac{H \gamma - 1}{s \gamma} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}}.$$

3. Si $Q \neq 0$, alors F admet zéro ou deux racines.

La preuve est immédiate et l'expression de la solution se déduit immédiatement de (3.23).

Si $Q \neq 0$, le choix de la solution ρ^* est donc indéterminé. On distingue les cas suivants :

1. Si F n'admet pas de racine pour l'état Z^* considéré, on pose $\rho^* = \rho_{\min}$.
2. Si F admet une unique racine ρ^* , celle-ci correspond à $\rho^* = \rho_{\min}$.
3. Si F admet deux racines $\rho_1^* > \rho_{\min}$ et $\rho_2^* < \rho_{\min}$:
 - (a) $\rho^* = \rho_1^*$ est subsonique,
 - (b) $\rho^* = \rho_2^*$ est supersonique.

Plaçons nous dans le cas (3a). Le choix $\rho^* = \rho_1^*$ correspond à la solution subsonique.

Exprimons la vitesse et la vitesse du son relative à $\rho_{\min} = \left(\frac{Q^2}{\gamma s A^2} \right)^{\frac{1}{\gamma+1}}$:

$$\begin{aligned} u_{\min} &= \frac{Q}{\rho_{\min} A}, \\ c^2 &= \gamma s \rho_{\min}^{\gamma-1}. \end{aligned}$$

On vérifie que $F'(\rho) = \frac{1}{\rho}(c^2 - u^2)$ et par suite que :

$$F'(\rho_{\min}) = 0 \Leftrightarrow u_{\min}^2 = c_{\min}^2.$$

L'état correspondant à $\rho^* = \rho_{\min}$ est donc bien sonique. Pour $\rho^* > \rho_{\min}$, on a $F'(\rho) > 0$ i.e. $\rho^{-1}(c^2 - u^2) > 0$. Ceci est équivalent à :

$$\frac{u^2}{c^2} < 1.$$

La solution $\rho^* = \rho_1^*$ garantit que l'état est subsonique. Le choix $\rho^* = \rho_2^*$ assure que l'état solution est supersonique.

3.3 Solveur de Riemann approché VFRoe-ncv

Le calcul des flux numériques à chaque interface $i \pm 1/2$ consiste en la résolution de problèmes de Riemann. Le schéma de Godunov présenté dans [GZI⁺79] et [Tor99], s'appuie sur la résolution exacte des problèmes de Riemann à chaque interface. Considérant $\forall i \in \mathbb{Z}$ une approximation U_i^n de la solution au temps t^n , la solution au temps t^{n+1} est définie comme la projection L^2 de la solution exacte sur l'espace des fonctions constantes par maille. L'intégration du système de lois de conservation sur l'espace-temps donne une formulation conservative du schéma qui vérifie la relation de consistance avec la condition d'entropie. Mais la résolution du problème de Riemann s'avère parfois délicate. Aussi est-il plus simple de développer un solveur de Riemann approché. Le schéma de Roe [Roe81] est basé sur la résolution d'un problème de Riemann linéarisé de la forme :

$$\partial_t W + A(W, W) \partial_x W = 0. \quad (3.24)$$

La matrice A doit vérifier les conditions de Roe et le système doit être hyperbolique. Il faut rappeler que la linéarisée au sens de Roe n'existe pas forcément. Le schéma de VFRoe-ncv est un solveur de Riemann linéarisé approché qui ne nécessite pas de satisfaire les conditions de Roe. Le schéma VFRoe a été introduit dans [MFG99]. On s'intéresse ici à la version en variables non conservatives du schéma présentée dans [BGH00].

3.3.1 Construction du solveur approché

On considère le problème de Riemann suivant :

$$\begin{cases} \partial_t W + A(W) \partial_x W = 0, \\ W(x, 0) = \begin{cases} W_L & \text{si } x < 0, \\ W_R & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (3.25)$$

Dans le cas classique, les variables primitives Y sont définies par un changement de variables inversible (comme dit précédemment, nous généraliserons le schéma au cas d'un changement de variables non inversible) :

$$W = W(Y) \Leftrightarrow Y = Y(W). \quad (3.26)$$

On note $Y_L = Y(W_L)$ et $Y_R = Y(W_R)$. La moyenne des états gauche et droit est notée :

$$\hat{Y} = \frac{Y_L + Y_R}{2} \quad \text{et} \quad \hat{W} = W(\hat{Y}). \quad (3.27)$$

De manière équivalente, le système s'écrit

$$\partial_t Y + B(Y) \partial_x Y = 0, \quad (3.28)$$

où $B(Y) = \nabla_Y W^{-1} A(W(Y)) \nabla_Y W(Y)$. On se ramène à la résolution du problème linéarisé :

$$\begin{cases} \partial_t Y + B(\hat{Y}) \partial_x Y = 0, \\ Y(x, 0) = \begin{cases} Y_L & \text{si } x < 0, \\ Y_R & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (3.29)$$

Pour ce faire, on peut utiliser une technique introduite par exemple par Degond *et al.* [DPRV99].

Définition 3.3.1. Soit A une matrice ayant pour valeurs propres

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m.$$

La fonction signe satisfait :

$$\text{sgn}(\zeta) = \begin{cases} 1 & \text{si } \zeta > 0, \\ -1 & \text{si } \zeta < 0, \\ 0 & \text{si } \zeta = 0. \end{cases} \quad (3.30)$$

Soit P le polynôme d'interpolation de la fonction signe sur les valeurs propres de A tel que :

$$d^\circ P \leq m - 1, \quad (3.31)$$

$$P(\lambda_i) = \text{sgn}(\lambda_i), \quad i = 1 \dots m. \quad (3.32)$$

$$(3.33)$$

Alors

$$\text{sgn}(A) := P(A). \quad (3.34)$$

Proposition 3.3.2. La solution du problème linéarisé (3.29) est

$$Y^* \left(Y_L, Y_R, \frac{x}{t} \right) = \frac{Y_L + Y_R}{2} - \text{sgn} \left(B - \frac{x}{t} I \right) \frac{Y_R - Y_L}{2}, \quad (3.35)$$

où I désigne la matrice identité de $\mathbb{M}^{m \times m}$.

Démonstration. L'hyperbolicité ne dépendant pas du jeu de variables dans lequel on se place, la matrice $B(\hat{Y})$ est diagonalisable, de valeurs propres $(\lambda_i)_{i=1 \dots m}$. On note $(r_i)_{i=1 \dots m}$ les vecteurs propres à droite correspondants. En posant :

$$P = (r_1 r_2 \dots r_m) \quad \text{et} \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \dots & \\ 0 & & \lambda_m \end{pmatrix}.$$

on a

$$P^{-1} B(\hat{Y}) P = D.$$

En introduisant la relation (3.3.1) dans (3.29) et en notant $Y = PZ$, on obtient

$$\begin{cases} \partial_t Z + D\partial_x Z = 0, \\ Z(x, 0) = \begin{cases} Z_L & \text{si } x < 0, \\ Z_R & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases}$$

où $Z_{L,R} = P^{-1}Y_{L,R}$. La méthode des caractéristiques implique que :

$$Z_i(x, t) = Z_i(x - \lambda_i t, 0) = \begin{cases} Z_{L,i} & \text{si } x - \lambda_i t < 0, \\ Z_{R,i} & \text{si } x - \lambda_i t > 0. \end{cases}$$

De manière équivalente on a :

$$Z_i(x, t) = \frac{(x - \lambda_i t)^-}{x - \lambda_i t} Z_{L,i} + \frac{(x - \lambda_i t)^+}{x - \lambda_i t} Z_{R,i},$$

en notant $\Phi^+ = \max(0, \Phi)$ et $\Phi^- = \min(0, \Phi)$. On en déduit :

$$Z_i(x, t) = \frac{Z_{L,i} + Z_{R,i}}{2} - \operatorname{sgn}\left(\lambda_i - \frac{x}{t}\right) \frac{Z_{R,i} - Z_{L,i}}{2}.$$

En repassant à la forme matricielle, il vient :

$$Z(x, t) = \frac{Z_L + Z_R}{2} - \operatorname{sgn}\left(D - \frac{x}{t}I\right) \frac{Z_R - Z_L}{2},$$

d'où

$$Y^*(x, t) = \frac{Y_L + Y_R}{2} - \operatorname{sgn}\left(B - \frac{x}{t}I\right) \frac{Y_R - Y_L}{2},$$

soit en $x = 0$:

$$Y^*(0, t) = \frac{Y_L + Y_R}{2} - \operatorname{sgn}(B) \frac{Y_R - Y_L}{2}.$$

□

Remarque 3.3.3. Le polynôme d'interpolation peut être calculé par un procédé de Newton :

$$\begin{aligned} P(B) &= \operatorname{sgn}[\lambda_1] + \operatorname{sgn}[\lambda_1, \lambda_2](B - \lambda_1 I) \\ &+ \operatorname{sgn}[\lambda_1, \dots, \lambda_m](B - \lambda_1 I)(B - \lambda_2 I) \dots (B - \lambda_m I). \end{aligned}$$

où les différences divisées $\operatorname{sgn}[\lambda_1, \dots, \lambda_m]$ vérifient

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn}[\lambda_i] &= \operatorname{sgn}(\lambda_i), \\ \operatorname{sgn}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{i+1}] &= \frac{\operatorname{sgn}[\lambda_2, \dots, \lambda_{i+1}] - \operatorname{sgn}[\lambda_1, \dots, \lambda_i]}{\lambda_{i+1} - \lambda_1}. \end{aligned}$$

Ce calcul du schéma de VFRoe n'est pas standard mais présente de nombreux avantages. D'une part il n'est pas nécessaire de connaître les vecteurs propres de la matrice B . D'autre part la complexité du calcul de $P(B)$ est équivalente à celle de l'algorithme de Hörner soit $m - 1$ produits matriciels (qui sont calculés rapidement en fortran90).

3.3.2 Correction entropique [HHM10a]

Le schéma de VFRoe, tout comme celui de Roe, approche mal les ondes de détente traversant l'interface $x = 0$ et autorise en ces points des chocs non physiques. C'est le cas lorsque entre deux cellules C_i et C_{i+1} une valeur propre associée à un k -champ vraiment non linéaire vérifie :

$$\lambda_k(W_i^n) \leq 0 \leq \lambda_k(W_{i+1}^n).$$

Une correction entropique est alors nécessaire pour garantir le second principe de la thermodynamique. De nombreuses corrections existent. Celle de Harten [HH83] consiste à remplacer le module des valeurs propres par une fonction parabolique non nulle lorsque les valeurs propres s'approchent de zéro. L'inconvénient de cette technique est qu'elle dépend d'un paramètre ajustable en fonction de l'écoulement, qu'il est donc difficile de gérer de façon systématique. L'approche présentée ici ne nécessite aucun paramètre mais consiste à augmenter localement la viscosité numérique du schéma quand on détecte une détente sonique. On peut par exemple remplacer localement le flux à l'interface du solveur de Riemann linéarisé par un flux de Rusanov [Rus61] entropique. Cette correction entropique préserve la consistance et la conservativité du flux et assure une bonne précision. L'inconvénient est que le flux numérique global n'est pas lipschitzien. La correction entropique est la suivante :

Définition 3.3.4. Correction par Rusanov

- Si $\lambda_k(W_i^n) \leq 0 \leq \lambda_k(W_{i+1}^n)$ dans une k -onde vraiment non linéaire alors le flux numérique est celui de Rusanov :

$$F_i(W_i^n, W_{i+1}^n) = \frac{f(W_i^n) + f(W_{i+1}^n)}{2} - s_i \frac{W_{i+1}^n - W_i^n}{2}, \quad (3.36)$$

où $s_i = \max(\rho(A(W_i^n)), \rho(A(W_{i+1}^n)))$ et $\rho(A(W))$ désigne le rayon spectral de A .

- Sinon

$$F_i(W_i^n, W_{i+1}^n) = f(Y^*(W_i^n, W_{i+1}^n, 0)). \quad (3.37)$$

On propose une seconde correction entropique (qui est lipschitzienne si le flux numérique à corriger est lipschitzien).

Définition 3.3.5. Correction par viscosité minimale

Si $\lambda_k(W_i^n) \leq 0 \leq \lambda_k(W_{i+1}^n)$ dans une k -onde vraiment non linéaire alors le flux numérique est remplacé par :

$$\begin{aligned} F_i(W_i^n, W_{i+1}^n) &= f(Y^*(W_i^n, W_{i+1}^n, 0)) \\ &- \min(|\lambda_k(W_i^n)|, |\lambda_k(W_{i+1}^n)|)(/2)(W_{i+1}^n - W_i^n). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Nous avons :

Proposition 3.3.6. *La correction (3.38) appliquée aux équations de Burgers conduit à un schéma monotone donc convergent.*

Démonstration. Soit le système

$$\partial_t W + \partial_x f(W) = 0,$$

avec $W \in \mathbb{R}^d$, $d = 1$ et $f(W) = W^2/2$. La vitesse d'onde est donnée par $\lambda_1(W) = W$. Le flux numérique de Godunov s'écrit dans ce cas :

$$f_1(W_L, W_R) = \begin{cases} W_L^2/2 & \text{si } W_L \geq 0 \text{ et } W_L + W_R \geq 0, \\ W_R^2/2 & \text{si } W_R \leq 0 \text{ et } W_L + W_R < 0, \\ 0 & \text{si } W_R > 0 \text{ et } W_L < 0. \end{cases}$$

Le flux VFRoe vérifie :

$$f_2(W_L, W_R) = \begin{cases} W_L^2/2 & \text{si } W_L + W_R > 0, \\ W_R^2/2 & \text{si } W_L + W_R \leq 0. \end{cases}$$

Après calculs, le flux VFRoe corrigé par la formule (3.38) s'écrit :

$$f_3(W_L, W_R) = \begin{cases} W_L^2/2 & \text{si } W_L \geq 0 \text{ et } W_L + W_R \geq 0, \\ W_R^2/2 & \text{si } W_R \leq 0 \text{ et } W_L + W_R < 0, \\ W_R W_L / 2 & \text{si } W_R > 0 \text{ et } W_L < 0. \end{cases}$$

Notons que ce flux n'est différent du flux de Godunov que dans le cas sonique $W_L < 0 < W_R$. Le flux f_3 est continu sur \mathbb{R}^2 et constant ($f_3(a, a) = f(a)$). Il est de plus croissant par rapport à la première variable et décroissant par rapport à la seconde. Il s'ensuit que le schéma de volumes finis associé vérifie une propriété d'entropie discrète et que la solution discrète converge vers l'unique solution entropique du problème d'évolution [EGH00]. \square

3.4 Propriétés du schéma équilibre

Ainsi construit, le schéma satisfait les propriétés suivantes :

Proposition 3.4.1. *Le solveur d'interface vérifie :*

$$\varphi_{i+1/2,-} = \varphi_{i+1/2,+}, \quad (3.39)$$

$$s_{i+1/2,-} = s_{i+1/2,+}, \quad (3.40)$$

$$Q_{i+1/2,-} = Q_{i+1/2,+}, \quad (3.41)$$

$$H_{i+1/2,-} = H_{i+1/2,+}. \quad (3.42)$$

Les états sont constants avec la solution exacte à la traversée de l'onde stationnaire, puisque les invariants de Riemann associés à cette onde sont $\mathbb{I} = \{\varphi, s, Q, H\}$. De plus la section vérifie :

Proposition 3.4.2.

$$A_{i+1/2,-} = A_{i-1/2,+} = A_i. \quad (3.43)$$

Remarque 3.4.3. Si $A_i = A_{i+1}$, les états $Z_{i+1/2,-}$ et $Z_{i+1/2,+}$ sont identiques. La formulation (3.20) devient conservative. Il est alors possible d'écrire les équations sans la donnée de A_i .

Proposition 3.4.4. *Supposons que la condition initiale est :*

$$\varphi_i = \varphi_0, S_i = S_0, Q_i = Q_0, H_i = H_0,$$

pour tout i et pour une donnée arbitraire de section A_i (constante par maille).

Alors le schéma (3.20) préserve les états stationnaires :

$$\rho_i^{n+1} - \rho_i^n = 0, \quad (3.44)$$

$$\rho_i^{n+1} u_i^{n+1} - \rho_i^n u_i^n = 0, \quad (3.45)$$

$$E_i^{n+1} - E_i^n = 0, \quad (3.46)$$

$$\rho_i^{n+1} \varphi_i^{n+1} - \rho_i^n \varphi_i^n = 0. \quad (3.47)$$

Démonstration. On note $\delta(\cdot)_i$ la différence :

$$\delta(\cdot)_i = (\cdot)_i^{n+1} - (\cdot)_i^n.$$

Le bilan de masse satisfait :

$$h\delta(A\rho)_i + \tau((\rho Au)_{i+1/2,-} - (\rho Au)_{i-1/2,+}) = 0, \quad (3.48)$$

tel que :

$$\begin{cases} (\rho Au)_{i+1/2,-} = A_i(\rho u)_{i+1/2,-}, \\ (\rho Au)_{i-1/2,+} = A_i(\rho u)_{i-1/2,+}. \end{cases}$$

Par hypothèse on a de plus :

$$\begin{cases} \varphi_i = \varphi_0, \\ s_i = s_0, \\ Q_i = A_i \rho_i u_i = Q_0, \\ H_i = h(s_0, \varphi_0, \rho_i) + \frac{1}{2} u_i^2 = H_0. \end{cases}$$

Or d'après les propositions 3.4.1 et 3.4.2, on a :

$$Q_{i+1/2,-} = A_{i+1/2,-} \rho_{i+1/2,-} u_{i+1/2,-} \quad (3.49)$$

$$= A_i \rho_{i+1/2,-} u_{i+1/2,-} \quad (3.50)$$

$$= Q_0, \quad (3.51)$$

et

$$Q_{i-1/2,+} = A_{i-1/2,+} \rho_{i-1/2,+} u_{i-1/2,+}, \quad (3.52)$$

$$= A_i \rho_{i-1/2,+} u_{i-1/2,+}, \quad (3.53)$$

$$= Q_0. \quad (3.54)$$

Ceci implique que $h\delta(A\rho)_i = 0$ et $(\rho u)_{i+1/2,-} = (\rho u)_{i-1/2,+}$. De la même manière, l'enthalpie totale étant constante au travers des interfaces $i \pm 1/2$, il vient :

$$H(s_0, \varphi_0, \rho_{i+1/2,-}) + \frac{1}{2}(u_{i+1/2,-})^2 = H(s_0, \varphi_0, \rho_{i-1/2,+}) + \frac{1}{2}(u_{i-1/2,+})^2.$$

Il s'ensuit que :

$$\rho_{i+1/2,-} = \rho_{i-1/2,+}, \quad (3.55)$$

$$u_{i+1/2,-} = u_{i-1/2,+}, \quad (3.56)$$

car on prend la racine associée à la maille. La conservation de l'énergie s'écrit :

$$h\delta(AE)_i + \tau \left((\rho AuH)_{i+1/2,-} - (\rho AuH)_{i-1/2,+} \right) = 0, \quad (3.57)$$

ce qui revient à :

$$h\delta(AE)_i = 0. \quad (3.58)$$

Enfin la quantité de mouvement et l'enthalpie étant conservées, on a :

$$H_{i+1/2,-} = H_{i-1/2,+} = H_0, \quad (3.59)$$

$$(\rho Au)_{i+1/2,-} = (\rho Au)_{i-1/2,+}, \quad (3.60)$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} h\delta(A\rho u)_i &+ \tau \left((\rho Au^2)_{i+1/2,-} - (\rho Au^2)_{i-1/2,+} \right) \\ &+ \tau A_i \left(p_{i+1/2,-} - p_{i-1/2,+} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.61)$$

avec

$$\begin{cases} p_{i+1/2,-} = p(\rho_{i+1/2,-}, \varphi_0, s_0), \\ p_{i-1/2,+} = p(\rho_{i-1/2,+}, \varphi_0, s_0), \end{cases}$$

soit $h\delta(A\rho u)_i = 0$. □

3.5 Résultats numériques

Ce paragraphe illustre le bon comportement de notre schéma numérique. Les deux premiers cas tests valident le fait que le schéma préserve les états stationnaires (A, φ, s, Q, H) . On propose une étude de la dynamique d'un écoulement monophasique fortement comprimée en coordonnées sphériques. Il s'agit de faire un lien avec les applications numériques du chapitre 2. Les résultats numériques présentés correspondent à une thermodynamique de gaz parfait. Il est clair que le schéma équilibre introduit ne pourra pas faire disparaître les « oreilles de lapin » dans le cas d'une thermodynamique de type gaz raide, en section constante.

Contact stationnaire

On considère dans un premier temps une section discontinue de sorte que $A(x) = 1$ si $x < 0,5$ et $A(x) = 1.5$ sinon. Un état droit étant donné, l'état gauche *ad hoc* est obtenu en déterminant le zéro de l'équation (3.23) par dichotomie. Les conditions initiales du premier test figurent en table 3.1. L'écoulement est monophasique et suit une loi de gaz parfait pour lequel $\gamma = 1.4$. Le domaine de calcul est $[0, 1]$ et on choisit une condition CFL de 0.8 pour un calcul de 0.2 s. La discrétisation du domaine est régulière et constituée de 1000 mailles. Le schéma équilibre préserve parfaitement l'état stationnaire comme le montre la figure 3.5.1.

État gauche W_L	État droit W_R
$u_L = 1 \text{ m.s}^{-1}$	$u_R = 0.8035007 \text{ m.s}^{-1}$
$p_l = 1 \text{ Pa}$	$p_R = 1.1886922 \text{ Pa}$
$\rho_L = 1 \text{ kg.m}^{-3}$	$\rho_R = 1.1314126 \text{ kg.m}^{-3}$
$\varphi_L = 1$	$\varphi_R = 1$

TAB. 3.1 – Données initiales pour le contact stationnaire 1 (correspondant à la figure 3.5.1).

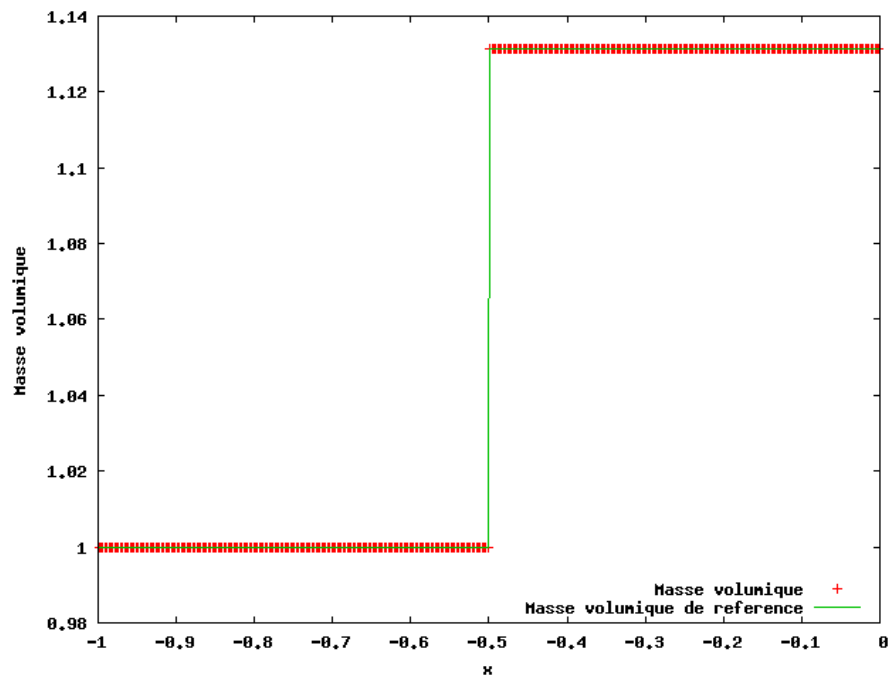


FIG. 3.5.1 – Contact stationnaire 1 : profil de la masse volumique à $t = 0.2$ s.

Solution régulière stationnaire

On propose la construction d'une solution analytique au système (3.6) exprimée dans le jeu de variables (A, s, u, p, φ) :

$$\partial_t A = 0, \quad (3.62)$$

$$\partial_t s + u \partial_x s = 0, \quad (3.63)$$

$$\partial_t u + u \partial_x u + \frac{1}{\rho} \partial_x p = 0, \quad (3.64)$$

$$\partial_t p + u \partial_x p + \gamma p \partial_x u + \frac{\gamma p u}{A} \partial_x A = 0, \quad (3.65)$$

$$\partial_t \varphi + u \partial_x \varphi = 0. \quad (3.66)$$

Supposons que la pression vérifie $\partial_t p = 0$. Selon une idée de Leroux [GL96] on émet l'hypothèse que u et p sont localement monotones et que l'on peut exprimer u en fonction de p . Alors il vient

$$u \partial_p u + \frac{1}{\rho} = 0, \quad (3.67)$$

$$(u + \gamma p \partial_p u) \partial_x p = -\frac{\gamma p u}{A} \partial_x A. \quad (3.68)$$

Le fluide suit une loi de gaz parfait et l'écoulement est supposé isentropique (puisqu'il vérifie l'équation (3.63)) de sorte que :

$$\rho = p^{1/\gamma} s^{-1/\gamma}.$$

En intégrant la première relation on obtient :

$$u(p)^2 = B - \frac{2\gamma}{\gamma-1} p \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{1}{s^\gamma}. \quad (3.69)$$

La constante B doit être choisie telle que $B \geq \frac{2\gamma}{\gamma-1} p \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{1}{s^\gamma}$. Puis on intègre l'équation (3.68) par rapport à x :

$$\int -\frac{1}{\gamma p u} (u + \gamma p \partial_p u) \partial_x p dx = \int \frac{1}{A} \partial_x A dx. \quad (3.70)$$

On introduit le changement de variable $p = p(x)$ de sorte que :

$$\partial_x p dx = dp.$$

Alors l'intégrale (3.70) revient à :

$$-\frac{1}{\gamma} \ln p - \ln u = \ln A - \ln K,$$

où K désigne une constante d'intégration. On en déduit que :

$$u(p) = \frac{K}{A} p^{-\frac{1}{\gamma}}.$$

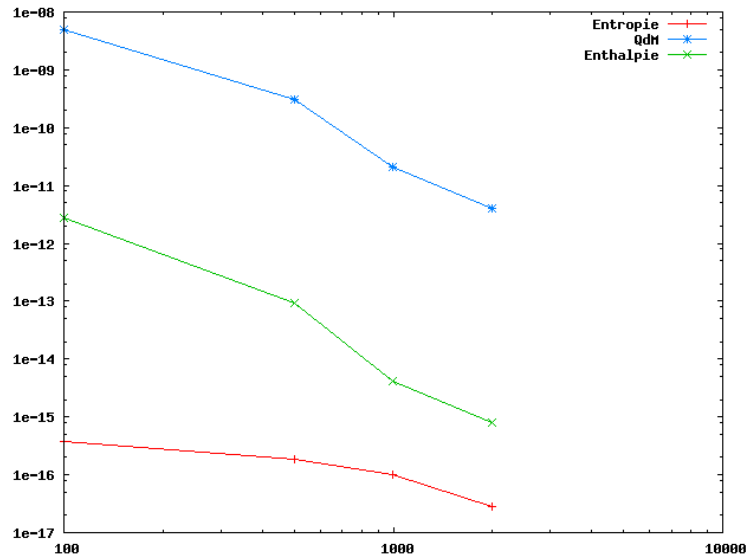


FIG. 3.5.2 – Solution stationnaire régulière : mesure en norme L^1 de l'erreur commise.

En injectant dans (3.69), il s'ensuit que la vitesse est solution de l'équation :

$$\frac{2\gamma}{\gamma-1} s^{1/\gamma} \left(\frac{Au}{K} \right)^{1-\gamma} = B - u^2.$$

En pratique on choisit $S(x, t) = S_0 = 0.2$, $\varphi(x, t) = 1$, $\gamma = 1.2$, $C = 1$ et $B = 10$. La section est donnée par $A(x) = x^2$. Le calcul est effectué sur le domaine $[1, 2]$ discrétisé en 1000 cellules. Le temps final est $t = 0.2$ s et la CFL vaut 0.5. La figure 3.5.2 présente l'erreur en norme $L1$ commise pour différents maillages. Elle est nulle aux erreurs d'arrondi près. À nouveau le schéma préserve exactement la solution stationnaire, comme on peut l'observer sur les profils de masse volumique, vitesse et pression présentés en figures 3.5.3 à 3.5.5.

Rebond de « bulle » monophasique

On s'intéresse à la dynamique d'une « bulle » pour laquelle les deux phases suivent la même loi de gaz parfait avec $\gamma = 1.01$. La bulle étant supposée sphérique, la section est donnée par $A(r) = 4\pi r^2$. Les conditions initiales vérifient

$$W(r, 0) = \begin{cases} W_L, & \text{si } r < 0.4, \\ W_R, & \text{si } r > 0.4, \end{cases}$$

les états W_L et W_R étant détaillés en table 3.2. L'écoulement consiste en une onde de détente se propageant dans une région proche du vide. Le rapport de pression est le même que celui d'une bulle fortement comprimée (voir section 2.4.3, p.37). Le calcul nécessite donc l'utilisation d'une correction entropique au point de détente sonique. Le domaine de calcul est $[0, 1]$, la condition CFL est 0.5. Le maillage est régulier est comporte 1000 mailles. Les figures 3.5.6, 3.5.7, 3.5.8 et 3.5.9 présentent les profils de la masse volumique, de la quantité de mouvement, de la vitesse et

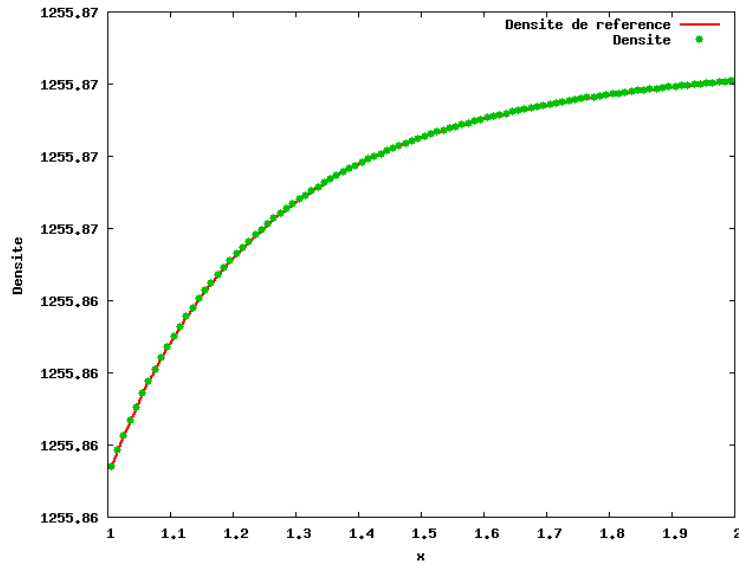


FIG. 3.5.3 – Solution stationnaire régulière : profils de la masse volumique ρ à $t = 0.2$ s.

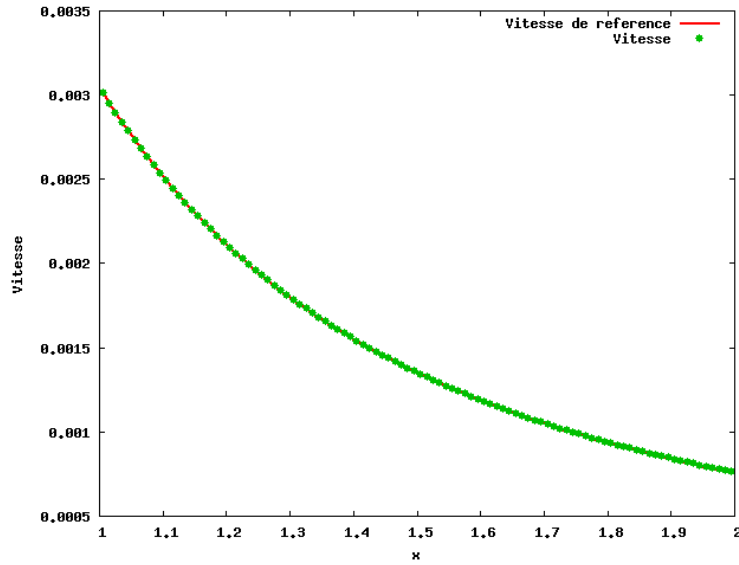


FIG. 3.5.4 – Solution stationnaire régulière : profils de la vitesse u à $t = 0.2$ s.

État gauche W_L	État droit W_R
$u_L = 0 \text{ m.s}^{-1}$	$u_R = 0 \text{ m.s}^{-1}$
$p_l = 5 \text{ Pa}$	$p_R = 10^5 \text{ Pa}$
$\rho_L = 0.01 \text{ kg.m}^{-3}$	$\rho_R = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$
$\varphi_L = 1$	$\varphi_R = 1$

TAB. 3.2 – Données initiales pour le rebond de bulle monophasique (correspondant aux figures 3.5.6 à 3.5.13).

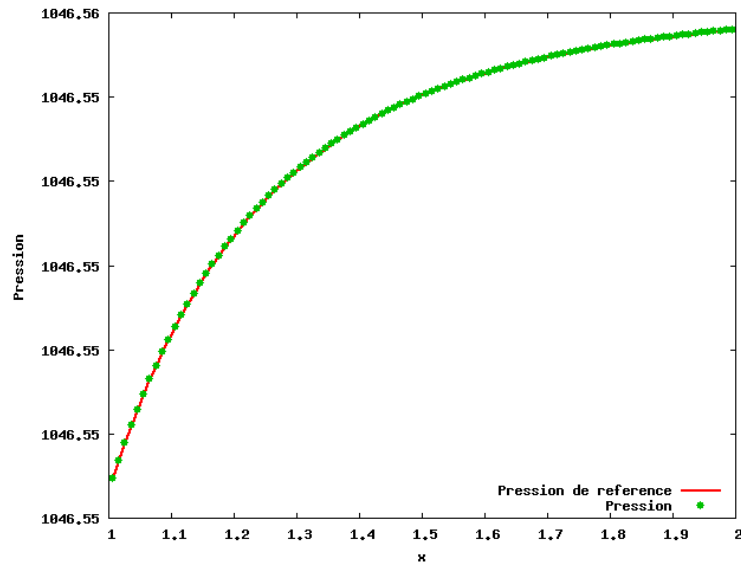


FIG. 3.5.5 – Solution stationnaire régulière : profils de la pression p à $t = 0.2$ s.

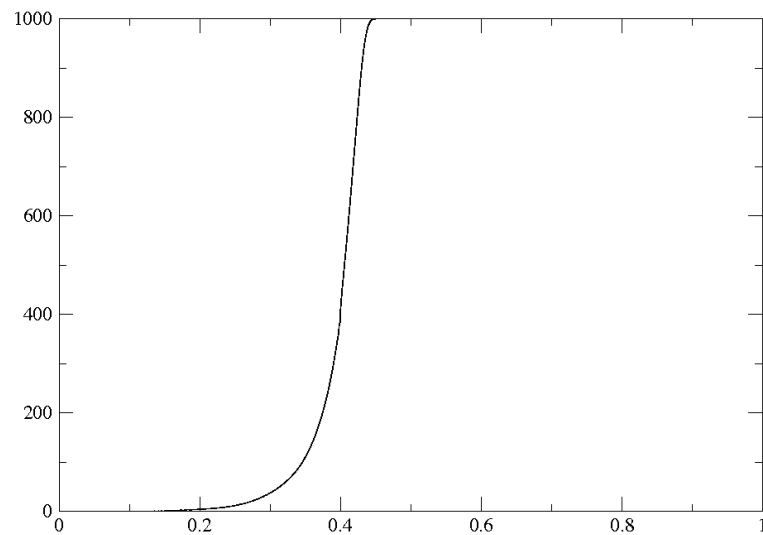


FIG. 3.5.6 – Rebond de bulle monophasique : profil de la masse volumique ρ à $t = 0.05923$ s.

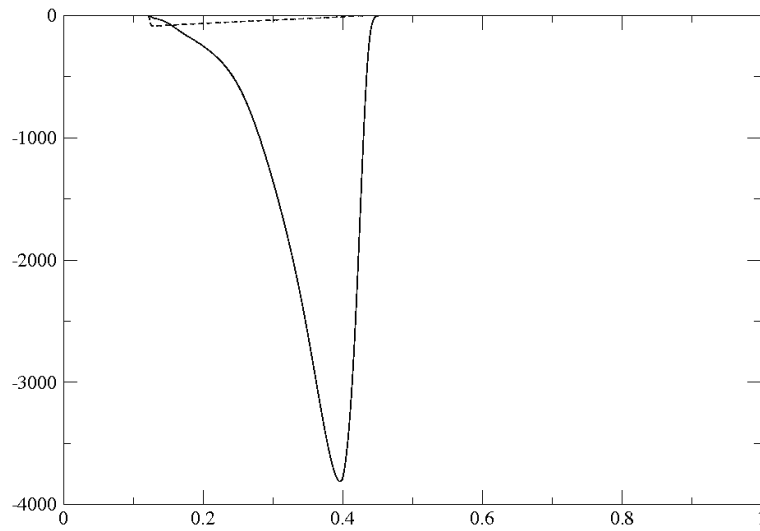


FIG. 3.5.7 – Rebond de bulle monophasique : profil de la quantité de mouvement Q à $t = 0.05923$ s. La courbe en pointillés correspond au profil de vitesse.

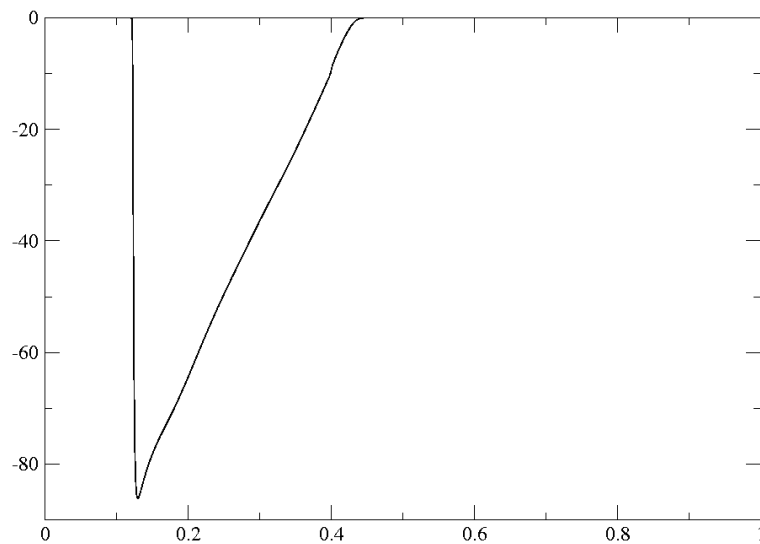


FIG. 3.5.8 – Rebond de bulle monophasique : profil de la vitesse u à $t = 0.05923$ s.

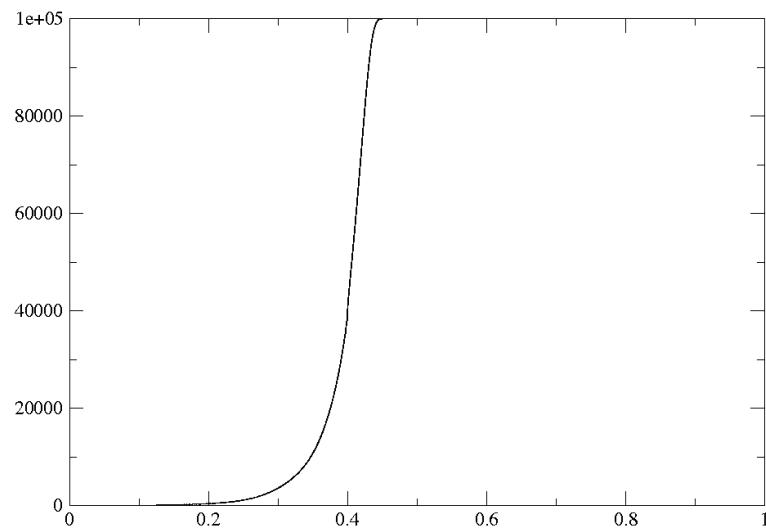


FIG. 3.5.9 – Rebond de bulle monophasique : profil de la pression p à $t = 0.05923$ s.

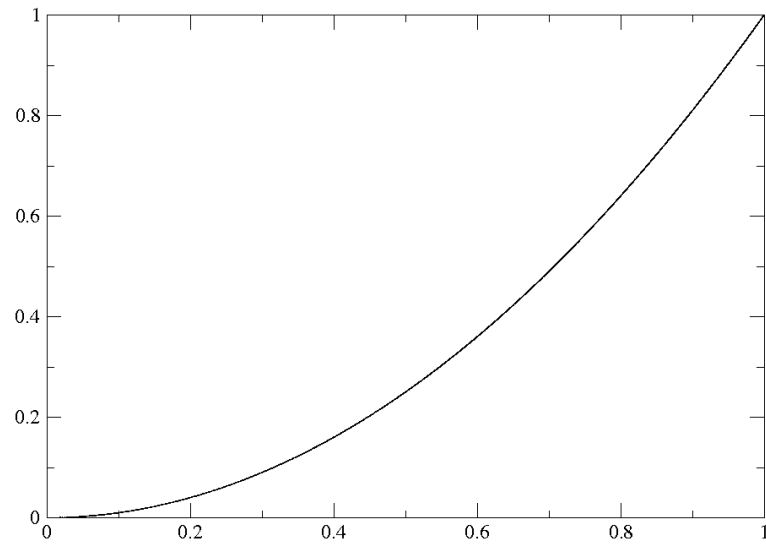


FIG. 3.5.10 – Rebond de bulle monophasique : profil de la section.

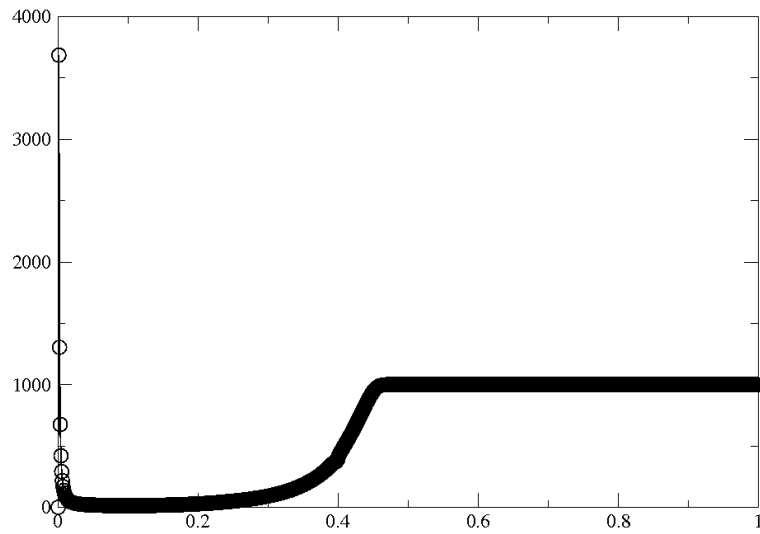


FIG. 3.5.11 – Rebond de bulle monophasique : profil de la masse volumique ρ à $t = 0.0795$ s.

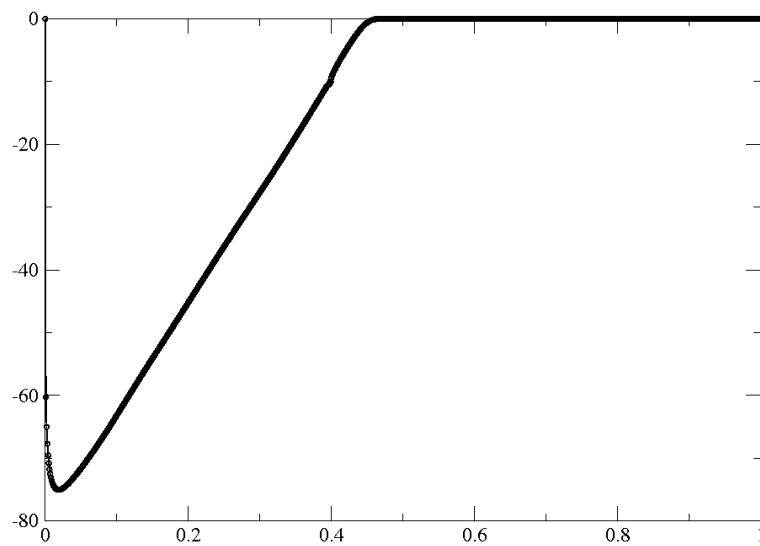


FIG. 3.5.12 – Rebond de bulle monophasique : profil de la vitesse u à $t = 0.0795$ s.

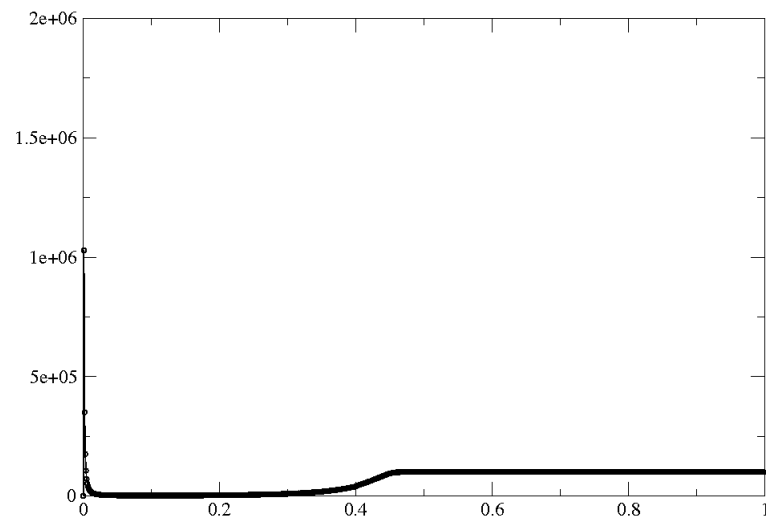


FIG. 3.5.13 – Rebond de bulle monophasique : profil de la pression p à $t = 0.0795$ s.

de la pression à $t = 0.05923$ s. Les figures 3.5.11 à 3.5.13 présentent les résultats obtenus à $t = 0.0795$ s, juste après la réflexion de l'onde de choc initiale.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons proposé un schéma équilibre pour traiter le terme source du modèle diphasique, en coordonnées sphériques, introduit au chapitre 2. L'approche adoptée est similaire à celle introduite par Greenberg et Leroux dans le cas scalaire [GL96]. Une équation supplémentaire est ajoutée au système de manière à créer un autre champ caractéristique linéairement dégénéré. Le système global est hyperbolique et non-conservatif. Notons qu'il est résonant lorsque les valeurs propres coïncident, puisque la matrice jacobienne du flux n'est alors plus diagonalisable. De fait de la non-conservativité du système, les relations de saut doivent être précisées. Nous avons choisi d'utiliser les invariants de Riemann relatifs à l'onde stationnaire pour définir les relations. Le schéma équilibre est ensuite construit dans ce nouveau jeu de variables $Z = (A, \varphi, s, Q, H)$. Cependant, le passage des variables conservatives aux variables (A, φ, s, Q, H) n'est pas bijectif. Nous insistons sur la démarche appliquée pour choisir une solution au problème non linéaire.

La construction du schéma équilibre repose sur le solveur de Riemann approché de VFRoe-ncv. Nous proposons une technique numérique de résolution du problème de Riemann linéarisé inspirée de Degond *et al.* [DPRV99] et Alouges [Alo04].

Le schéma de VFRoe nécessite l'utilisation d'une correction entropique. Nous avons proposé dans ce chapitre deux corrections. La première consiste à utiliser le flux de Rusanov lorsqu'une valeur propre associée à un champ vraiment non linéaire s'annule dans une onde régulière. La deuxième correction consiste à ajouter la viscosité suffisante pour éliminer le point sonique. Nous avons de plus démontré que la correction assure la convergence du schéma pour l'équation de Burgers.

Le schéma équilibre est construit de sorte qu'il préserve les états stationnaires. Cette propriété a été illustrée sur des tests numériques. Le contact stationnaire et la solution régulière sont parfaitement résolus. Le chapitre se conclut sur la modélisation d'une bulle monophasique. En appliquant un rapport de pression similaire à celui utilisé dans le chapitre 2, on observe le bon comportement et la robustesse de notre schéma, bien que les variations de pression et de masse volumique soient très importantes.

APPROCHE GALERKIN DISCONTINU POUR LA MAGNÉTOHYDRODYNAMIQUE

Les schémas de volumes finis traditionnels, bien qu'ayant de bonnes propriétés de stabilité, souffrent en général d'une précision insuffisante, même sur maillage fin. Il existe de nombreuses applications des systèmes hyperboliques, pour lesquelles les solutions sont régulières ou présentent des discontinuités de faible amplitude. C'est le cas par exemple de certaines applications en électromagnétisme ou en magnétohydrodynamique (MHD). J'ai eu l'occasion de m'intéresser à ce type d'équations lors du CEMRACS 2008, financé par le projet CALVI [S⁺09]. Ce chapitre reprend certains des résultats obtenus et publiés dans [ABG⁺09].

Les schémas d'éléments finis discontinus, encore appelés Galerkin discontinu, sont un compromis entre les méthodes de volumes finis et les méthodes d'éléments finis [CS01], [HAM⁺04]. On considère un système de lois de conservation à résoudre sur un domaine maillé, éventuellement de façon non structuré. La solution approchée est cherchée dans l'espace des fonctions L^2 , dont la restriction à chaque cellule est polynomiale (l'approximation est donc discontinue aux interfaces des cellules). Un ordre de précision élevé en espace peut être obtenu par un polynôme de degré élevé. À chaque interface, un solveur de Riemann exact ou approché permet de construire un flux numérique, comme dans la méthode des volumes finis. Nous écrivons d'abord les équations sous forme faible au niveau discret en ne discrétisant que la partie spatiale de l'opérateur hyperbolique. Moyennant certaines précautions, il est possible de montrer que le schéma ainsi semi-discrétisé en espace est entropique. Une preuve donnée par Barth [Bar06] sera reprise par la suite, on consultera également les travaux de Wesenberg [Wes03] et Després [Des99].

Après intégration sur chaque cellule, le système semi-discrétisé en espace conduit à un système d'équations différentielles du premier ordre. Il est fréquent d'utiliser une méthode d'intégration en temps d'ordre égal à l'ordre atteint en espace. Notons W_n le vecteur solution (qui est constitué par exemple de tous les coefficients des polynômes sur l'ensemble des mailles) au pas de temps t_n . Les méthodes les plus classiques pour résoudre numériquement le système différentiel sont sans doute celles de Runge-Kutta (RK). On cite par exemple les travaux de Cockburn

et al [CS98] [CS91] [CS01] ou de Burbeau *et al.* [BSB01]. Ces méthodes à un pas approchent la valeur W_{n+1} à l'instant t_{n+1} en utilisant uniquement la valeur approchée W_n . Si la méthode choisie est d'ordre k , il sera nécessaire de faire k appels à la fonction de flux sur toutes les mailles pour évaluer la solution au pas de temps suivant. Aussi, nous nous intéressons aux méthodes d'Adams-Bashforth qui ne nécessitent qu'un appel au flux, en contrepartie d'un stockage des données d'un certain nombre de pas de temps précédents (méthodes multipas [CM84]). L'intégrale du flux entre les temps t_n et t_{n+1} est approchée au moyen d'une interpolation, utilisant les r pas de temps précédents. Ces méthodes à pas multiples sont donc moins coûteuses que l'intégration de type Runge-Kutta. Un autre avantage fondamental de cette méthode est qu'elle facilite le développement d'algorithmes de pas de temps local.

En effet, en règle générale, le pas de temps est calculé en fonction de la taille de la plus petite cellule du maillage. La condition peut être très restrictive si le maillage contient localement de très petites mailles. En 1983, Oshers et Sanders [OS83] propose une méthode de pas de temps local : la solution évolue avec des pas de temps différents en fonction de la taille des cellules. Initialement développée pour une équation scalaire hyperbolique, la méthode est adaptée en 2007 par Müller et Stririba [MS07] pour des méthodes multirésolution (nous nous référons également aux travaux de Barberon *et al.* [BHR03] et de Nguyen [Ngu09]). Ils introduisent la notion de pas de temps macroscopique, relatif aux grosses cellules du maillage. Ce macro pas de temps est divisé en pas de temps élémentaires. À chaque pas de temps élémentaire, seules les cellules d'une certaine taille sont mises à jour. Une fois le macro pas de temps atteint, la solution globale est synchronisée sur la grille entière. Si la proportion de petites cellules n'est pas trop importante, le gain en termes de temps de calcul est significatif. Le schéma est de plus conservatif en temps, ce qui est beaucoup plus difficile à obtenir avec les approches Runge-Kutta (citons néanmoins les résultats de Piperno [Pip06]).

Contrairement aux méthodes d'éléments finis, le schéma Galerkin discontinu n'impose pas la continuité aux interfaces des cellules. Il est donc possible de définir l'ordre d'approximation localement. Si l'approximation est constante par maille, la diffusion induite par le décentrement est suffisante pour assurer la stabilité du schéma. Lorsque des polynômes de degré plus élevé sont utilisés, le schéma produit des oscillations de type phénomène de Gibbs dans les chocs. Dans ce cas il est nécessaire d'utiliser un limiteur de pentes après le calcul des flux pour prévenir ce comportement. La littérature est abondante sur ce sujet, on se réfère par exemple à [KDW08] et [BSB01]. Par la suite, nous proposons un limiteur simple de construction, conservatif et entropique, bien adapté aux problèmes unidimensionnels.

La méthode a été développée pendant le CEMRACS 2008, dans le cadre du projet GaDMHD, en collaboration avec C. Altmann et T. Belat (sous la direction de M. Gutnic, P. Helluy et E. Sonnendrücker). Il s'agissait d'élaborer un code Galerkin discontinu 3D parallèle pour la résolution de systèmes de lois de conservation quelconques. L'approche Galerkin discontinu étant bien adaptée à la modélisation de fluide conducteur, nous nous sommes intéressés au système hyperbolique des équations de la magnétohydrodynamique. Elles se composent des équations d'Euler couplées aux équations de Maxwell, en tenant compte de certaines simplifications

(détaillées dans [Wes03]). Le champ magnétique $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$ évolue selon l'équation d'induction :

$$\partial_t \mathbf{B} + \nabla \times (\mathbf{B} \otimes \mathbf{u}) = 0,$$

où $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ désigne le champ de vitesse. La physique impose par ailleurs que la divergence du champ magnétique est nulle :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0.$$

Cette contrainte traduit l'absence de charge magnétique libre. Or on a :

$$\nabla \cdot (\nabla \times \cdot) \equiv 0,$$

sur un ouvert simplement connexe. Par conséquent, l'équation d'induction implique que la divergence du champ magnétique est constante. Il suffirait donc d'imposer une contrainte de divergence nulle à l'instant initial pour qu'elle soit vraie pour tous les temps.

Or, après discrétisation, des erreurs numériques apparaissent sur la divergence et s'accumulent car le système, bien qu'hyperbolique, possède une valeur propre nulle. Il est possible que le comportement du système devienne non physique. Ce phénomène est étudié dans [BS99] et [BB80]. De nombreuses techniques ont été mises au point pour traiter ce problème, qui est, répétons-le, purement numérique. Une approche classique consiste à introduire dans l'approximation la contrainte de divergence nulle [Ned86] [Jun07]. L'inconvénient est que le modèle n'est alors plus hyperbolique et nécessite une résolution en partie implicite. En 1994, Powell propose de résoudre un système modifié, auquel il ajoute des termes sources proportionnels à $\nabla \cdot \mathbf{B}$ sur les équations de conservation du système de la MHD. Ainsi le système contient une huitième onde, qui correspond au transport des sauts de \mathbf{B} à la vitesse du fluide. Pour plus de détails, on se réfère aux travaux de Powell *et al.* [PRL⁺99], [Pow94], de Dellar [Del01] et Tóth [Tót00]. Inspirés par cette approche, Dedner *et al.* publient en 2002, leur méthode dite « hyperbolic divergence cleaning » [DKK⁺02]. Il s'agit d'ajouter une inconnue supplémentaire, qui couple la contrainte de divergence au système hyperbolique. Les erreurs de divergence sont transportées en dehors du domaine à une vitesse supplémentaire que l'on peut choisir arbitrairement. Le système ainsi corrigé reste hyperbolique, la masse volumique, la quantité de mouvement, l'induction magnétique et l'énergie totale sont également conservées, ce qui n'était pas le cas du modèle de Powell.

Une autre difficulté provient du fait que le système de la MHD idéale n'est pas strictement hyperbolique, au sens où ses valeurs propres peuvent coïncider dans certain cas. Considérons un problème de Riemann, dont la donnée initiale sur le champ magnétique est coplanaire *i.e.* le champ change de sens entre l'état gauche et l'état droit. Dans ce cas, des ondes composées peuvent apparaître. La question de l'unicité de la solution du problème de Riemann se pose également. Les travaux de Torrilhon portent sur le problème de Riemann [Tor03b, Tor03a]. Il propose d'une part un solveur exact pour le système et étudie les conditions d'unicité du problème de Riemann. Afin d'illustrer ce type de comportements dans un cadre simplifié, Brio et Rosenau [BR93] proposent un modèle simplifié 3×3 issu du système de la MHD idéale et obtenu par une méthode de perturbation. Le modèle conserve la pathologie du problème de Riemann complet de la MHD

[Myo96] et facilite la compréhension du phénomène de non-unicité. Une description de ce modèle simplifié sera reprise en fin de chapitre. La solution du problème de Riemann sera détaillée. On insistera en particulier sur la non-unicité des solutions de Lax du problème.

Le plan du chapitre est le suivant.

Dans un premier temps on s'intéresse au schéma Galerkin discontinu (GD), semi-discrétisé en espace, dans le cadre très général d'un système de lois de conservation admettant une entropie de Lax. En utilisant des propriétés de la transformée de Legendre, on prouve que le schéma semi-discrétisé en espace est entropique, si le flux numérique choisi vérifie certaines propriétés [Bar06]. L'originalité de notre approche réside dans la discrétisation en temps retenue. Pour cela, nous comparons les méthodes d'intégration de Runge-Kutta et d'Adams-Bashforth. Le choix se porte sur cette dernière méthode qui nous permet d'appliquer une technique de pas de temps local. La mise en œuvre des pas de temps locaux est ensuite détaillée et illustrée par des tests numériques. La programmation de la méthode est très générale, elle a été réalisée dans le code tridimensionnel CM2 (Code Multi-physique Multi-échelle) pour un système de lois de conservation et un flux numérique quelconque.

La seconde partie du chapitre traite plus particulièrement des équations de la MHD. Nous décidons d'adopter la technique de « nettoyage » de la divergence car elle permet de rester dans un cadre hyperbolique et donc d'utiliser un schéma explicite. Nous proposons aussi une étude mathématique et numérique du modèle simplifié de Myong. Pour finir, différents tests numériques sont proposés pour valider notre schéma GD. La convergence du schéma est étudiée sur des cas uni- et bi-dimensionnels. La précision est illustrée sur des problèmes classiques de la MHD.

4.1 Discrétisation en espace

On considère un système de lois de conservation

$$\partial_t W + \nabla \cdot f(W) = 0, \quad (4.1)$$

où $W(x, t) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^m$ désigne le vecteur de variables conservatives et $f(W) : \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^{m \times d}$ est le vecteur de flux. Le système est muni d'une condition initiale :

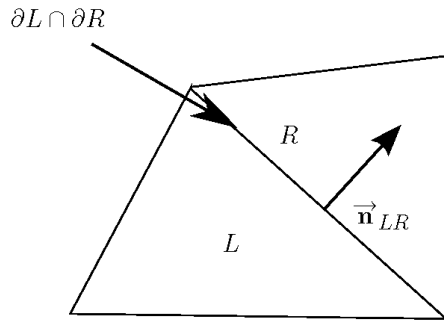
$$W(x, t = 0) = W_0(x).$$

Les solutions du système (4.1) peuvent devenir discontinues en temps fini, même si la condition initiale est très régulière. Il faut donc introduire la notion de solution faible. Or ces solutions faibles ne sont en général pas uniques. Un critère supplémentaire permet de sélectionner une solution. On considère le critère d'entropie de Lax. Pour cela, on suppose qu'il est possible formellement d'écrire une loi de conservation supplémentaire :

$$\partial_t S(W) + \nabla \cdot G(W) = 0. \quad (4.2)$$

Ceci est possible lorsque :

$$\nabla S \nabla f = \nabla G. \quad (4.3)$$

FIG. 4.1.1 – Détail de la triangulation \mathcal{T} .

On suppose S être une fonction strictement convexe de W . La fonction S est appelée entropie de Lax du système (4.1) et G le flux d'entropie. Dans les discontinuités, on ajoute les contraintes suivantes :

$$\partial_t S(W) + \nabla \cdot G(W) \leq 0, \quad (4.4)$$

au sens faible.

La méthode Galerkin discontinu (GD) correspond à une méthode d'éléments finis, pour laquelle aucune condition de continuité n'est supposée aux interfaces des éléments. On introduit donc un maillage \mathcal{T} du domaine \mathbb{R}^d constitué de cellules L vérifiant :

- $\forall L \in \mathcal{T}$, L est un ouvert de \mathbb{R}^d ,
- $\forall (L, R) \in \mathcal{T} \times \mathcal{T}$, $L \neq R \Rightarrow L \cap R = \emptyset$,
- $\bigcup_{L \in \mathcal{T}} \bar{L} = \mathbb{R}^d$.

On note h le paramètre tel que :

$$h = \sup_{L \in \mathcal{T}} \frac{|L|}{|\partial L|}, \quad (4.5)$$

où $|L|$ désigne le volume de la cellule L et $|\partial L|$ la surface du bord de L . Le vecteur normal orienté de la cellule L vers sa cellule voisine R , le long de l'arête $\partial L \cap \partial R$, est noté $\mathbf{n}_{L,R}$ (voir figure 4.1.1). On cherche une approximation de la solution W dans chaque cellule L en l'approchant par des polynômes. Puisqu'aucune condition de continuité n'est imposée aux interfaces, l'approximation globale est discontinue aux frontières ∂L des cellules. Soit $\mathbb{P}^k(L)$ l'espace des polynômes de degré k définis sur la cellule L . Avant de discrétiser, nous construisons une forme faible des équations adaptée à la méthode GD. Nous introduisons le vecteur φ de variables entropiques défini par

$$\nabla_W S(W) = \varphi. \quad (4.6)$$

La forme faible s'obtient en multipliant à un instant donné (4.1) par une fonction test ψ et en intégrant par partie sur un élément L de \mathcal{T} . Il s'agit de trouver φ dans chaque volume L tel que, à chaque instant et pour tout ψ , on ait :

$$\begin{aligned} & \int_L \partial_t W(\varphi) \cdot \psi dx \\ & + \sum_{R \in \mathcal{V}(L)} \int_{\partial L \cap \partial R} f(W(\varphi_L)) \cdot \mathbf{n}_{L,R} \psi_L d\nu - \int_L f^i(W(\varphi)) \partial_i \psi dx = 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

La notation $\mathcal{V}(L)$ désigne l'ensemble des cellules adjacentes à la cellule L . On introduit la notation ψ_L dans l'intégrale de bords car la fonction test ψ est éventuellement discontinue à la traversée de la frontière ∂L . À cause des discontinuités éventuelles, il est nécessaire de remplacer le flux $f(W(\varphi))$ par un flux numérique :

$$f(W(\varphi)) \cdot \mathbf{n}_{L,R} \simeq f(W(\varphi_L), W(\varphi_R), \mathbf{n}_{L,R}). \quad (4.8)$$

La forme faible du problème d'évolution consiste donc à trouver un vecteur de variables entropiques φ dépendant de (x, t) , éventuellement discontinu, tel que pour tout vecteur test ψ , et toute cellule L , on ait

$$\begin{aligned} & \int_L \partial_t W(\varphi) \cdot \psi dx \\ & + \sum_{R \in \mathcal{V}(L)} \int_{\partial L \cap \partial R} f(W(\varphi_L), W(\varphi_R), \mathbf{n}_{L,R}) \psi_L d\nu \\ & - \int_L f^i(W(\varphi)) \partial_i \psi dx = 0. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Nous passons maintenant à la discrétisation de la forme faible (4.9). Nous utilisons la même notation pour la solution exacte et son approximation. À chaque instant t , l'inconnue discrète φ est décomposée sur une base $(\mathbf{e}_{L,i})$ de l'espace $\mathbb{P}^k(L)$:

$$\varphi(x, t) = \sum_{j=1}^k \varphi_{L,j}(t) \mathbf{e}_{L,j}(x). \quad (4.10)$$

Nous supposons donc que les variables entropiques sont polynomiales par morceaux sur chaque cellule, à chaque instant, c'est-à-dire que

$$\varphi|_L \in C^1([0, T], \mathbb{P}^k(L)^m),$$

$T \in \mathbb{R}$ désignant le temps final. En choisissant $\psi = \mathbf{e}_{L,i}$, $i = 1, \dots, k$, le problème discret s'écrit, pour toute cellule $L \in \mathcal{T}$:

$$\begin{aligned} & \int_L \nabla_\varphi W(\varphi) \varphi'(t) \mathbf{e}_{L,j} \cdot \mathbf{e}_{L,i} \\ & + \sum_{R \in \mathcal{V}(L)} \int_{\partial L \cap \partial R} f(W(\varphi_{L,j} \mathbf{e}_{L,j}), W(\varphi_{R,j} \mathbf{e}_{R,j}), \mathbf{n}_{L,R}) \mathbf{e}_{L,i} \\ & - \int_L f^k \cdot \partial_k \mathbf{e}_{L,i} = 0, \end{aligned} \quad (4.11)$$

où $\mathcal{V}(L)$ désigne l'ensemble des cellules adjacentes de la maille L .

On souhaite prouver que le schéma Galerkin discontinu semi-discrétisé en espace vérifie une inégalité d'entropie discrète. Pour ce faire, on s'appuie sur une preuve donnée par Barth dans [Bar06], qui utilise la notion de transformée de Legendre. Dans le paragraphe suivant sont introduites la définition de la transformée de Legendre et les propriétés nécessaires à la démonstration. Une description plus détaillée de ces outils sera menée en chapitre 6.

Définition 4.1.1. Soit $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction régulière et strictement convexe. On note f^* sa conjuguée définie par :

$$\begin{aligned} f^* : s \in \mathbb{R}^m &\rightarrow \mathbb{R} \\ s &\mapsto \sup_{x \in \mathbb{R}^m} \{s \cdot x - f(x)\}. \end{aligned}$$

L'application $f \mapsto f^*$ est appelée transformée de Legendre.

Si f est deux fois différentiable et strictement convexe telle que :

$$\frac{f(x)}{\|x\|} \xrightarrow{\|x\| \rightarrow +\infty} +\infty,$$

alors le sup est atteint *i.e.*

$$f^*(s) = s \cdot x - f(x), \quad (4.12)$$

avec $\nabla f(x) = s$. On en déduit que :

$$\nabla f^*(s) = x \Leftrightarrow \nabla f(x) = s. \quad (4.13)$$

L'entropie $S(W)$, étant une fonction convexe de W , vérifie :

$$S^*(\varphi) = W \cdot \varphi - S(W). \quad (4.14)$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \nabla_W S(W) &= \varphi, \\ \nabla_\varphi S^*(\varphi) &= W. \end{aligned} \quad (4.15)$$

On introduit également la fonction $G^*(\varphi)$ donnée par :

$$G^*(\varphi) = f(W) \cdot \varphi - G(W), \quad (4.16)$$

et de fait

$$f(W) = \nabla_\varphi G^*(\varphi). \quad (4.17)$$

Malgré la notation, signalons que la relation (4.16) ne définit pas une transformée de Legendre, puisque la transformée de Legendre de G s'écrirait

$$G^*(\varphi) = W \cdot \varphi - G(W).$$

Remarque 4.1.2. Nous attirons l'attention du lecteur sur la subtile différence entre le symbole $*$ (qui caractérise la transformée de Legendre) et le symbole \star .

Théorème 4.1.3. [Bar06] Soit φ une solution obtenue par le schéma Galerkin discontinu (4.11), que l'on suppose exister pendant un certain temps. On suppose de plus que le flux numérique $f(W_L, W_R, \mathbf{n})$ satisfait la condition :

$$(\varphi_R - \varphi_L) \cdot (f(W_L, W_R, \mathbf{n}) - f(\varphi(\eta)) \cdot \mathbf{n}) \leq 0, \quad \forall \eta \in [0, 1], \quad (4.18)$$

où $\varphi(\eta) = \eta\varphi_R + (1 - \eta)\varphi_L$.

La solution numérique $W(\varphi)$ satisfait alors l'inégalité d'entropie semi-discrète locale :

$$\int_L \partial_t S(W) dx + \int_{\partial L} G(W_L, W_R, \mathbf{n}) d\nu \leq 0, \quad \forall L \in \mathcal{T}, \quad (4.19)$$

où le flux numérique d'entropie est défini par (4.22). Par ailleurs, on a l'inégalité d'entropie semi-discrète globale :

$$\partial_t \int_{\mathbb{R}^d} S(W) dx \leq 0. \quad (4.20)$$

Remarque 4.1.4. En général, sauf à l'ordre 1, l'équation différentielle n'a pas de solutions pour tous les temps. En effet la masse volumique ρ (qui intervient dans le système (4.1)) peut devenir négative à cause de phénomènes de Gibbs.

Démonstration. On considère la formulation (4.11), en prenant $\psi = \varphi$ comme fonction test :

$$\int_L \partial_t W \cdot \varphi dx - \int_L f(W) \partial_{x_i} \varphi dx + \int_{\partial L} f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot \varphi_L d\nu = 0. \quad (4.21)$$

Or on a les relations $\varphi = \nabla_W S(W)$ et $f(W) = \nabla_\varphi G^*(\varphi)$. Il s'ensuit :

$$\int_L \nabla_W S(W) \partial_t W dx - \int_L \nabla_\varphi G^*(\varphi) \partial_{x_i} \varphi dx + \int_{\partial L} f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot \varphi_L d\nu = 0,$$

soit encore :

$$\int_L \partial_t S(W) dx + \int_{\partial L} f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot \varphi_L d\nu - \int_L \nabla_\varphi G^*(\varphi) dx = 0.$$

Par la formule de Stokes, il vient :

$$\int_L \partial_t S(W) dx + \int_{\partial L} f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot \varphi_L d\nu - \int_{\partial L} G^*(\varphi_L) \cdot \mathbf{n} d\nu = 0$$

Il apparaît donc naturellement un flux numérique d'entropie

$$G(W_L, W_R, \mathbf{n}) := f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot \varphi_L - G^*(\varphi_L) \cdot \mathbf{n}. \quad (4.22)$$

que l'on décompose en une partie conservative S et une autre dissipative D , *i.e.*

$$G(W_L, W_R, \mathbf{n}) = S(W_L, W_R, \mathbf{n}) + D(W_L, W_R, \mathbf{n}),$$

où

$$S(W_L, W_R, \mathbf{n}) = F(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot \frac{\varphi_L + \varphi_R}{2} - \frac{G^*(\varphi_L) + G^*(\varphi_R)}{2} \cdot \mathbf{n}, \quad (4.23)$$

et

$$\begin{aligned} D(W_L, W_R, \mathbf{n}) &= -\frac{1}{2} (f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot (\varphi_R - \varphi_L) \\ &\quad - (G^*(\varphi_R) - G^*(\varphi_L)) \cdot \mathbf{n}). \end{aligned} \quad (4.24)$$

On observe que le flux $S(W_L, W_R, \mathbf{n})$ est une approximation consistante et conservative du flux d'entropie G . En effet la consistance se déduit de la relation (4.16) et s'écrit :

$$S(W, W, \mathbf{n}) = (f(W, W, \mathbf{n}) \cdot \varphi - G^*(\varphi)) \cdot \mathbf{n} = G(W).$$

La conservation dérive naturellement de (4.23) :

$$S(W_L, W_R, \mathbf{n}) = -S(W_R, W_L, -\mathbf{n}).$$

Pour que le schéma vérifie l'inégalité d'entropie discrète (4.19), il suffit de déterminer des conditions suffisantes sur le flux numérique $f(W_L, W_R, \mathbf{n})$ de sorte que :

$$D(W_L, W_R, \mathbf{n}) \geq 0.$$

Or le flux D peut être exprimé comme suit :

$$\begin{aligned} D(W_L, W_R, \mathbf{n}) &= -\frac{1}{2} (f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \cdot (\varphi_R - \varphi_L) - (G^*(\varphi_R) - G^*(\varphi_L)) \cdot \mathbf{n}) \\ &= -\frac{1}{2} (\varphi_R - \varphi_L) \cdot \left(f(W_L, W_R, \mathbf{n}) - \int_0^1 \nabla_\varphi G^*(\varphi(\eta)) \cdot \mathbf{n} d\eta \right) \\ &= -\frac{1}{2} (\varphi_R - \varphi_L) \cdot \left(f(W_L, W_R, \mathbf{n}) - \int_0^1 f(\varphi(\eta)) \cdot \mathbf{n} d\eta \right) \\ &= -\frac{1}{2} \left(\int_0^1 \varphi'(\eta) \cdot (f(W_L, W_R, \mathbf{n}) - f(W(\varphi(\eta)))) \cdot \mathbf{n} d\eta \right). \end{aligned}$$

Une condition suffisante pour que le flux dissipatif $D(W_L, W_R, \mathbf{n})$ soit positif est donc que :

$$(\varphi_R - \varphi_L) \cdot \left(f(W_L, W_R, \mathbf{n}) - \int_0^1 f(\varphi(\eta)) \cdot \mathbf{n} \right) \leq 0, \quad \forall \eta \in [0, 1], \quad (4.18)$$

condition satisfaite par hypothèse. Le schéma Galerkin discontinu semi-discrétisé en espace vérifie donc l'inégalité d'entropie locale (4.19). En sommant cette inégalité sur toutes les cellules de la triangulation, les termes de flux $S(W_L, W_R, \mathbf{n})$ se télescopent, on obtient l'inégalité d'entropie globale (4.20).

Pour que la démonstration soit correcte, il faut considérer un flux numérique vérifiant la condition (4.18). Dans [Bar06], l'auteur propose notamment le flux de Lax-Friedrichs. Le flux de Rusanov [Rus61] satisfait également cette condition. Notons $A(W, \mathbf{n}) = \partial_W f^i(W) \cdot \mathbf{n}_i$ la matrice jacobienne du flux. On rappelle que le flux de Rusanov est donné par :

$$F(W_L, W_R, \mathbf{n}) = \frac{f(W_L) + f(W_R)}{2} \cdot \mathbf{n} - \alpha \frac{W_R - W_L}{2},$$

où

$$\alpha = \max_{\eta} (\rho(A(W(\varphi(\eta))), \mathbf{n})), \quad (4.25)$$

pour $\varphi(\eta) = \eta\varphi_R + (1 - \eta)\varphi_L$, $\eta \in [0, 1]$, et $\rho(A)$ désigne le rayon spectral de A . Muni de ce flux numérique, le schéma semi-discrétisé en espace vérifie l'inégalité d'entropie discrète (4.20). \square

Remarque 4.1.5. Le calcul de α suivant la définition (4.25) est toutefois compliqué et est remplacé, en pratique, par :

$$\alpha = \max(\rho(A(W_L, \mathbf{n})), \rho(A(W_R, \mathbf{n}))).$$

Observons que la matrice de masse $\int_L \nabla_\varphi W(\varphi) \varphi'(t) \mathbf{e}_{L,j} \cdot \mathbf{e}_{L,i}$, issue de la formulation (4.11), dépend du temps (notons d'ailleurs que $\nabla_\varphi W(\varphi)$ est la matrice hessienne de S^* , et par conséquent symétrique définie positive). Il est donc nécessaire d'évaluer puis d'inverser cette matrice à chaque pas de temps. Cette matrice est locale à chaque cellule L , mais l'opération reste relativement coûteuse. On choisit de travailler sur le vecteur de variables conservatives W , afin que la matrice de masse soit constante au cours du temps, comme nous allons le voir. Notons également que les résultats numériques obtenus en travaillant en variables entropiques sont tout à fait comparables à ceux issus de la formulation conservative. Détaillons à présent la formulation Galerkin discontinu en variables conservatives.

La formulation Galerkin discontinu s'obtient toujours en multipliant (4.1) par une fonction test $\psi \in (\mathbb{P}^k(L))^m$ et en intégrant par partie sur un élément L de \mathcal{T} . Cette fois-ci on décompose W , et non pas φ , sur la base $(\mathbf{e}_{L,i})$ de l'espace $\mathbb{P}^k(L)$:

$$W(x, t) = \sum_{j=1}^k W_{L,j}(t) \mathbf{e}_{L,j}(x). \quad (4.26)$$

En choisissant $\psi = \mathbf{e}_{L,i}$, $i = 1, \dots, k$, la formulation faible s'écrit, pour toute cellule $L \in \mathcal{T}$:

$$\begin{aligned} W'_{L,j}(t) \int_L \mathbf{e}_{L,j} \cdot \mathbf{e}_{L,i} + \sum_{R \in \mathcal{V}(L)} \int_{\partial L \cap \partial R} f(W_{L,j} \mathbf{e}_{L,j}, W_{R,j} \mathbf{e}_{R,j}, \mathbf{n}_{L,R}) \mathbf{e}_{L,i} \\ - \int_L f^k \cdot \partial_k \mathbf{e}_{L,i} = 0. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Remarque 4.1.6. Le calcul des intégrales sur les cellules ou les arêtes est obtenu par intégration de Gauss.

Le terme $\int_L \mathbf{e}_{L,j} \cdot \mathbf{e}_{L,i}$ de la formulation faible (4.27) correspond à la matrice de masse qu'il faut inverser en début de calcul. Lorsque l'espace d'approximation est l'espace des polynômes de degré k , la matrice peut prendre une forme simple. Dans le cas unidimensionnel, on peut choisir les polynômes de Legendre P_l comme fonctions de base. Puisque cette base est orthogonale dans L^2 , on a :

$$\int_{-1}^1 P_l(s) P_{l'}(s) ds = \left(\frac{2}{2l+1} \right) \delta_{ll'}.$$

La matrice de masse est donc diagonale. Pour $x \in L = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$, on exprime la solution approchée W_L par :

$$W(x, t) = \sum_{l=0}^k W_L^l(t) \omega_L^l(x),$$

avec $\omega_L^l(x) = P_l\left(\frac{2(x-x_j)}{h}\right)$ et $h = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$ le pas d'espace. La condition initiale devient :

$$W_L^l(0) = \frac{2l+1}{h} \int_L W_0(x) \omega_L^l(x) dx, \quad \forall l = 0, \dots, k,$$

et la formulation faible (4.27) s'écrit :

$$\frac{d}{dt} W_L^l(t) + \frac{2l+1}{h} \left(\int_{\partial L \cap \partial R} f(W_L, W_R, \mathbf{n}) \omega_L^l - \int_L f(W(x, t)) \partial_x \omega_L^l(x) dx \right) = 0.$$

On a de plus $\omega_l(x_{j+1/2}) = P_l(1) = 1$ et $\omega_l(x_{j-1/2}) = P_l(-1) = (-1)^l$.

Quelque soit la forme de la matrice de masse, après son inversion, la formulation Galerkin discontinu (4.27) correspond à un système d'équations différentielles ordinaires, que l'on écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} W_L(t) &= \mathcal{L}(W_L(t)), & t \in [0, T], \\ W_L(t=0) &= W_0. \end{aligned} \quad (4.28)$$

4.2 Discrétisation en temps

Il s'agit maintenant de résoudre le système d'équations différentielles (4.28) numériquement. Si l'approximation en espace est constante par maille et l'intégration en temps est réalisée par une méthode d'Euler explicite, la formulation Galerkin discontinu revient à un schéma de volumes finis. Si l'approximation en espace est d'ordre plus élevé, il faut augmenter l'ordre de l'approximation en temps en conséquence, pour des raisons de stabilité et de précision. Les méthodes les plus couramment utilisées sont celles du type Runge-Kutta. On se réfère notamment aux travaux de Cockburn *et al.* [CS91, CS98, CS01], de Kubatko *et al.* [KDW08] et Burbeau *et al.* [BSB01]. Ces méthodes sont stables et permettent d'atteindre des ordres élevés. La condition de stabilité des schémas GD avec discrétisation en temps par Runge-Kutta est également établie. Ces méthodes ne sont toutefois pas optimales : le calcul de la solution sur un pas de temps nécessite k appels à la fonction de flux (si k est l'ordre de la méthode). On se propose d'utiliser une approche multipas de type Adams-Bashforth, qui ne nécessite qu'un calcul de flux par pas de temps. Cette méthode est de plus bien adaptée à l'usage de pas de temps locaux. En règle générale, le pas de temps est établi sur la plus petite cellule du maillage. L'approche à pas de temps local consiste à calculer la solution en utilisant différents pas de temps selon le diamètre local des mailles.

4.2.1 Intégration par la méthode d'Adams-Bashforth

On rappelle brièvement la mise en œuvre de la méthode de Runge-Kutta dans le cadre Galerkin discontinu, avant de décrire celle d'Adams-Bashforth.

Soit $(t_n)_n$ une subdivision de $[0, T]$:

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T.$$

On note $\Delta t_{RK} = t_n - t_{n-1}$ le pas de temps relatif à la méthode de Runge-Kutta. On désigne par k l'ordre de la méthode et l'approximation en espace est effectuée par des polynômes de degré $p = k - 1$.

Les méthodes RK sont des méthodes à un pas

$$W_L^{n+1} = W_L^n + \Delta t_{RK} \Phi(t_n, W_L^n, \Delta t_{RK}),$$

Si la méthode est d'ordre k , l'évaluation de Φ nécessite k évaluations des flux. Supposons \mathcal{L} L -lipschitzienne en W_L . Alors Φ est également lipschitzienne.

La méthode étant explicite, les pas de temps Δt_{RK} et d'espace h doivent satisfaire une condition CFL pour garantir la stabilité du schéma GD. Quand Δt_{RK} est suffisamment petit, la condition de stabilité de la méthode est de la forme :

$$\Delta t_{RK} \leq \frac{1}{L},$$

où L désigne la constante de Lipschitz de la fonction \mathcal{L} . Plaçons-nous par ailleurs dans le cas linéaire $f(W) = cW$, où c est la vitesse d'onde. Cockburn et Shu [CS01] propose une estimation de la condition CFL de la forme

$$|c| \frac{\Delta t_{RK}}{h} \leq \frac{1}{2p+1}.$$

Ceci nous donne un ordre de grandeur de la constante L :

$$L \simeq \frac{c(2p+1)}{h}.$$

Pour les cas $p = 0$ et $p = 1$, la condition s'avère exacte (on vérifie facilement la condition pour $p = 0$, le cas $p = 1$ étant démontré dans [CS91]). Pour $p \geq 2$ la quantité $\frac{1}{2p+1}$ est moins de 5% plus petite que les conditions CFL obtenues numériquement par Cockburn et Shu (voir table 2.2 de [CS01]).

On détaille par la suite la méthode à pas multiples d'Adams-Bashforth. Considérons le système différentiel (4.28) issu de la formulation faible (4.27) après inversion de la matrice de masse. En intégrant le système entre t_n et t_{n+1} , il vient :

$$W_L^{n+1} - W_L^n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}(W_L(t)) dt.$$

La méthode d'Adams Bashforth consiste à approcher l'intégrande du membre de droite par un polynôme d'interpolation (de Lagrange par exemple). Le polynôme P_r de degré r est défini par :

$$P_r(t_{n-i}) = \mathcal{L}(W_L(t_{n-i})), \quad \forall i = 0, \dots, r, \quad (4.29)$$

$$P_r(t) = \sum_{0 \leq i \leq r} \mathcal{L}(W_L(t_{n-i})) L_i(t), \quad (4.30)$$

où $L_i(t) = \prod_{\substack{0 \leq j \leq r \\ j \neq i}} \frac{t - t_{n-j}}{t_{n-i} - t_{n-j}}$ désignent les fonctions de bases de Lagrange. On

introduit également les coefficients :

$$b_i = \frac{1}{\Delta t_{AB}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} L_i(t) dt.$$

Ordre A-B	β
$r + 1 = 1$	1
$r + 1 = 2$	2
$r + 1 = 3$	3.66
$r + 1 = 4$	6.66
$r + 1 = 5$	12.24

FIG. 4.2.1 – Conditions de stabilité de la méthode d’Adams-Bashforth.

L’algorithme de la méthode d’Adams-Bashforth à $r + 1$ pas s’écrit :

$$\begin{aligned}
 W_L^{n+1} &= W_L^n + \Delta t_{AB} \sum_{0 \leq i \leq r} b_i \mathcal{L}(W_L(t_{n-i})), \quad n \geq r, \\
 t_{n+1} &= t_n + \Delta t_{AB}.
 \end{aligned}$$

Algorithme 1: Discrétisation en temps par une méthode d’Adams-Bashforth

On observe qu’il est nécessaire d’initialiser les premières valeurs W_L^0, \dots, W_L^r , on utilise alors une méthode de Runge-Kutta. Une seule évaluation de la fonction \mathcal{L} est nécessaire à chaque étape contrairement à une méthode de Runge-Kutta d’ordre k . Afin de comparer équitablement les méthodes, on introduit donc une relation entre le pas de temps de la méthode RK et de la méthode AB :

$$\Delta t_{RK} = k \Delta t_{AB}.$$

En contrepartie, la condition de stabilité de la méthode Adams-Bashforth est plus restrictive que celle de Runge-Kutta. En effet la méthode est stable s’il existe β tel que :

$$\forall n, \sum_{i=0}^r |b_i| \leq \beta.$$

On reproduit dans la table 4.2.1 les valeurs β correspondant à différents ordres de la méthode d’Adams-Bashforth [CM84]. Dans le cas linéaire $f(W) = cW$, on en déduit que la condition de stabilité du schéma Galerkin discontinu couplé à Adams-Bashforth est sans doute :

$$\Delta t_{AB} \leq \frac{h}{|c|(2p+1)\beta} \simeq \frac{1}{L\beta}.$$

On voit donc que la méthode d’Adams-Bashforth est compétitive comparé à Runge-Kutta tant que $\beta \simeq k$. En pratique on se limitera le plus souvent au cas $r = 2$, ce qui correspond à une méthode d’intégration en temps d’ordre $k = 3$.

On détaille maintenant la discrétisation en temps du schéma Galerkin discontinu par Adams-Bashforth. On suppose la solution approchée à certains temps

$$t^0 < t^1 < \dots < t^n < \dots$$

par une suite d'éléments $W^n(\cdot) \simeq W(t^n, \cdot) \in \mathcal{E}_h$. Après intégration en temps de la formule (4.27), il vient :

$$\begin{aligned} (W_{L,j}(t^{n+1}) - W_{L,j}(t^n)) \int_L \mathbf{e}_{L,j} \cdot \mathbf{e}_{L,i} dx + \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_{R \in \mathcal{V}(L)} \int_{\partial L \cap \partial R} f(W_{L,j} \mathbf{e}_{L,j}, W_{R,j} \mathbf{e}_{R,j}, \mathbf{n}_{L,R}) \mathbf{e}_{L,i} d\nu dt \\ - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_L f^k \cdot \partial_k \mathbf{e}_{L,i} dx dt = 0. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Les termes de bords sont encore appelés flux et sont notés :

$$F_{L/R,i}(t) = \int_{\partial L \cap \partial R} f(W_{L,j} \mathbf{e}_{L,j}, W_{R,j} \mathbf{e}_{R,j}, \mathbf{n}_{L,R}) \mathbf{e}_{L,i} d\nu. \quad (4.32)$$

Les intégrations en temps sur les cellules sont les termes sources :

$$S_{L,i}(t) = \int_L f^k \cdot \partial_k \mathbf{e}_{L,i} dx. \quad (4.33)$$

La formulation faible (4.27) s'écrit alors de façon équivalente :

$$\begin{aligned} (W_{L,j}(t^{n+1}) - W_{L,j}(t^n)) \int_L \mathbf{e}_{L,j} \cdot \mathbf{e}_{L,i} dx + \\ \sum_{R \in \mathcal{V}(L)} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{L/R,i}(t) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} S_{L,i}(t) dt = 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

La méthode d'Adams-Bashforth nécessite la construction de polynômes d'interpolation du flux et des termes sources, utilisant $r + 1$ points d'interpolation. Nous introduisons donc des polynômes \tilde{F} et \tilde{S} qui vérifient :

$$\tilde{F}_{L/R,i}(t^{n-l}) = F_{L/R,i}(t^{n-l}), \quad (4.35)$$

$$\tilde{S}_{L,i}(t^{n-l}) = S_{L,i}(t^{n-l}), \quad (4.36)$$

pour $l = 0 \dots r$.

En pratique, il faut stocker les flux $F_{L/R}$ aux arêtes et les termes sources S_L dans les cellules, aux $r + 1$ pas de temps précédents. La méthode requiert également une initialisation des r premiers pas par une méthode d'Euler ou de Runge-Kutta par exemple (les illustrations numériques proposées en paragraphe 4.5 utilisent une initialisation par une méthode d'Euler). L'intégration en temps des termes sources et des termes de bords est obtenue par intégration exacte de $\tilde{F}_{L/R,i}(t)$ et $\tilde{S}_{L,i}(t)$ sur l'intervalle $[t^n, t^{n+1}]$:

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial L \cap \partial R} f(W_{L,j} \mathbf{e}_{L,j}, W_{R,j} \mathbf{e}_{R,j}, \mathbf{n}_{L,R}) \mathbf{e}_{L,i} d\nu dt \simeq \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \tilde{F}_{L/R,i}(t) dt, \quad (4.37) \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_L f^k \cdot \partial_k \mathbf{e}_{L,i} dx dt \simeq \int_{t^n}^{t^{n+1}} \tilde{S}_{L,i}(t) dt \quad (4.38) \end{aligned}$$

Nous allons voir dans le paragraphe suivant que l'intégration en temps par la méthode d'Adams-Bashforth facilite l'usage d'une méthode de pas de temps local.

4.2.2 Méthode de pas de temps local

Dans [OS83], Osher et Sanders présentent le concept de schéma à pas de temps local : la solution évolue avec des pas de temps différents contrôlés localement par le pas d'espace. Une même approche est développée par Barberon *et al.* [BHR03]. Les travaux de Müller et Stiriba [MS07] introduisent la notion de pas de temps macroscopique, adapté aux grosses cellules du maillage. Ce pas de temps est décomposé en sous-pas de temps (que l'on appelle « micro » pas de temps) correspondants aux cellules plus fines. À chaque « micro » pas, seules les cellules d'une certaine taille sont traitées. La solution est synchronisée sur la grille tout entière une fois le « macro » pas de temps atteint.

Dans ce paragraphe, on détaille le principe de la méthode de pas de temps local. Le gain en temps de calcul est illustré sur des exemples.

Calcul des pas de temps

Avec une méthode standard à un pas, le pas de temps est déterminé par la plus petite cellule :

$$\Delta t = CFL \frac{h_{\min}}{\lambda_{\max}},$$

où λ_{\max} désigne la plus grande vitesse d'onde du système. Or, dans de nombreuses applications, il est important de pouvoir traiter de façon efficace des calculs sur des maillages contenant des grosses et des petites cellules. Aussi est-il préférable d'utiliser différents pas de temps d'une cellule à l'autre. À chaque cellule L est attribué un niveau de CFL, déterminé sur un critère géométrique. On définit :

$$h_L = \frac{|L|}{|\partial L|}, \quad (4.39)$$

$$h_{\min} = \min_{L \in \mathcal{T}} h_L, \quad (4.40)$$

$$h_{\max} = \max_{L \in \mathcal{T}} h_L. \quad (4.41)$$

Définition 4.2.1. Une cellule L est dite de niveau n si

$$2^n h_{\min} \leq h_L < 2^{n+1} h_{\min}. \quad (4.42)$$

On note $level(L) = n$.

Les plus petites cellules sont donc de niveau $n = 0$ et les plus grandes de niveau :

$$N = \left\lceil \log_2 \left(\frac{h_{\max}}{h_{\min}} \right) \right\rceil.$$

Définition 4.2.2. Le niveau de l'arête $\partial L \cap \partial R = L/R$ est donné par :

$$level(L/R) := \min(level(L), level(R)). \quad (4.43)$$

Le macro pas de temps Δt associé aux grandes cellules vérifie :

$$\Delta t = CFL \frac{h_{\max}}{h_{\min}} 2^N.$$

On décide de plus que :

$$\Delta t \leq CFL \frac{h_{\max}}{\lambda_{\max}}.$$

Calcul des flux numériques et synchronisation

L'algorithme en temps se déroule comme suit :

Pour i de 1 à 2^N **faire**
 Soit j le plus grand entier tel que 2^j divise i .
Pour Pour toutes les arêtes L/R de niveau $\leq j$ **faire**
 Intégrer le terme $F_{L/R}$ sur un intervalle de temps de longueur $2^{j-N}\Delta t$.
 Distribuer aux cellules L et R .
Fin Pour
Pour Pour toutes les cellules L de niveau $\leq j$ **faire**
 Intégrer le terme source S_L sur un intervalle de temps de longueur $2^{j-N}\Delta t$.
 Distribuer aux cellules correspondantes.
Fin Pour
 Mettre à jour uniquement les cellules de niveau $\leq j$.
Fin Pour

Algorithme 2: Méthode de pas de temps local.

De cette manière, les flux sont calculés plus de fois sur les petites arêtes que sur les grandes mais sont toujours distribués aux cellules adjacentes de sorte que le schéma reste conservatif en temps.

Il faut noter qu'à l'interface de deux mailles de niveaux différents, l'approche d'Osher-Sanders, que nous utilisons, n'est pas consistante [MS07] [TW06]. En effet, la solution approchée au temps $n + 1$ n'est pas mise à jour à tous les micro-pas de temps. Les flux numériques doivent alors être calculés à partir de la solution W^n existante d'un micro-pas précédent. Oshers-Sanders [OS83] et Müller-Stiriba [MS07] proposent deux approches illustrées en figures 4.2.2 et 4.2.3. La méthode de Müller-Stiriba [MS07] est plus coûteuse mais consistante. En pratique, les résultats obtenus sont cependant très similaires. Le lecteur pourra consulter [Ngu09] pour de plus amples détails sur les techniques de pas de temps local et les calculs de flux dans un contexte multi-échelle.

La première méthode [OS83] consiste à utiliser les solutions approchées obtenues au précédent macro pas de temps. Au micro pas de temps δt_0 , seule la solution du niveau $k = 0$ est mise à jour. Au deuxième micro pas de temps, il y a un changement de niveau entre les cellules C_i et C_{i+1} . Les flux sont calculés à partir de l'instant t^n pour la cellule C_{i+1} et à l'instant $t^n + \delta t_0$ pour la maille C_i . Le processus est itéré selon l'algorithme 2. Il est démontré dans [TW06] que cette méthode n'est pas consistante.

L'approche développée dans [MS07] permet d'améliorer la précision du schéma. Elle consiste à calculer, aux pas de temps intermédiaires, les solutions approchées entre deux cellules de niveaux différents. Au temps $t^n + \delta t_0$, la solution $w_i^{n,(1)}$ est mise à jour, de même la solution $w_{i+1}^{n,(1)}$ est actualisée avec le micro pas de temps δt_0 . Au micro pas de temps suivant les valeurs sont synchronisées : la solution $w_{i+1}^{n,(2)}$ est alors mise à jour avec le flux numérique exact. À la fin de la boucle

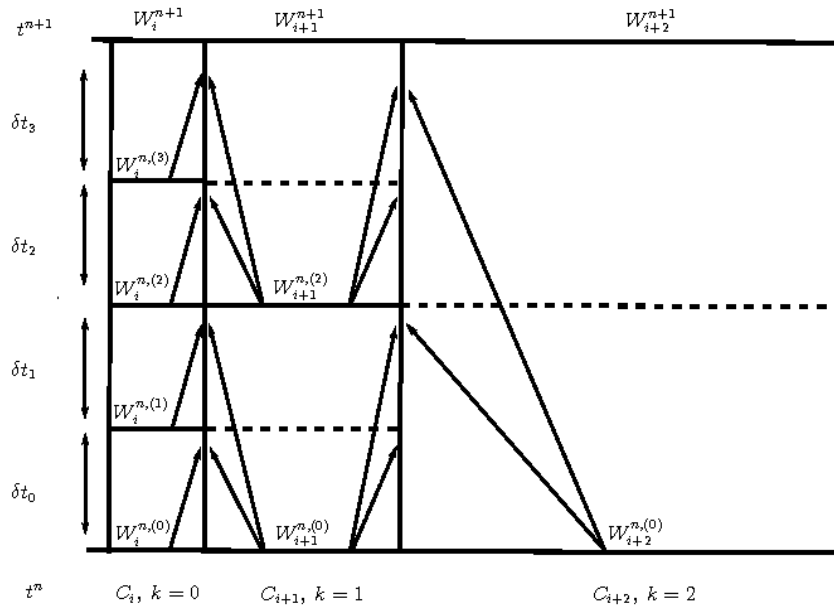


FIG. 4.2.2 – Distribution des fluxes : méthode d'Osher-Sanders [OS83].

principale, le macro pas de temps est atteint : toutes les cellules sont mises à jour.

Résultats numériques

L'intérêt de l'algorithme du pas de temps local est que si le nombre de petites cellules est faible et si les autres cellules sont de taille à peu près équivalente, le gain en temps de calcul est d'environ 2^N . On se propose d'illustrer cette propriété par des tests numériques.

Exemple 4.2.3. On considère le transport d'une fonction sinusoïdale dans le domaine unidimensionnel. Le maillage uniforme est modifié de sorte qu'il admette 8 niveaux de CFL. On utilise un schéma d'ordre 2 avec $CFL = 0.2$ et $t_{final} = 1$ s. En utilisant des pas de temps locaux, le temps de calcul est de 2.9 s contre 51 s avec un pas de temps global.

Exemple 4.2.4. On propose d'appliquer l'algorithme à la résolution d'un problème bidimensionnel de type tube à choc pour les équations d'Euler compressibles. Le domaine est discrétisé suivant 7 niveaux de CFL (voir figure 4.2.4). On utilise un schéma d'ordre 2 avec une $CFL=0.3$ et $t_{final} = 0.5$ s. Une résolution classique dure 112.81 s. contre 34.29 s. en utilisant les pas de temps locaux.

4.3 Limiteur de pentes

L'espace d'approximation considéré dans le schéma GD n'impose pas la continuité aux interfaces des cellules et permet donc d'utiliser des polynômes de degré

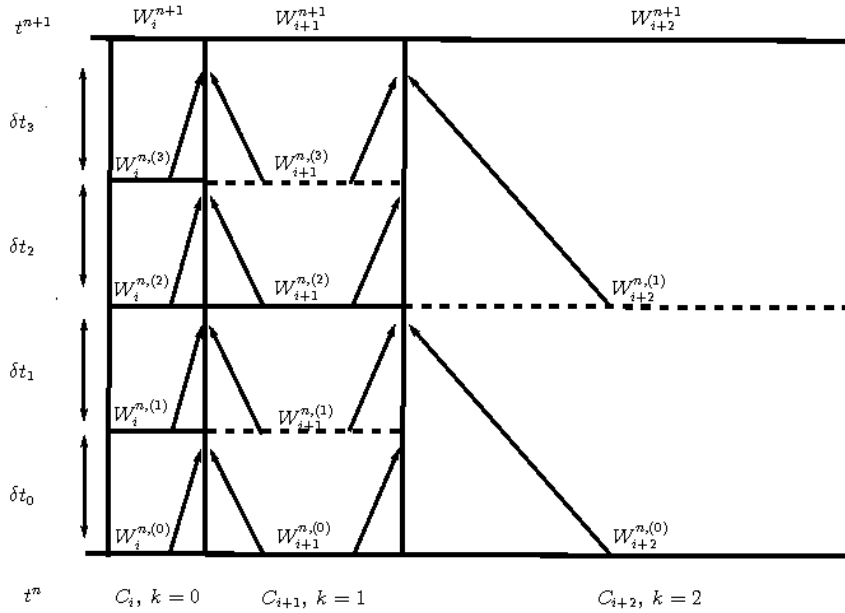


FIG. 4.2.3 – Distribution des fluxes : méthode de Müller-Stiriba [MS07] .

élevé pour la reconstruction en espace. Si l'approximation est constante par maille, la diffusion numérique (due au décentrement) est suffisante pour assurer la monotonie du schéma. Lorsque des polynômes de degré plus élevé définissent l'espace d'approximation, le schéma produit des oscillations, de type phénomène de Gibbs, non physiques près des chocs. Dans ce cas, il est nécessaire d'utiliser un limiteur de pentes pour prévenir l'apparition d'extrema locaux et garantir la stabilité du schéma. La littérature concernant les limiteurs de pente est abondante. On se réfère par exemple aux travaux [CS91] et [BSB01], pour les méthodes GD couplées à Runge-Kutta. On propose ci-après un limiteur très simple, conservatif et entropique, bien adapté aux problèmes monodimensionnels.

Dans chaque cellule L , on définit un vecteur de limiteurs initialisés à 1 :

$$\beta_L^i = 1, \quad i = 1, \dots, m.$$

La limitation est maximale dès lors que toutes les composantes sont nulles. On note \overline{W}_L la moyenne de l'approximation sur la cellule L :

$$\overline{W}_L(t) = \frac{1}{|L|} \int_L W(x, t) dx.$$

Après l'étape de limitation, la i -ème composante du vecteur de variables conservatives est obtenue par combinaison convexe des valeurs non limitées et de la valeur moyenne :

$$\widetilde{W}_L^i(t) = \beta_L^i W_L^i(t) + (1 - \beta_L^i) \overline{W}_L^i. \quad (4.44)$$

Remarque 4.3.1. Si $\beta_L^i = 0$, le limiteur de pente permet de retrouver la valeur moyenne \overline{W}_L sur la cellule L , ce qui correspond à un schéma du premier ordre.

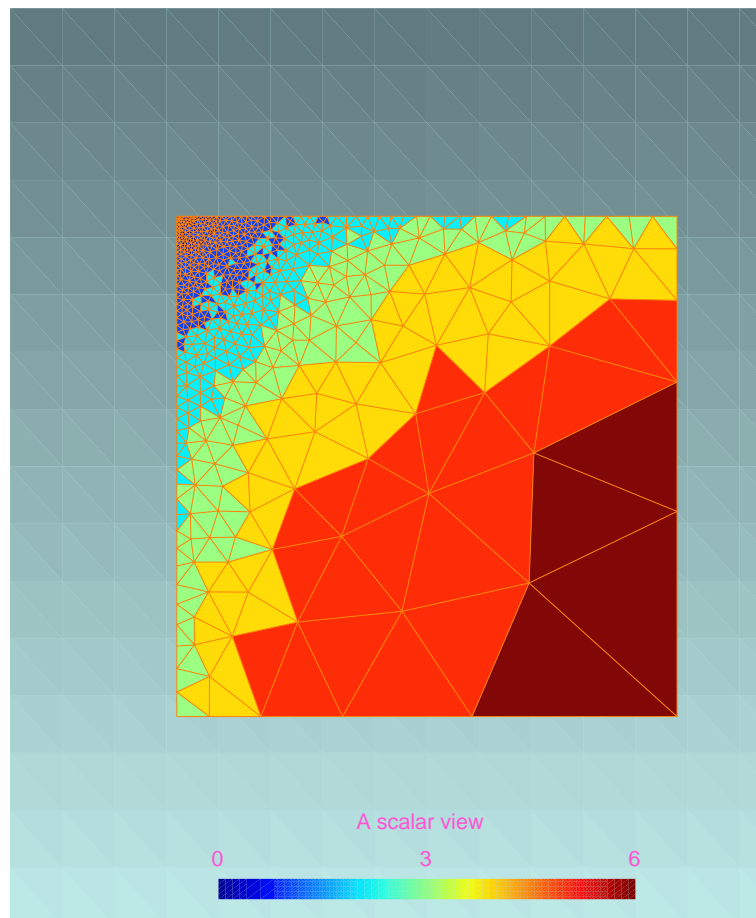


FIG. 4.2.4 – Maillage à 7 niveaux de CFL.

Proposition 4.3.2. *Le limiteur est conservatif et entropique.*

Démonstration. Par construction le limiteur conserve la valeur moyenne \overline{W}_L sur une cellule L donnée. D'autre part, on souhaite montrer que le limiteur est entropique *i.e.*

$$\frac{1}{|L|} \int_L S(\widetilde{W}_L)(x, t) dx \leq \frac{1}{|L|} \int_L S(W_L)(x, t) dx.$$

L'entropie S étant convexe, l'inégalité de Jensen assure :

$$S(\overline{W}_L)(t) = S\left(\frac{1}{|L|} \int_L W_L(x, t) dx\right) \leq \frac{1}{|L|} \int_L S(W_L)(x, t) dx.$$

Or on a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|L|} \int_L S(\widetilde{W}_L)(x, t) dx &= \frac{1}{|L|} \int_L S(\beta_L W_L(x, t) + (1 - \beta_L) \overline{W}_L(x, t)) dx \\ &\leq \frac{\beta_L}{|L|} \int_L S(\overline{W}_L)(x, t) dx + \frac{1 - \beta_L}{|L|} \int_L S(W_L)(x, t) dx \\ &\leq \frac{1}{|L|} \int_L S(W_L)(x, t) dx, \end{aligned}$$

ce qui conclut la démonstration. □

La valeur β_L^i est calculée d'après l'algorithme suivant.

```

Pour toutes les faces  $L/R$  de  $L$  faire
  Pour tous les points de Gauss  $G$  de la face faire
    Pour chaque composante faire
      Si (l'inégalité  $(\overline{w}_L^i \leq \widetilde{W}_L^i(G) \leq \overline{w}_R^i)$  est fausse) Alors
         $\beta_L^i = \max\left(\min\left(\beta_L^i, \frac{\overline{w}_R^i - \overline{w}_L^i}{w^i(G) - \overline{w}_L^i}\right), 0\right)$ 
      Fin Si
    Fin Pour
  Fin Pour
Fin Pour

```

Algorithme 3: Limiteur de pentes.

4.4 Application aux équations de la MHD

Les équations de la magnétohydrodynamique (MHD) forment un système hyperbolique non linéaire. Il combine les équations de la dynamique des gaz et l'équation d'induction magnétique (elle même déduite des équations de Maxwell dans un cadre supposé non relativiste). Le système est couplé à une contrainte de divergence nulle sur le champ magnétique $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \tag{4.49}$$

Si la condition initiale du champ magnétique satisfait (4.49), alors la solution exacte la satisfera en tout temps. Pour des solutions régulières, cette relation découle de l'équation d'induction

$$\partial_t \mathbf{B} + \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}) = 0, \quad (4.48)$$

qui décrit l'évolution du champ magnétique ($\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ désigne le champ de vitesse). Puisque la divergence discrète d'un rotationnel discret n'est pas exactement nulle, des erreurs provenant de la résolution de (4.49) apparaissent dans les simulations numériques et ont tendance à s'amplifier au cours du temps. Le système se comporte alors de façon non physique. Ce phénomène est étudié par Balsara et Spicer [BS99] ou Brackbill et Barnes [BB80] entre autres. Plusieurs schémas ont été développés dans le but d'améliorer le traitement de la contrainte de divergence nulle.

Une classe de méthodes (dites « constrained transport methods ») repose sur une discrétisation particulière des équations relatives au champ magnétique, de sorte que l'approximation discrète de la divergence est maintenue exactement à zéro. D'abord développé pour les équations de Maxwell par Yee [Yee66], ce schéma est ensuite généralisé au cas de la MHD par Brecht *et al.* [BLFH81] puis notamment par DeVore [DeV91] (pour plus de références, on consultera la bibliographie de [DKK⁺02]). Plus récemment, Li et Shu ont proposé une approche Galerkin discontinu pour la résolution du système de la MHD [LS05]. L'espace d'approximation choisi est celui des polynômes vérifiant la contrainte de divergence. Ainsi la condition est vérifiée par construction dans chaque élément du maillage. La méthode développée par Powell [Pow94] est basée sur la forme symétrique des équations de la MHD. Des termes sources proportionnels à $\nabla \cdot \mathbf{B}$ sont ajoutés au système. Le système, bien que non-conservatif, retrouve un comportement physiquement admissible.

On s'intéresse ici à la méthode développée par Dedner *et al.* [DKK⁺02]. Ils utilisent un multiplicateur de Lagrange pour coupler la contrainte de divergence aux équations d'évolution. Avec cette méthode les erreurs de divergence sont transportées aux frontières du domaine à une certaine vitesse et sont ainsi évacuées (on parle de « divergence cleaning »).

On s'intéresse également au problème de Riemann de la magnétohydrodynamique idéale. Lorsque le champ magnétique change d'orientation d'un état gauche à un état droit, certaines valeurs propres de la matrice jacobienne du flux coïncident. Le système n'est plus strictement hyperbolique (toutefois la matrice demeure diagonalisable). De fait les champs caractéristiques ne sont plus soit vraiment non linéaires soit linéairement dégénérés. Le système admet des ondes non régulières comme des chocs composés. Le problème de Riemann de la MHD a largement été étudié par Torrilhon [Tor03b, Tor03a], on pourra également consulter la thèse de Wesenberg [Wes03]. Il est possible d'étudier les structures d'ondes et les propriétés de la MHD en considérant des modèles simplifiés. Dans sa thèse, R. S. Myong introduit un système de trois équations à trois inconnues, qu'il obtient en raisonnant sur les propriétés physiques du système (4.45). La construction de ce système est brièvement décrite et précède l'étude du problème de Riemann associé. Le système simplifié admet les mêmes propriétés que celui de la MHD idéale. En particulier, la non-unicité du problème de Riemann sera illustrée par des tests numériques.

4.4.1 Modèle mathématique

Les équations de la magnétohydrodynamique décrivent le comportement d'un fluide compressible, conducteur en présence d'un champ magnétique. Les inconnues sont la masse volumique ρ , la vitesse $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$, l'énergie interne e , la pression p et le champ magnétique $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$. Toutes dépendent de la variable d'espace $x \in \mathbb{R}^3$ et du temps $t \in \mathbb{R}^+$. En partant des équations d'Euler et de Maxwell, après quelques simplifications, le système de la MHD est formé des lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et de l'équation d'induction.

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.45)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \left(p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) I - \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \right) = 0 \quad (4.46)$$

$$\partial_t (Q) + \nabla \cdot \left(\left(Q + p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) \mathbf{u} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{B} \right) = 0 \quad (4.47)$$

$$\partial_t \mathbf{B} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{B} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{u}) = 0 \quad (4.48)$$

où $Q = \rho e + \frac{\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2}$ désigne l'énergie totale du fluide. La notation I représente la matrice identité. La pression p est reliée à l'énergie interne e et à la masse volumique ρ par une équation d'état. Par la suite nous ne considérons que la loi des gaz parfaits :

$$p = \Pi(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho e,$$

où $\gamma > 1$ désigne le coefficient polytropique.

Remarque 4.4.1. Les lois de gaz réels appliquées au système de la MHD sont largement étudiées dans la thèse de Wesenberg [Wes03].

L'équation d'induction (4.48) peut s'écrire sous la forme :

$$\partial_t \mathbf{B} + \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}) = 0,$$

ce qui donne directement :

$$\partial_t (\nabla \cdot \mathbf{B}) = 0.$$

Le système précédent a donc pour conséquence la contrainte de divergence :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (4.49)$$

si cette contrainte est satisfaite à l'instant $t = 0$.

Cette équation assure la conservation de la charge magnétique. D'un point de vue numérique, il est difficile de garantir cette condition : une violation de la contrainte peut mener à des problèmes numériques sévères. Aussi certains auteurs [DKK⁺02] [MOS⁺00] [Pow94] suggèrent-ils d'ajouter une correction de la divergence. On introduit une nouvelle variable ψ dans le système (4.45)-(4.48) de la

manière suivante :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.50)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \left(p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) I - \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \right) = 0 \quad (4.51)$$

$$\partial_t (Q) + \nabla \cdot \left(\left(Q + p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) \mathbf{u} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{B} \right) = 0 \quad (4.52)$$

$$\partial_t \mathbf{B} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{B} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{u} + \psi I) = 0 \quad (4.53)$$

$$\partial_t \psi + \nabla \cdot (c_h^2 \mathbf{B}) = 0 \quad (4.54)$$

La quantité ψ permet de « nettoyer » la divergence : les perturbations sont transportées au travers du domaine à la vitesse c_h et sont amorties suivant des conditions aux limites adéquates. La vitesse constante c_h peut être choisie de façon arbitraire. En pratique, c_h doit être plus grande que la plus grande vitesse d'onde du système initial (4.45)-(4.48).

Remarque 4.4.2. On observe que si $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ et si $\psi = cste$, le système modifié (4.50)-(4.54) est équivalent au système initial (4.45)-(4.48).

Hyperbolicité

Les systèmes précédents peuvent être mis sous forme conservative

$$\partial_t W + \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} f^i(W) = 0,$$

avec $d = 3$ la dimension de l'espace. Le flux correspondant au système (4.50)-(4.54) est :

$$f(W, \mathbf{n}) = \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \\ \rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\mathbf{u} + \left(p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) \mathbf{n} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{n})\mathbf{B} \\ \left(Q + p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{n}) \\ (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{n})\mathbf{u} + \psi \mathbf{n} \\ c_h^2 \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

La matrice jacobienne du flux est donnée par :

$$A(W, \mathbf{n}) = \partial_W f^i(W) \cdot \mathbf{n}_i.$$

On note b la composante normale du champ magnétique :

$$b = \mathbf{B} \cdot \mathbf{n},$$

et \mathbf{B}_\perp la composante tangentielle. On introduit également

Définition 4.4.3. *Le vitesse d'Alfvén est donnée par :*

$$c_a = \frac{b}{\sqrt{\rho}}. \quad (4.56)$$

Les vitesses magnétoacoustiques rapide et lente sont :

$$c_{f,s} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{b^2 + B^2}{\rho} + a^2 \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{b^2 + B^2}{\rho} + a^2 \right)^2 - \frac{a^2 b^2}{\rho}}}. \quad (4.57)$$

La vitesse a désigne la vitesse du son pour un gaz parfait :

$$a = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}.$$

Proposition 4.4.4. *Les valeurs propres de $A(W, \mathbf{n})$ sont :*

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -c_h, \\ \lambda_2 &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - c_f, \quad \lambda_3 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - c_a, \quad \lambda_4 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - c_s, \\ \lambda_5 &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \\ \lambda_6 &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + c_s, \quad \lambda_7 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + c_a, \quad \lambda_8 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + c_f, \\ \lambda_9 &= c_h. \end{aligned}$$

Les ondes 2 et 8 (resp. 4 et 6) sont dites ondes magnétoacoustiques rapides (resp. lentes). Les champs caractéristiques 3 et 7 définissent les ondes d'Alfvén.

Proposition 4.4.5. *Les valeurs propres sont réelles et le système (4.50-4.54) est toujours diagonalisable, le système de la MHD est donc hyperbolique [RB96].*

4.4.2 Le problème de Riemann de la MHD : étude d'un modèle simplifié

On considère le système initial à sept équations (4.45-4.48). On notera $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$, $\mathbf{B} = (b, B_y, B_z)^T$, et on rappelle que $\mathbf{B}_\perp = (B_y, B_z)^T$. Les vitesses d'ondes relatives à la vitesse du fluide ($\lambda_i - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$) sont

$$0, \quad \pm c_s, \quad \pm c_a, \quad \pm c_f,$$

On note a la vitesse du son vérifiant $a = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$, dans le cas des gaz parfaits. On désigne par r_i les vecteurs propres à droite associés aux valeurs propres. Le produit $\nabla \lambda_i \cdot r_i$ peut changer de signe et s'annuler pour certains états. Quand

$$\mathbf{B}_\perp \cdot \mathbf{B}_\perp = 0,$$

alors

$$\begin{aligned} c_s &= c_a, \quad c_f = c_a, \quad \text{pour } a > c_a, \\ c_f &= c_a, \quad c_s = a, \quad \text{pour } a < c_a. \end{aligned}$$

Dans ce cas, l'onde d'Alfvén interfère avec les ondes magnétoacoustiques. En particulier quand

$$\mathbf{B}_\perp \cdot \mathbf{B}_\perp = 0$$

et $c_a = a$, alors

$$c_s = c_1 = c_f = a.$$

Cet état est appelé point triple "ombilique". Il représente l'interaction de l'onde d'Alfvén et des ondes magnétoacoustiques lentes et rapides. La matrice jacobienne

du flux demeure diagonalisable, mais le système de la MHD n'est plus strictement hyperbolique. Le problème de Riemann peut admettre des solutions multiples. Torrilhon propose la construction d'un solveur exact et étudie les conditions d'unicité dans [Tor03b] et [Tor03a]. Le lecteur pourra également consulter la thèse de Wesenberg [Wes03].

Nous choisissons ici de donner une description introductive à ce phénomène en considérant un modèle simplifié issu de la MHD. On se propose d'étudier le modèle 3×3 introduit par Myong dans sa thèse [Myo96]. La structure des ondes de la MHD, au voisinage du point ombilique, peut être étudiée dans un espace de phases à trois dimensions. En effet, les six ondes sont symétriques par rapport à l'onde relative à $\lambda_5 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$. Un modèle 3×3 préservant la singularité se déduit du système (4.45)-(4.48) en ne considérant que l'équation de conservation de la quantité de mouvement en u_x et les lois de conservation du champ magnétique en B_y et B_z . On a donc

$$\partial_t W + \partial_x f(W) = 0,$$

$$W = \begin{pmatrix} \rho u_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \quad f(W) = \begin{pmatrix} \rho u_x^2 + p + \frac{B_y^2 + B_z^2}{2} \\ B_y u_x - B_x u_y \\ B_z u_x - B_x u_z \end{pmatrix}.$$

On suppose que :

$$B_x = 1, \quad \rho = 1, \quad u_y \simeq B_y, \quad u_z \simeq B_z.$$

La vitesse u_x est de même amplitude que a , on peut donc écrire $p \sim u_x^2$. On trouve alors

$$\partial_t W + \partial_x f(W) = 0,$$

$$W = \begin{pmatrix} \rho u_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \quad f(W) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} (a u_x^2 + B_y^2 + B_z^2) \\ (u_x - 1) B_y \\ (u_x - 1) B_z \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

La quantité u_x traduit les propriétés thermodynamiques du fluide et a contrôle le comportement du système. Pour faciliter l'étude, on effectue un développement en série de Taylor au voisinage du point triple $W^* = (1/(1-a), 0, 0)$:

$$f(W) = f(W^*) + df(W^*)(W - W^*) + \mathcal{O}(W - W^*)^2.$$

Notons f_T la forme tronquée :

$$f_T(W) = f(W^*) + df(W^*)(W - W^*). \quad (4.59)$$

La matrice $df(W^*)$ est diagonalisable et $d_T f(W)$ a des valeurs propres distinctes $\forall W \in \mathbb{R}^3 \setminus W^*$. Le système (4.58) est inchangé si l'on remplace $f(W) - f(W^*)$ par $f_T(W)$. D'autre part, on a :

$$df(W^*) = \lambda I,$$

pour $\lambda = \frac{a}{1-a}$. Ainsi les termes linéaires de (4.59) peuvent être éliminés en considérant le changement de variable $x' = x - \lambda t$. Finalement on remplace $(W -$

W^*) par W et on applique la transformation $W = 2W'$. Notant $u = u_x$, $v = B_y$ et $w = B_z$, on obtient le système suivant :

$$\begin{aligned} \partial_t W + \partial_x f(W) &= 0, \\ W &= \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}, \quad f(W) = \begin{pmatrix} au^2 + v^2 + w^2 \\ 2uv \\ 2uw \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Nous allons maintenant étudier le problème de Riemann pour ce système et mettre en évidence un défaut d'unicité des solutions de Lax.

Hyperbolicité

La matrice jacobienne du flux f est :

$$A(W) = \begin{pmatrix} 2au & 2v & 2w \\ 2v & 2u & 0 \\ 2w & 0 & 2u \end{pmatrix}. \quad (4.61)$$

La matrice A étant symétrique, elle admet des valeurs propres réelles. Le système est donc hyperbolique. Après calculs, on obtient aisément les valeurs propres du système :

$$\lambda_s = (a+1)u - r, \quad \lambda_a = 2u, \quad \lambda_f = (a+1)u + r,$$

et les vecteurs propres associés

$$r_s = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\lambda_s - u \\ v \\ w \end{pmatrix}, \quad r_a = \begin{pmatrix} 0 \\ w \\ -v \end{pmatrix}, \quad r_f = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\lambda_f - u \\ v \\ w \end{pmatrix}.$$

avec $r = \sqrt{(a-1)^2 u^2 + 4(v^2 + w^2)}$. Dans le cas $a = 1$, les calculs se simplifient

$$\begin{aligned} \lambda_s &= 2u - 2r, & \lambda_a &= 2u, & \lambda_f &= 2u + 2r, \\ r_s &= \begin{pmatrix} -r \\ v \\ w \end{pmatrix}, & r_a &= \begin{pmatrix} 0 \\ w \\ -v \end{pmatrix}, & r_f &= \begin{pmatrix} r \\ v \\ w \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.62)$$

avec $r = \sqrt{v^2 + w^2}$. Le champ lié à l'onde A , est linéairement dégénéré, tandis que les champs s et f sont vraiment non linéaires.

Entropie

Le système étant symétrique pour le jeu de variables conservatives $W = (u, v, w)^T$, le vecteur de variables entropiques φ est donc celui des variables conservatives W . Le théorème de Mock [Moc80] implique que le système admet une entropie. Il s'agit tout simplement ici de l'énergie.

Proposition 4.4.6. *Soient les quantités*

$$S = \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2), \quad (4.63)$$

$$G = 2u \left(\frac{au^2}{3} + v^2 + w^2 \right). \quad (4.64)$$

Le couple (S, G) est un couple entropie-flux d'entropie du système.

Démonstration. On rappelle les notations introduites en début de chapitre :

$$\nabla_W S(W) = \varphi, \quad (4.65)$$

$$f(W) = \nabla_\varphi G^*(\varphi), \quad (4.66)$$

$$G^*(\varphi) = f(w) \cdot \varphi - G(w), \quad (4.67)$$

On rappelle également que la notation $*$ ne traduit pas exactement une transformée de Legendre (voir remarque 4.1.2). En utilisant (4.65), on obtient directement la formulation de S . L'expression de G^* se déduit de (4.66) :

$$G^* = a \frac{u^3}{3} + uv^2 + uw^2. \quad (4.68)$$

Par la formule (4.67) on obtient l'expression (4.64) du flux d'entropie G . \square

Problème de Riemann

On se place en coordonnées polaires $Y = (u, r, \theta)^T$ pour traiter le système :

$$\begin{aligned} \partial_t Y + B(Y) \partial_x Y &= 0, \\ Y(0, x) &= \begin{cases} Y_L, & \text{si } x < 0, \\ Y_R, & \text{si } x > 0, \end{cases} \end{aligned}$$

avec $B(Y) = \begin{pmatrix} 2au & 2r & 0 \\ 2r & 2u & 0 \\ 0 & 0 & 2u \end{pmatrix}$.

Les valeurs propres du système sont inchangées par changement de variables et les vecteurs propres sont :

$$r'_s = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r'_a = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad r'_f = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

On en déduit que

Proposition 4.4.7. *Les invariants de Riemann associés aux trois champs caractéristiques sont :*

$$\begin{aligned} R_s^1 &= \theta, & R_s^2 &= u + r, \\ R_a^1 &= u, & R_a^2 &= r, \\ R_f^1 &= \theta, & R_f^2 &= u - r. \end{aligned} \quad (4.69)$$

On s'intéresse au problème de Riemann du système (4.60). Supposons connus les états gauches et droits W_L et W_R . Il s'agit de construire les états constants intermédiaires séparés par des ondes de chocs ou de détente.

Connaissant un état indicé (0), on cherche à calculer l'état (1) connecté à cet état par une onde de choc. Les relations de Rankine-Hugoniot ont pour forme générale :

$$n_t[w] + n_x[F(W)] = 0, \quad (4.70)$$

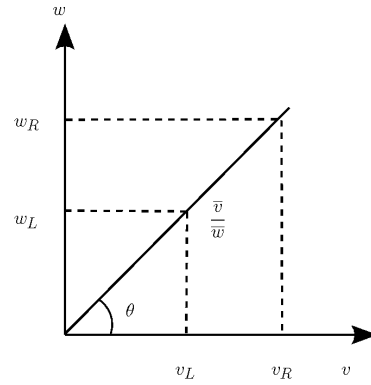


FIG. 4.4.1 – Interprétation graphique du quotient (4.76)

où $\vec{n} = (n_x, n_t)$ est le vecteur normal au choc dans le plan (x, t) et $[\cdot]$ désigne le saut à la traversée de la discontinuité. La relation (4.70) se traduit par :

$$n_t(W_1 - W_0) + n_x(F(W_1) - F(W_0)) = 0. \quad (4.71)$$

Soit σ la vitesse de la discontinuité, le vecteur normal s'écrit :

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\sigma \end{pmatrix}. \quad (4.72)$$

En introduisant la notation $\bar{Y} = \frac{1}{2}(Y_0 + Y_1)$, il vient :

Proposition 4.4.8. *Les relations de Rankine-Hugoniot peuvent s'écrire de manière équivalente :*

$$\sigma(u_1 - u_0) = 2c\bar{u}(u_1 - u_0) + 2\bar{v}(v_1 - v_0) + 2\bar{w}(w_1 - w_0) \quad (4.73)$$

$$\sigma(v_1 - v_0) = 2\bar{v}(u_1 - u_0) + 2\bar{u}(v_1 - v_0), \quad (4.74)$$

$$\sigma(w_1 - w_0) = 2\bar{w}(u_1 - u_0) + 2\bar{u}(w_1 - w_0). \quad (4.75)$$

De plus

Proposition 4.4.9. *Les invariants de Riemann sont aussi des invariants de choc pour le système (4.60).*

Démonstration. Les invariants de Riemann de la 1-onde sont :

$$R_s^1 = \theta, \quad R_s^2 = u + r.$$

Les relations (4.74) et (4.75) s'écrivent encore :

$$(\sigma - 2\bar{u})(v_1 - v_0) = 2\bar{v}(u_1 - u_0),$$

$$(\sigma - 2\bar{u})(w_1 - w_0) = 2\bar{w}(u_1 - u_0).$$

Si $\sigma \neq 2\bar{u}$, on a :

$$v_1 - v_0 = \frac{\bar{v}}{\bar{w}}(w_1 - w_0),$$

soit (cf. figure 4.4.2) :

$$\frac{v_1 - v_0}{w_1 - w_0} = \frac{\bar{v}}{\bar{w}}. \quad (4.76)$$

Le ratio étant constant, l'invariant de Riemann est constant au travers du choc. En supposant θ constant, on peut étudier les autres invariants en coordonnées polaires. Les états (0) et (1) sont

$$Y_0 = \begin{pmatrix} u_1 \\ r_1 \cos \theta_1 \\ r_1 \sin \theta_1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad Y_1 = \begin{pmatrix} u_1 \\ r_1 \cos \theta_0 \\ r_1 \sin \theta_0 \end{pmatrix}.$$

Les relations de Hugoniot en coordonnées polaires sont :

$$\sigma_1(u_1 - u_0) = 2\bar{u}(u_1 - u_0) + 2\bar{r}(r_1 - r_0), \quad (4.77)$$

$$\sigma_1(r_1 - r_0) = 2\bar{u}(r_1 - r_0) + 2\bar{r}(u_1 - u_0). \quad (4.78)$$

avec $\sigma_1 = 2\bar{u} - 2\bar{r}$. Après simplification, la relation (4.77) devient :

$$(2u - 2r)(u_1 - u_0) = 2u(u_1 - u_0) + 2r(r_1 - r_0),$$

soit

$$u_1 = u_0 - r_1 + r_0 \quad (4.79)$$

L'invariant de l'onde A est donc constant à la traversée du choc. De façon similaire, on constate que l'invariant de l'onde f est constant, défini par :

$$u_1 = u_0 + r_1 - r_0. \quad (4.80)$$

□

Nous venons de montrer que le système simplifié (4.60) est un système de Temple : les invariants de Riemann sont aussi des invariants de chocs [Ser96].

La paramétrisation des courbes d'ondes consiste à relier l'état (0) à l'état (1) par un opérateur M :

$$M(\gamma, u_0, r_0, \theta_0) = \begin{pmatrix} u_1(\gamma) \\ r_1(\gamma) \\ \theta_1(\gamma) \end{pmatrix}.$$

On obtient donc le résultat suivant :

Proposition 4.4.10. *Les paramétrisations des courbes d'ondes s , a et f sont :*

$$\begin{aligned} M_s(r) &= \begin{pmatrix} u_0 - r + r_0 \\ r \\ \theta_0 \end{pmatrix}, & M_a(\theta) &= \begin{pmatrix} u_0 \\ r_0 \\ \theta \end{pmatrix}, \\ M_f(r) &= \begin{pmatrix} u_0 + r - r_0 \\ r \\ \theta_0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.81)$$

On s'intéresse maintenant aux conditions de Lax pour les s-choc et f-choc.

Proposition 4.4.11. *Soit (S, G) le couple entropie-flux donné en (4.63)-(4.64). Notant σ la vitesse du choc, la condition d'entropie de Lax pour le système (4.60) est*

$$\sigma[S] - [G] = \frac{2}{3}(u_0 - u_1)^3 \geq 0. \quad (4.82)$$

Elle est équivalente à la condition caractéristique de Lax.

Démonstration. La condition caractéristique de Lax impose que la vitesse d'un i-choc reliant un état gauche (0) et un état droit (1) vérifie :

$$\lambda_{i,0} > \sigma > \lambda_{i,1}.$$

Pour un f-choc, on rappelle que $\sigma = 2u_0 + 2r$, soit :

$$\begin{aligned} r_0 &> r_1, \\ u_0 &< u_1. \end{aligned}$$

Pour un s-choc, on a :

$$\begin{aligned} r_0 &< r_1, \\ u_0 &> u_1. \end{aligned}$$

D'autre part la condition d'entropie de Lax implique

$$\sigma[S] \geq G.$$

D'après les résultats précédents, l'inégalité devient

$$\begin{aligned} (2u_0 - 2r_1) \frac{1}{2} [u^2 + v^2 + w^2] - [2u \left(\frac{cu^2}{3} + v^2 + w^2 \right)] &\geq 0 \\ (u_0 - r_1) [u^2 + r^2] - [2u \left(\frac{cu^2}{3} + v^2 + w^2 \right)] &\geq 0. \end{aligned}$$

En injectant la relation (4.80), il vient :

$$\begin{aligned} &(u_0 - r_1)(u_1^2 - u_0^2 + r_1^2 - r_0^2) - \\ &\left(2u_1 \left(\frac{cu_1^2}{3} + v_1^2 + w_1^2 \right) - 2u_0 \left(\frac{cu_0^2}{3} + v_0^2 + w_0^2 \right) \right) \geq 0, \end{aligned} \quad (4.83)$$

soit en utilisant la définition du couple entropie-flux

$$\sigma[S] - [G] = \frac{2}{3}(u_0 - u_1)^3 \geq 0 \quad (4.84)$$

On obtient une inégalité similaire pour la 3-onde, au signe près. \square

Nous pouvons maintenant résoudre le problème de Riemann. Rappelons que θ est constant au travers de l'onde d'Alfvén. Pour caractériser l'état intermédiaire, il suffit d'exprimer u^* et r^* . Pour cela on utilise la proposition 4.4.10 qui assure :

$$u^* = \frac{u_0 + u_1 + r_0 - r_1}{2}, \quad (4.85)$$

$$r^* = \frac{r_0 + r_1 + u_0 - u_1}{2}. \quad (4.86)$$

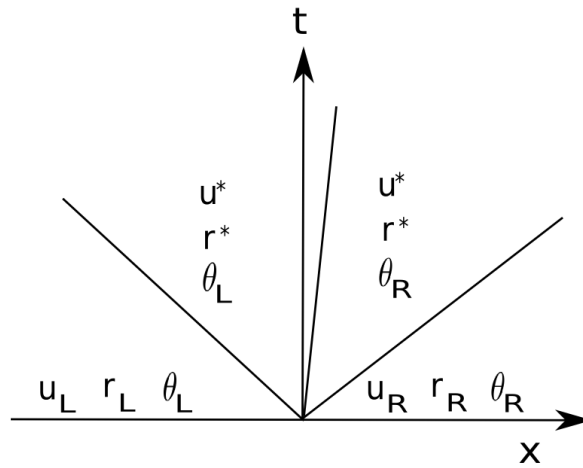


FIG. 4.4.2 – Onde de la solution du problème de Riemann du modèle simplifié de la magnétohydrodynamique.

La figure 4.4.2 illustre la solution du problème de Riemann.

Nous allons maintenant mettre en évidence la non-unicité de la solution de Lax. Cette non-unicité provient de la coïncidence des valeurs propres λ_s et λ_f aux points pour lesquels $v = w = 0$. Rappelons en effet qu'une des hypothèses du théorème de Lax est que le système dont on cherche à résoudre le problème de Riemann a des valeurs propres distinctes [Lax73].

On considère un problème de Riemann pour la condition initiale donnée en table 4.2. On a alors :

Proposition 4.4.12. *Le problème de Riemann de la table 4.2 admet au moins deux solutions entropiques.*

Démonstration. D'une part on peut construire un choc reliant les états W_L et W_R . La vitesse du choc est $\sigma = 3/2$. Les relations de Rankine-Hugoniot sont satisfaites. De plus, on a :

$$\sigma [S] - [G] = \frac{49}{48} > 0, \quad (4.87)$$

La condition d'entropie est donc vérifiée. Il est possible de construire une autre solution entropique en considérant les relations (4.85) et (4.86). Pour l'état intermédiaire, il vient $u^* = 3/4$ et $v^* = 1/2$. De plus on a :

$$\begin{aligned} \theta_L = \theta_1 &= 0, \\ \theta_R = \theta_2 &= \pi. \end{aligned}$$

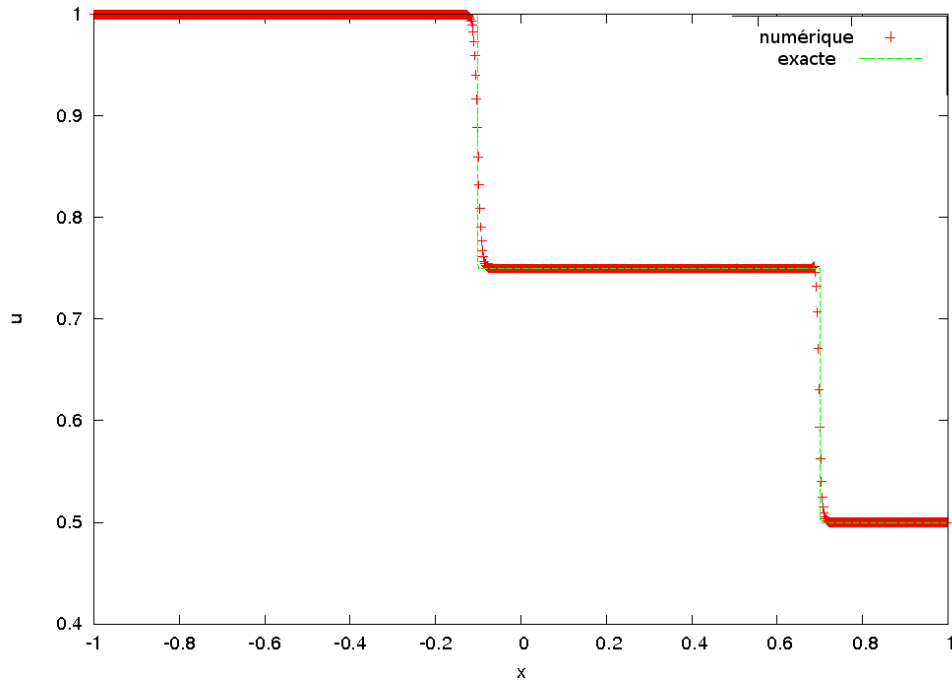
□

Illustration numérique de la non-unicité du problème de Riemann

On propose une résolution du système (4.60) par l'approche Galerkin discontinu. L'approximation des flux est réalisée par un schéma de Godunov standard. Le domaine de calcul $[0, 1]$ est discrétisé en 1000 cellules. Le temps de calcul est de

État gauche W_L	État droit W_R
$u_L = 1$	$u_R = 1/2$
$v_L = 1$	$v_R = 1$
$w_L = 0$	$w_R = 0$

TAB. 4.1 – Modèle simplifié : données initiales du problème de Riemann plan.

FIG. 4.4.3 – Modèle simplifié, solutions du problème de Riemann plan : u au temps $t = 0,2s$ pour $\Delta x = 0,001$. On compare la solution numérique à celle donnée par les relations (4.85) et (4.86).

$t = 0.2$ s pour $CFL = 0.45$. Les figures 4.4.3 et 4.4.4 présentent les résultats obtenus pour les conditions initiales données en table 4.1. De même que pour le système de la MHD, les conditions initiales coplanaires, reproduites en table 4.2, mènent à une solution non unique. Les figures 4.4.2 et 4.4.2 illustrent cette propriété. Le schéma numérique converge vers une troisième solution entropique différente des solutions données dans la preuve 4.4.2. Il est probable que cette solution soit celle de Liu. Le modèle simplifié permet de retrouver le comportement du système de la MHD idéale.

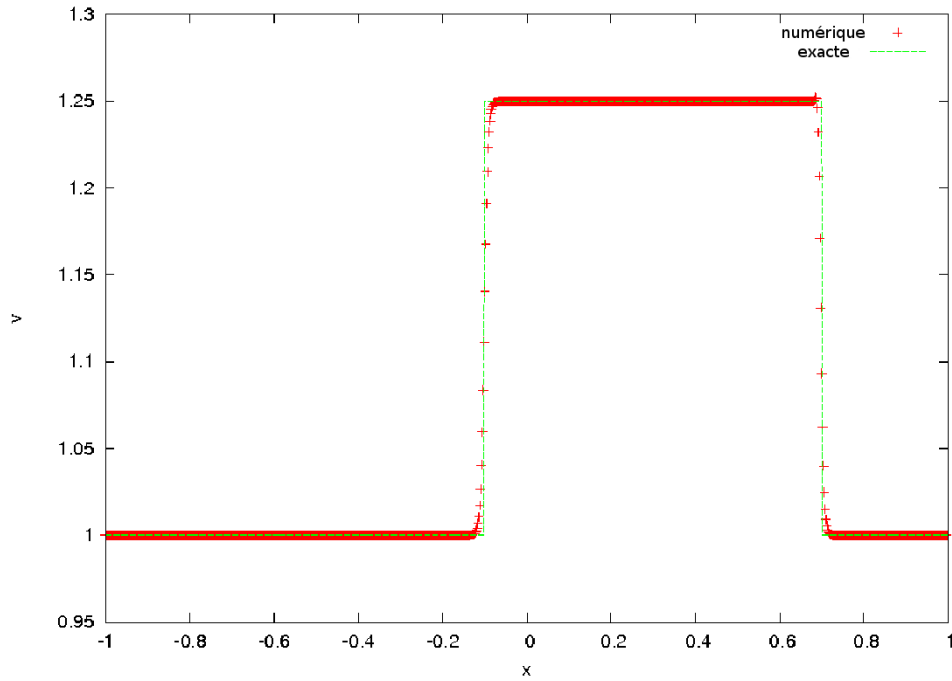


FIG. 4.4.4 – Modèle simplifié, solutions du problème de Riemann plan : v au temps $t = 0,2s$ pour $\Delta x = 0,001$. On compare la solution numérique à celle donnée par les relations (4.85) et (4.86).

État gauche W_L	État droit W_R
$u_L = 1$	$u_R = 1/2$
$v_L = 1$	$v_R = -1$
$w_L = 0$	$w_R = 0$

TAB. 4.2 – Modèle simplifié : données initiales du problème de Riemann coplanaire.

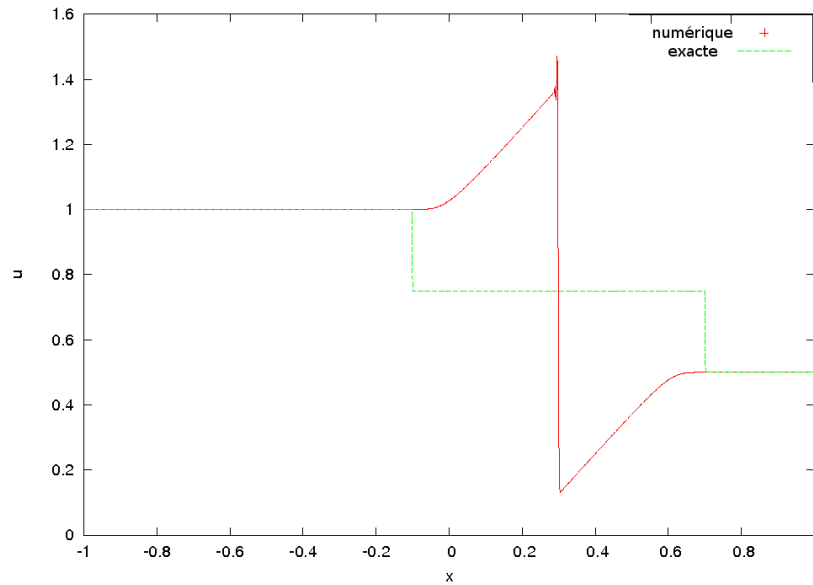


FIG. 4.4.5 – Modèle simplifié, solutions du problème de Riemann coplanaire : u au temps $t = 0,2s$ pour $\Delta x = 0,001$. On compare la solution numérique à celle donnée par les relations (4.85) et (4.86).

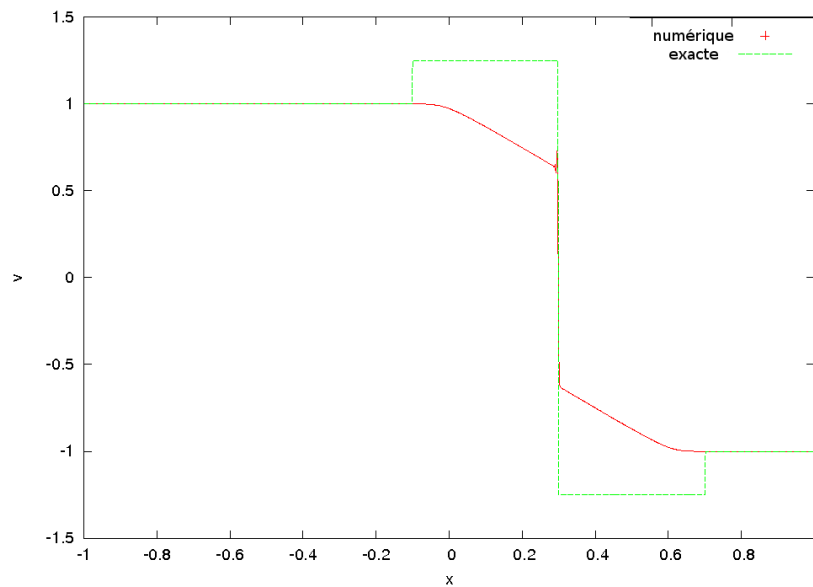


FIG. 4.4.6 – Modèle simplifié, solutions du problème de Riemann coplanaire : v au temps $t = 0,2s$ pour $\Delta x = 0,001$. On compare la solution numérique à celle donnée par les relations (4.85) et (4.86).

4.5 Applications numériques

Ce dernier paragraphe est consacré à l'étude numérique du schéma Galerkin discontinu avec intégration en temps par une méthode d'Adams-Bashforth. On insiste en particulier sur l'efficacité de la méthode de pas de temps local et sur l'ordre de convergence atteint. On propose différents tests fréquemment rencontrés dans le cadre de la magnétohydrodynamique.

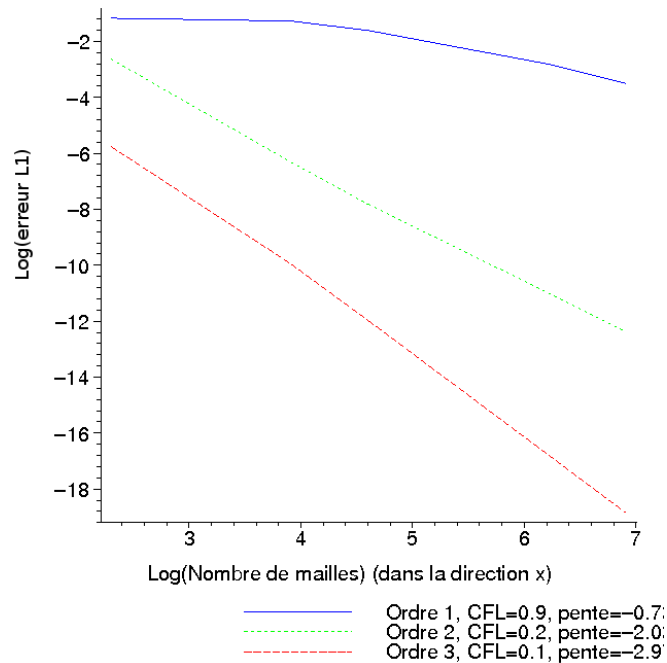
4.5.1 Cas test monodimensionnels

Test de convergence

On propose d'étudier la convergence dans le cas monodimensionnel, en considérant la convection d'une fonction sinusoïdale sur un domaine périodique. Le champ magnétique est supposé nul de sorte que l'on résout les équations d'Euler. On utilise la donnée suivante, solution du système (4.50)-(4.54) :

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= t - \frac{1}{2} \sin(2\pi(x - t)), \\ u(x) &= 1, \\ v(x) &= w(x, t) = 0, \\ p(x) &= 2, \\ b_x(x) &= b_y(x, t) = b_z(x, t) = 0.\end{aligned}$$

Le diagramme de l'erreur en norme L^1 , voir figure 4.5.1, correspond à la densité ρ . On observe le bon comportement du schéma Galerkin discontinu. Plus les pentes des courbes diminuent, plus l'ordre de la méthode augmente. On constate également une discontinuité de pente (en particulier sur la courbe relative à l'ordre 1). Elle est causée vraisemblablement par l'initialisation de la méthode d'Adams-Bashforth par une méthode d'ordre moins élevé du type Euler.

FIG. 4.5.1 – Erreur en norme L^1 : ρ sans limiteur de pente.

Les équations de la MHD (4.45)-(4.48) possèdent neuf valeurs propres, dont certaines peuvent coïncider selon la direction et l'intensité du champ magnétique. Le système est donc non strictement hyperbolique, mais non résonant [RB96]. Par conséquent, les solutions du problèmes de Riemann sont non seulement des ondes de choc et de détente mais également des ondes composées (pour plus de détails, on consultera [MP89]). Pour la majorité des tests les solutions exactes sont fournies par le solveur de Riemann exact proposé par Torrilhon <http://wwwmath.ethz.ch/~matorril/mhdsolver>. Les détails de construction sont disponibles dans [Tor03b] et [Tor03a]. Dans le cadre de système de lois de conservation plus général, on se référera à [ABG⁺09].

Dans le cas monodimensionnel, on fixe $\gamma = \frac{5}{3}$. Le champ magnétique est constant et $x_0 = 0$ désigne la position initiale de la discontinuité.

Choc composé

Le premier test consiste en un choc composé dont l'éventail d'ondes est donné en figure 4.5.2. Il s'agit de la formation d'une onde composite lente venant de gauche en interaction avec un choc lent venant de droite et d'une discontinuité de contact. On compare les résultats obtenus par les schémas de Rusanov, HLLD et VFRoe à la solution exacte (le solveur HLLD est introduit par Miyoschi *et al.* dans [MK05] pour le système de la MHD). Le domaine $[-0.5, 0.5]$ est discrétisé en 1000 mailles, le pas d'espace étant constant. Le temps final est de 0.1 s. On utilise un schéma GD du premier ordre (approximation en espace constante par maille et intégration en temps par une méthode d'Euler). La CFL est 0.8. Les figures 4.5.3, 4.5.4, 4.5.5 et 4.5.6 présentent les résultats obtenus pour les conditions initiales données dans le tableau 4.5.1.

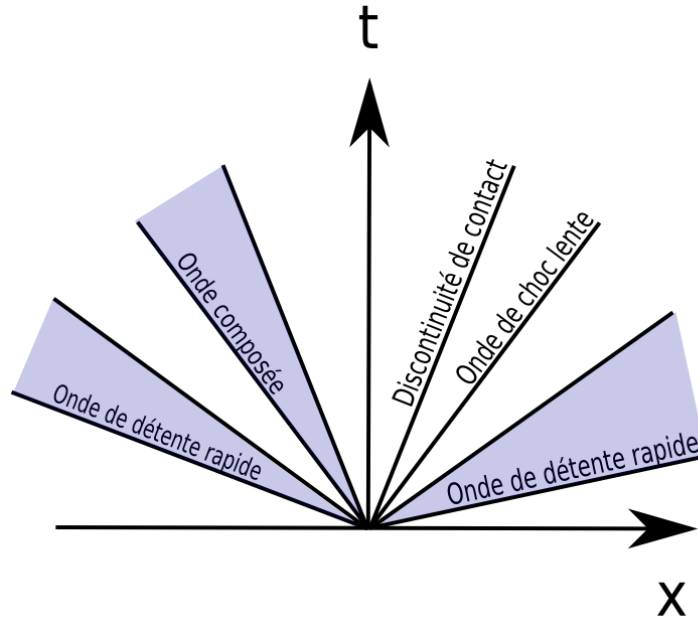


FIG. 4.5.2 – Ondes du test du choc composé.

État gauche	État droit
$\rho_L = 1.$	$\rho_R = 0.125$
$u_L = 0.$	$u_R = 0.$
$v_L = 0.$	$v_R = 0.$
$w_L = 0.$	$w_R = 0.$
$p_L = 1.$	$p = 0.1$
$B_{x,L} = 0.75$	$B_x = 0.75$
$B_{y,L} = 1.$	$B_y = -1.$
$B_{z,L} = 0.$	$B_z = 0.$

TAB. 4.3 – Données initiales du test de choc composé.

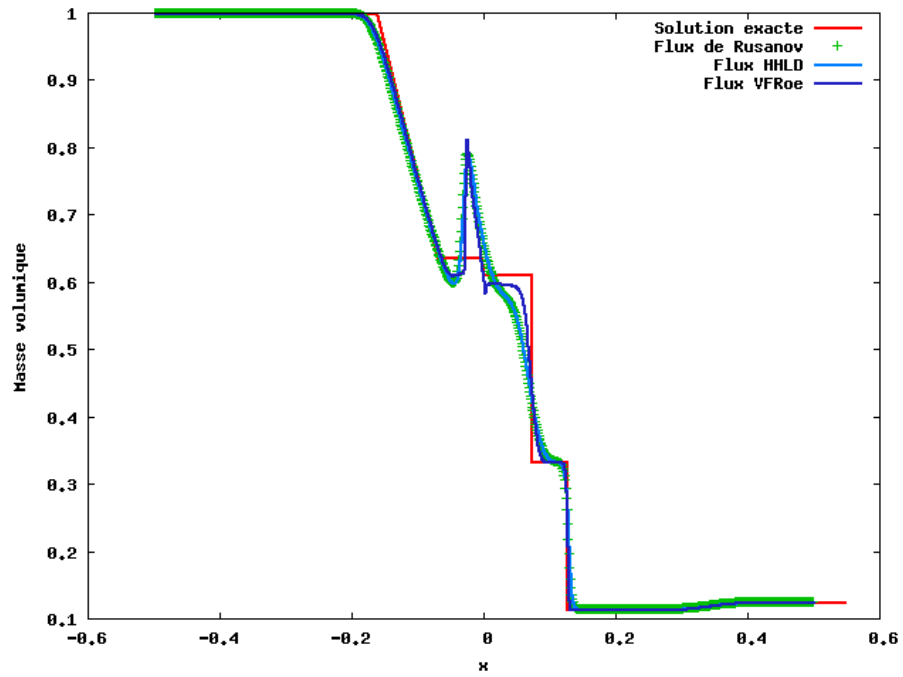


FIG. 4.5.3 – Choc composé : ρ au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

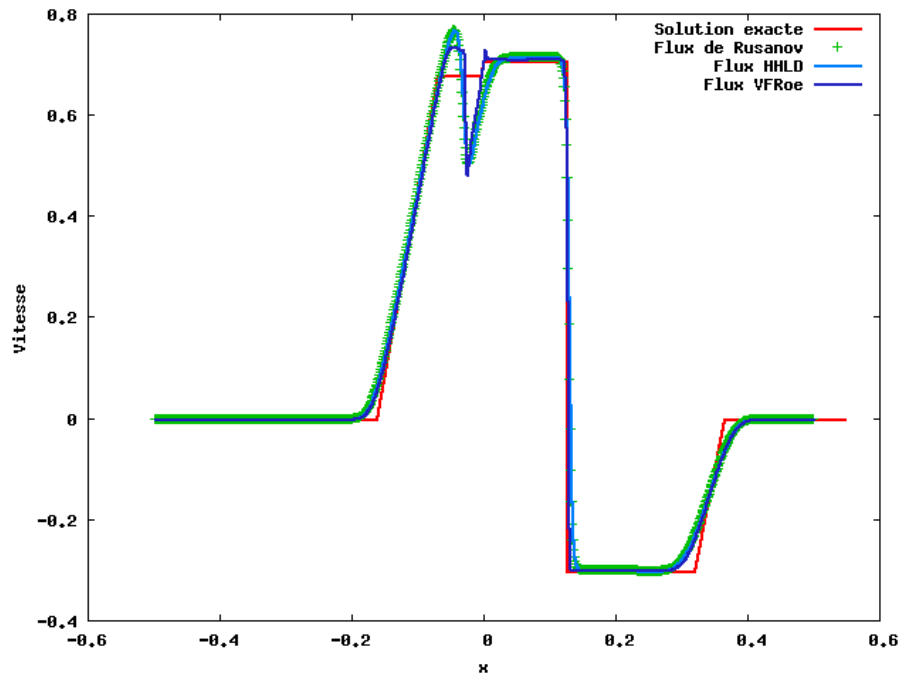


FIG. 4.5.4 – Choc composé : u_x au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

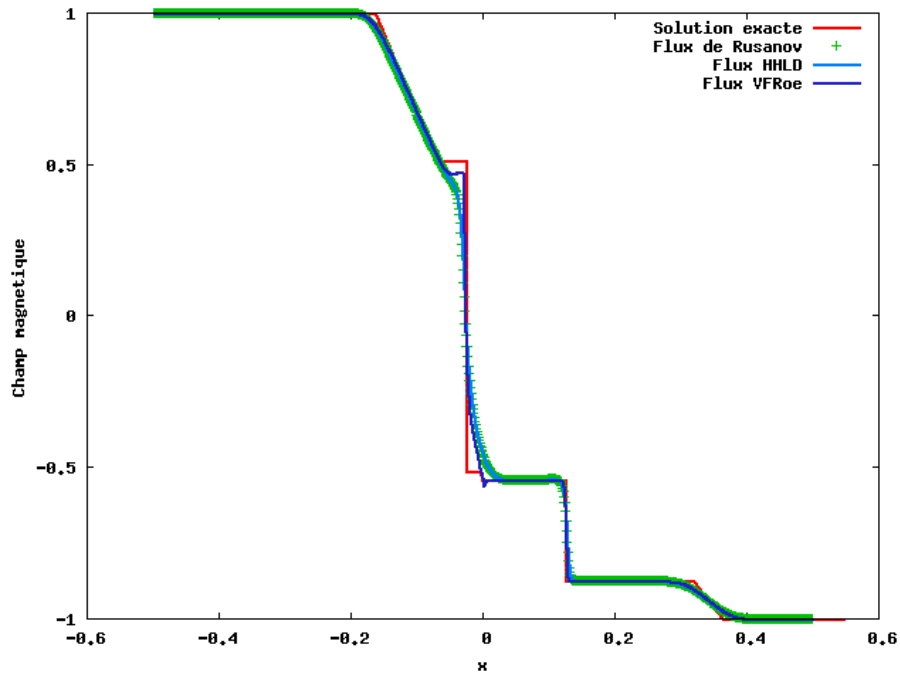


FIG. 4.5.5 – Choc composé : B_y au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

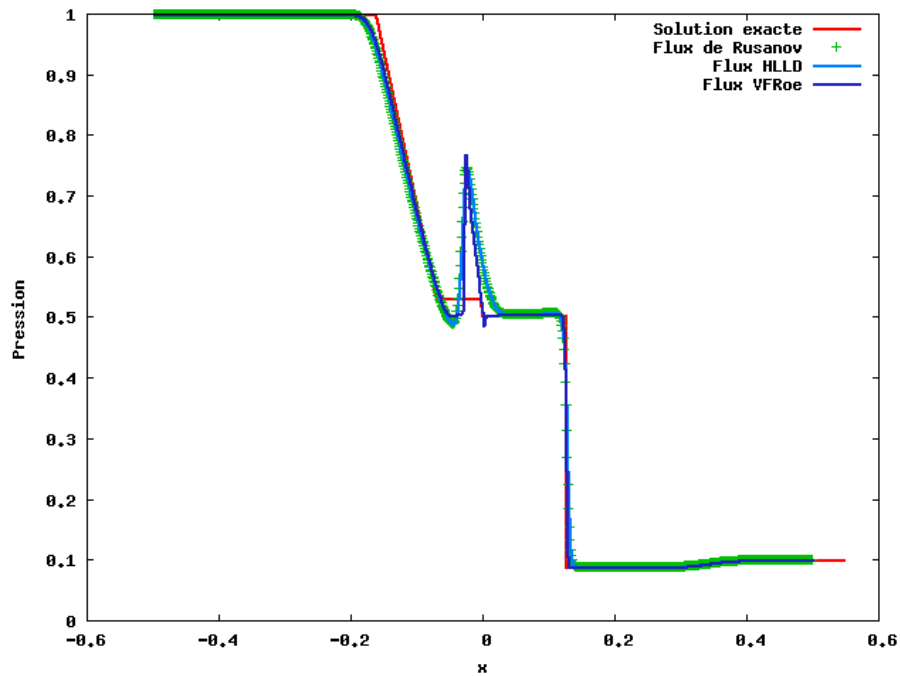


FIG. 4.5.6 – Choc composé : p au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

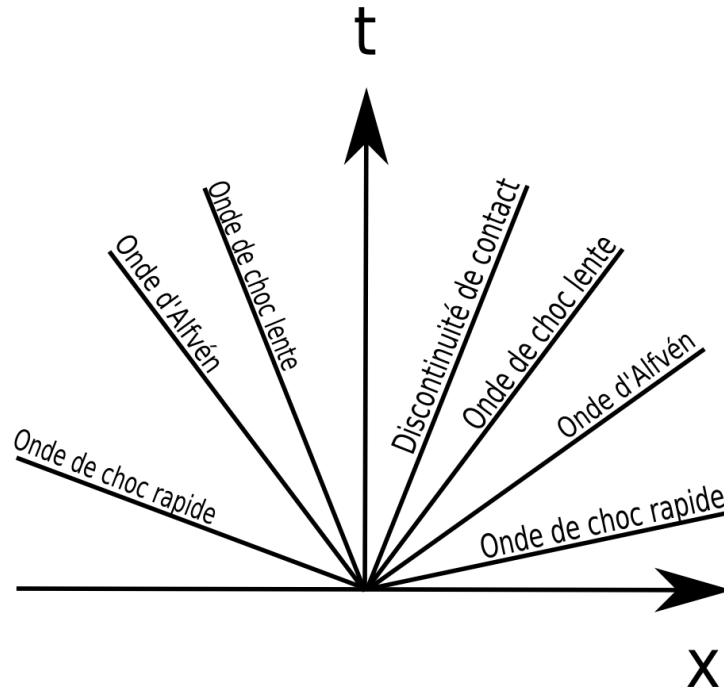


FIG. 4.5.7 – Ondes du test des sept ondes.

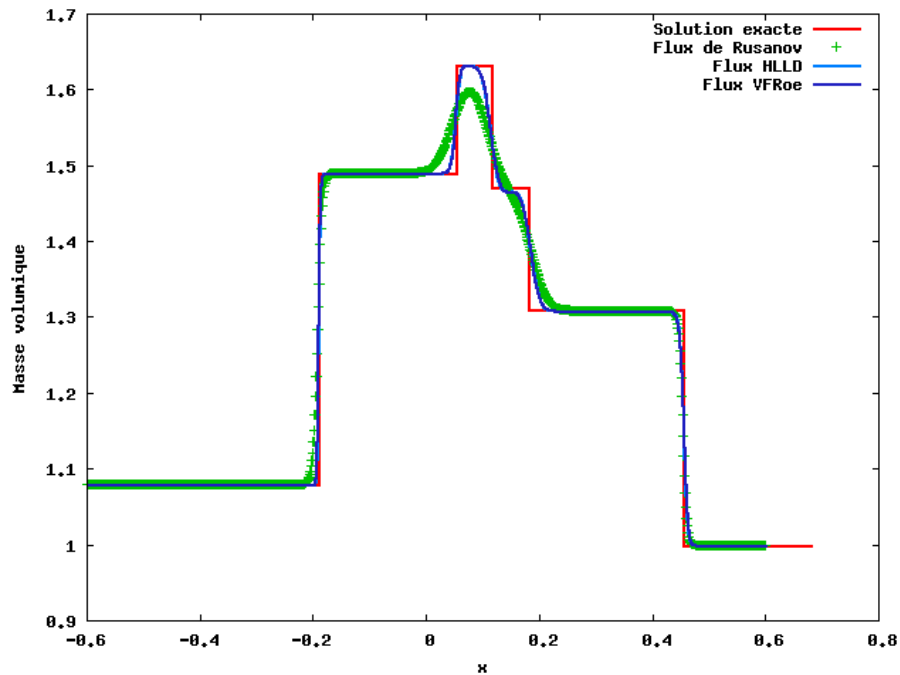
Test des sept ondes

Ce test présente la formation des sept ondes possibles du système de la MHD, réparties selon la figure 4.5.7.

Les données initiales sont détaillées en table 4.5.1. Le domaine $[-0.5, 0.5]$ est discrétisé en 1000 mailles, le pas d'espace est constant. Le temps final est de 0.1 s. Dans un premier temps, on utilise un schéma GD du premier ordre (approximation en espace constante par maille et intégration en temps par une méthode d'Euler) pour une CFL de 0.8. On compare les flux de Rusanov, HLLD et de VFRoe à la solution exacte (voir figures 4.5.9, 4.5.10, 4.5.11 et 4.5.12). Puis on propose une comparaison des schémas Galerkin discontinu des premier et troisième ordre, tous deux utilisant un flux de Rusanov. Les résultats correspondants sont présentés en figures 4.5.13, 4.5.14, 4.5.15 et 4.5.16. On constate que les oscillations dans les chocs sont assez importantes. Les figures 4.5.17, 4.5.18, 4.5.19 et 4.5.20 illustrent l'effet du limiteur de pentes : les oscillations n'apparaissent plus dans les chocs, mais sont étalées dans les états constants.

État gauche	État droit
$\rho_L = 1.08$	$\rho_R = 1.$
$u_L = 1.2$	$u_R = 0.$
$v_L = 0.$	$v_R = 0.$
$w_L = 0.$	$w_R = 0.$
$p_L = 0.95$	$p = 1.$
$B_{x,L} = 2./\sqrt{4\pi}$	$B_x = 2.\sqrt{4\pi}$
$B_{y,L} = 3.6\sqrt{4\pi}$	$B_y = 4.\sqrt{4\pi}$
$B_{z,L} = 2.\sqrt{4\pi}$	$B_z = 2.\sqrt{4\pi}$

FIG. 4.5.8 – Données initiales du test des sept ondes.

FIG. 4.5.9 – Sept ondes : ρ au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

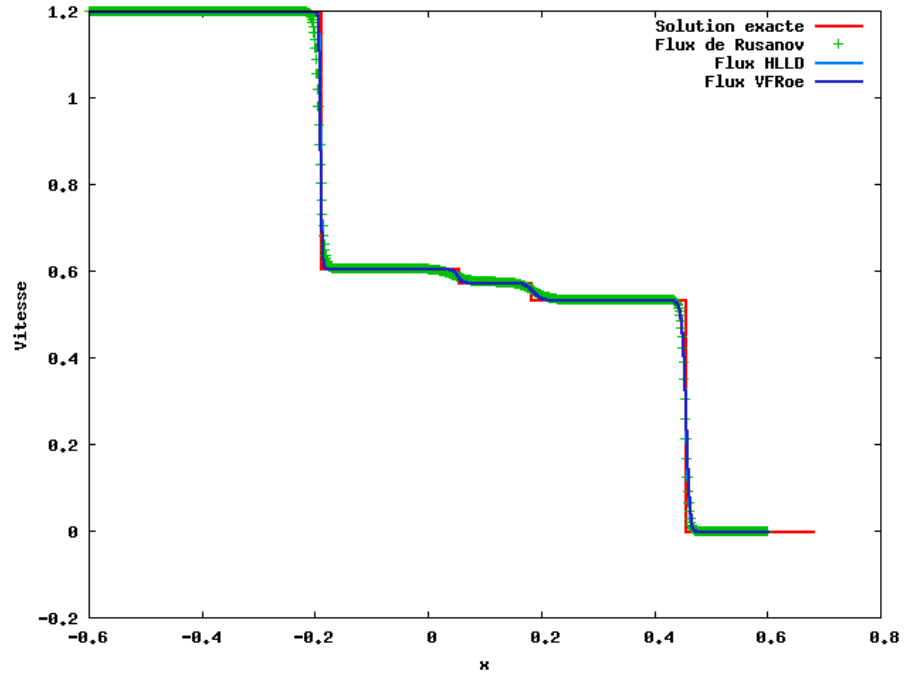


FIG. 4.5.10 – Sept ondes : u_x au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

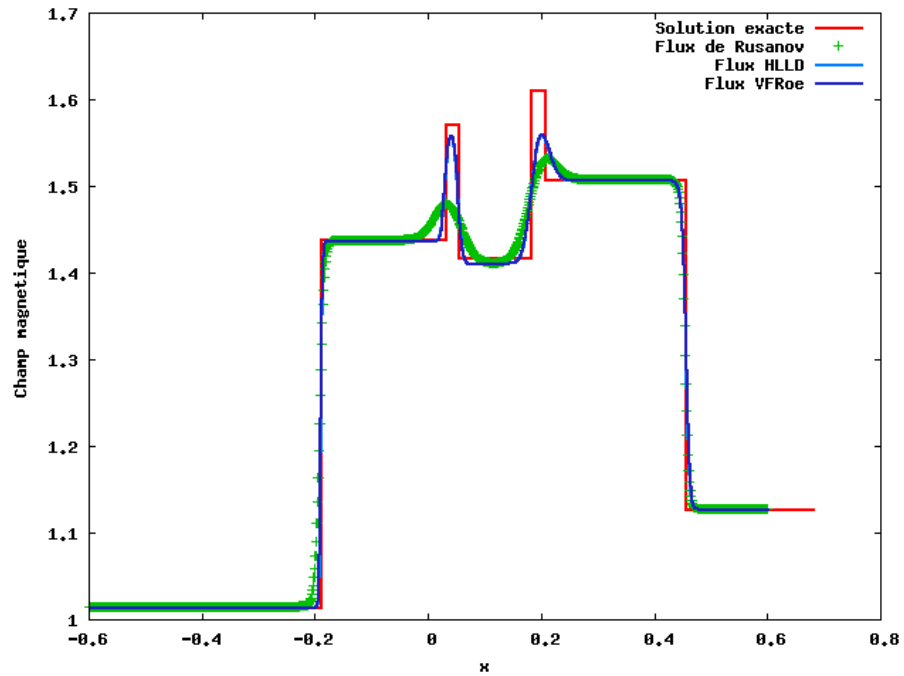


FIG. 4.5.11 – Sept ondes : B_y au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

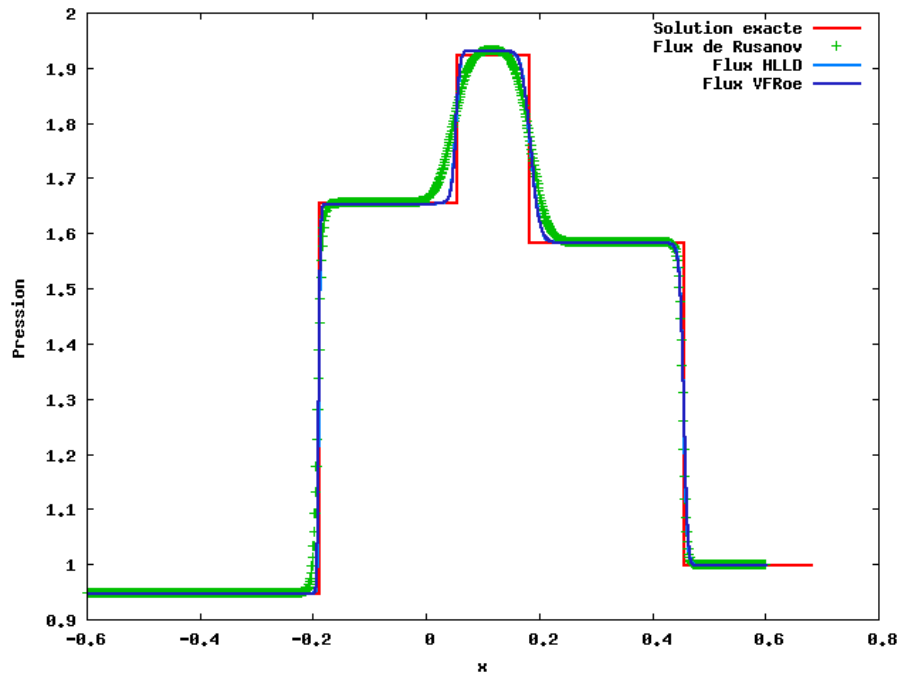


FIG. 4.5.12 – Sept ondes : p au temps $t = 0.1$ s pour une résolution de $\Delta x = 0.001$.

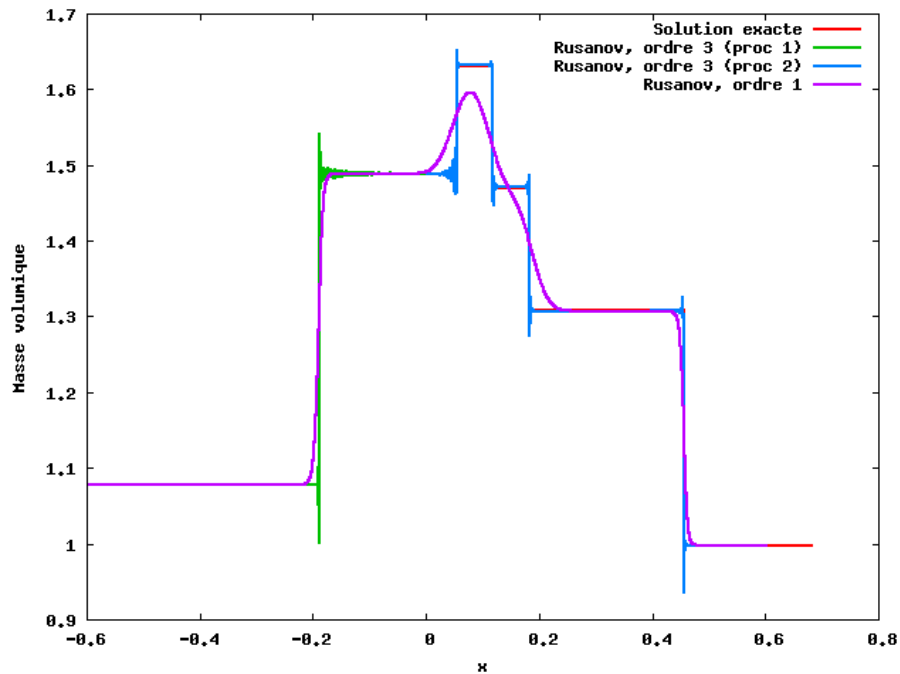


FIG. 4.5.13 – Sept ondes, ordre 3, sans limiteur de pente : ρ au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

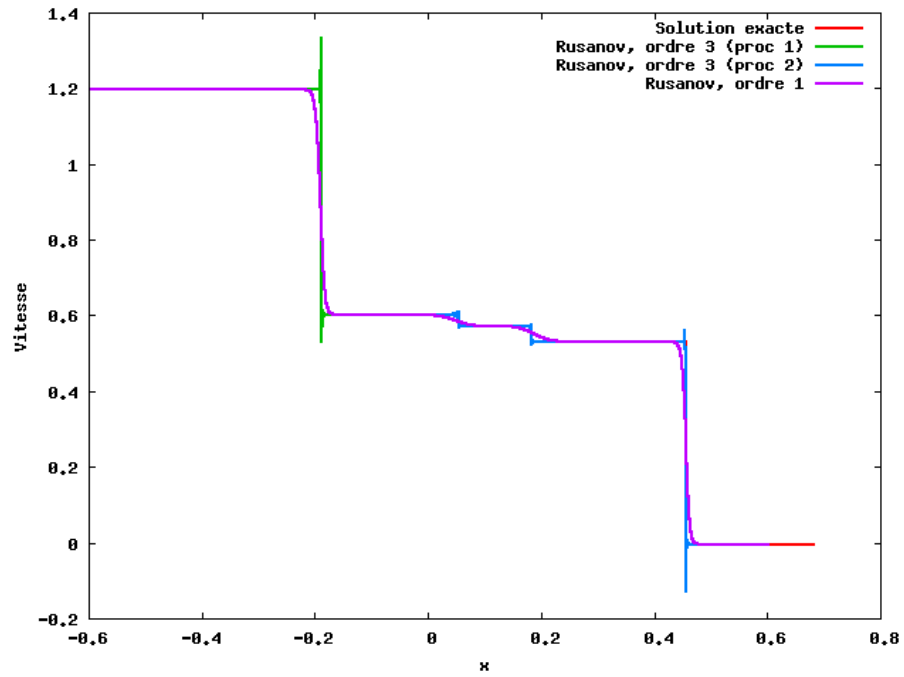


FIG. 4.5.14 – Sept ondes, ordre 3, sans limiteur de pente : u_x au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

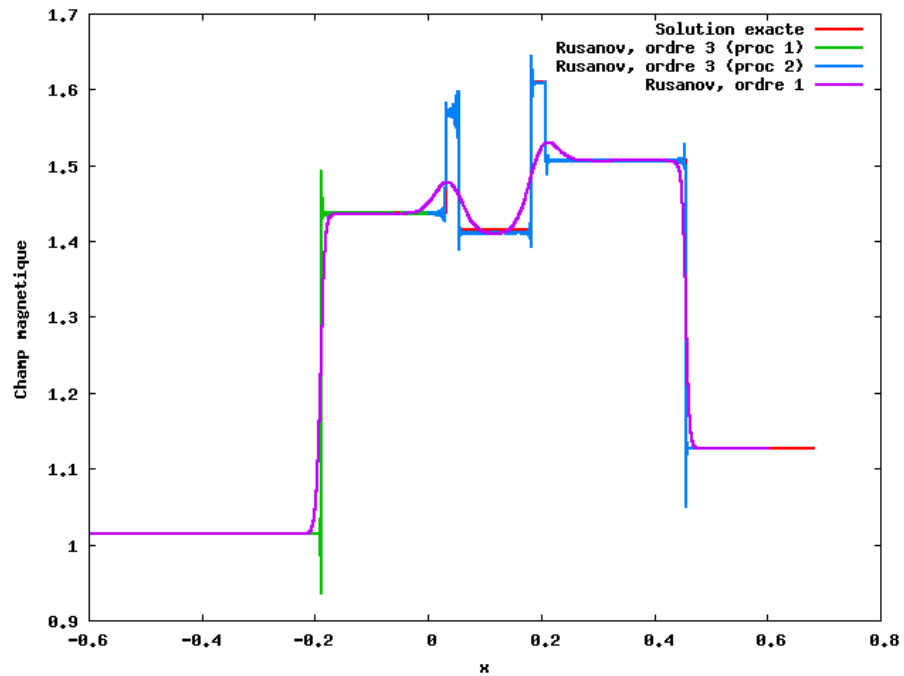


FIG. 4.5.15 – Sept ondes, ordre 3, sans limiteur de pente : B_y au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

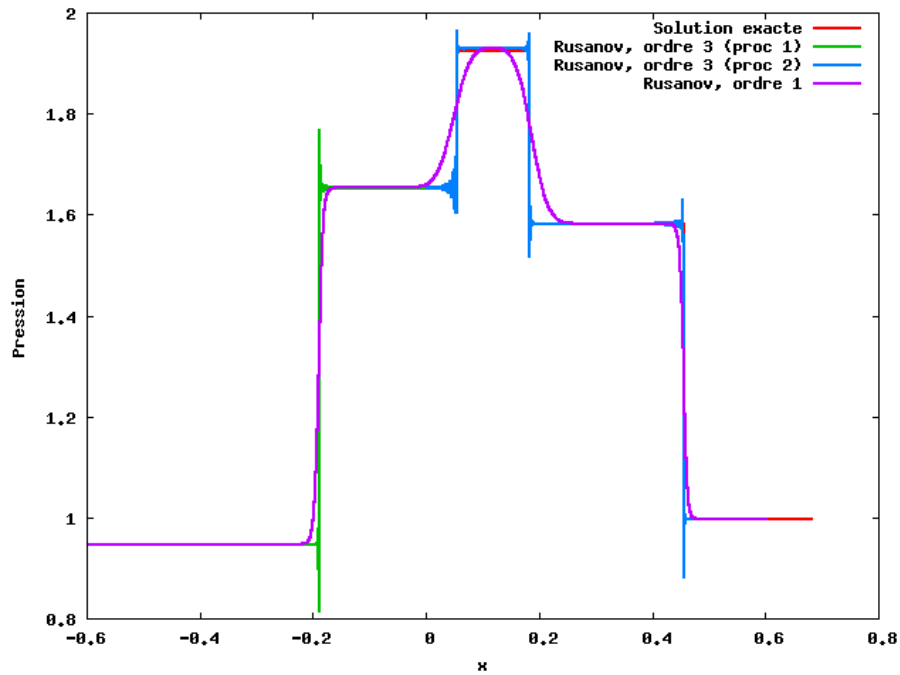


FIG. 4.5.16 – Sept ondes, ordre 3, sans limiteur de pente : p au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

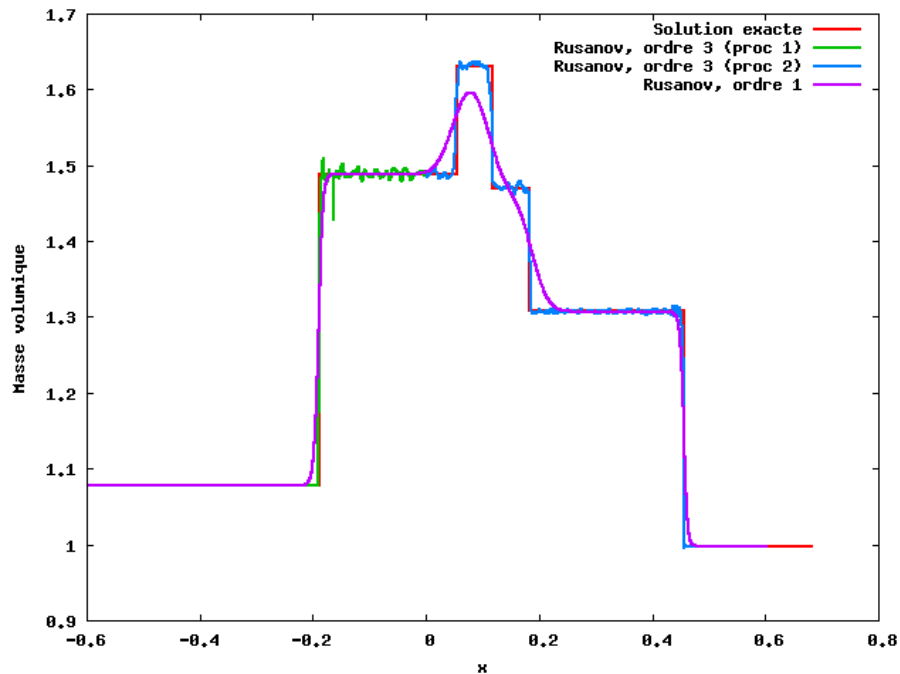


FIG. 4.5.17 – Sept ondes, ordre 3, avec limiteur de pente : ρ au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

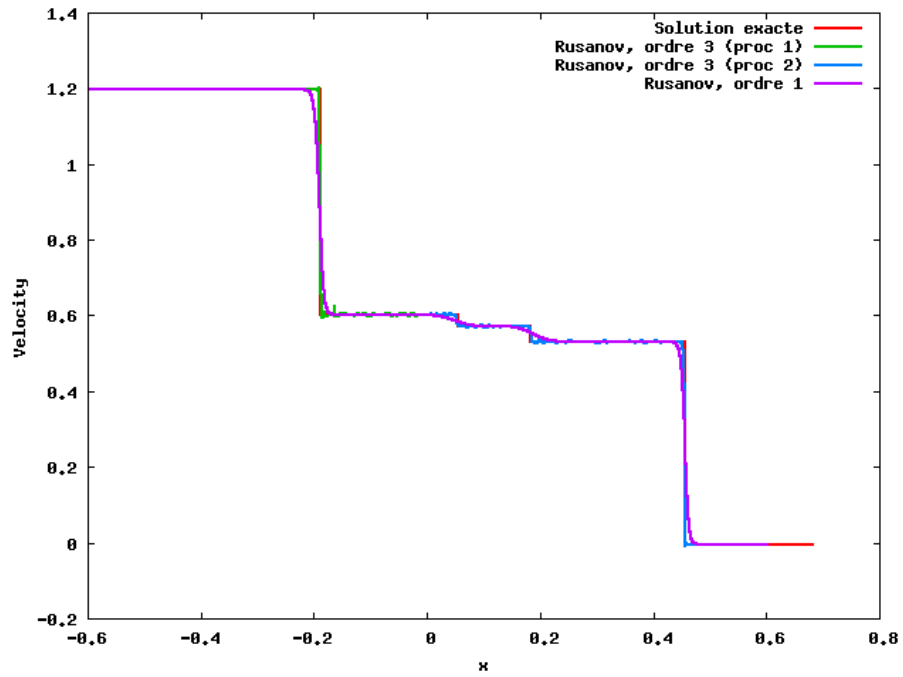


FIG. 4.5.18 – Sept ondes, ordre 3, avec limiteur de pente : u_x au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

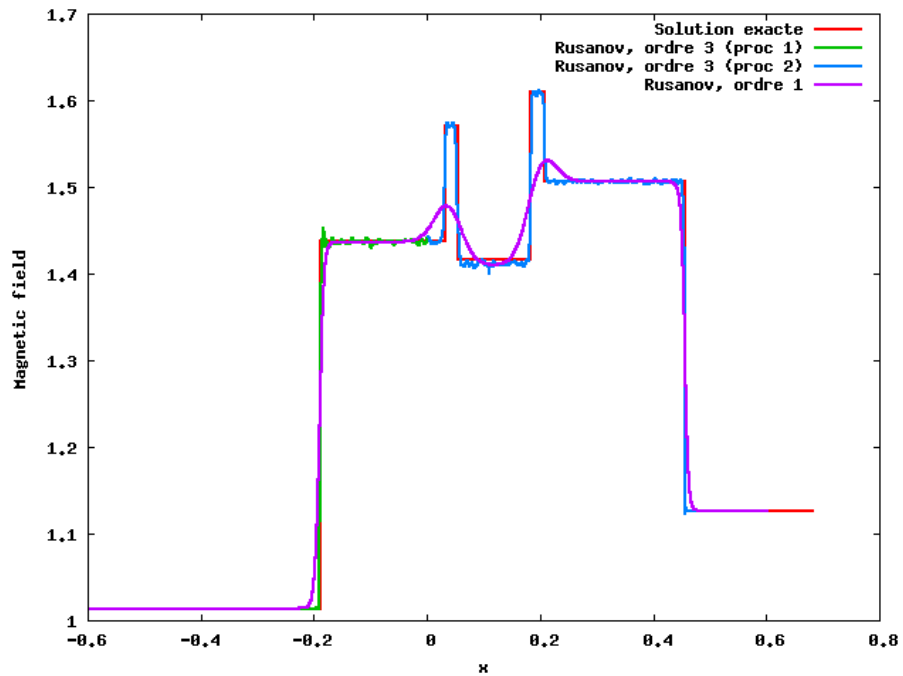


FIG. 4.5.19 – Sept ondes, ordre 3, avec limiteur de pente : B_y au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

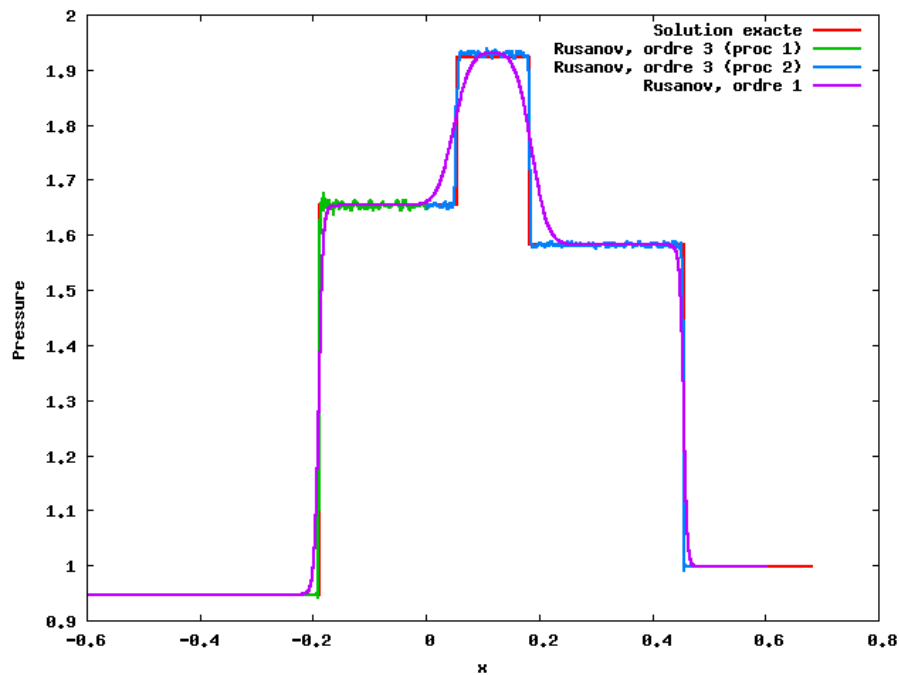


FIG. 4.5.20 – Sept ondes, ordre 3, avec limiteur de pente : p au temps $t = 0.1$ s avec $\Delta x = 0.001$.

4.5.2 Résultats numériques bidimensionnels

Convergence

Comme pour le cas monodimensionnel, l'erreur de convergence en norme L^1 est calculée sur la convection d'une fonction sinusoïdale, de période 2π , sur le domaine périodique. La figure 4.5.21 présente le taux de convergence pour les ordres 1 et 2. À nouveau les discontinuités de pentes sont probablement dues au fait que la méthode d'Adams-Bashforth est initialisée par une méthode d'ordre moins élevé sur plusieurs pas de temps. Cela est sans doute aussi une conséquence de l'utilisation d'un maillage non structuré : en pratique le générateur de maillage GMSH produit des grilles à deux niveaux de CFL. L'algorithme de pas de temps local est donc activé pour les plus petites cellules. De plus, il n'est possible de contrôler la taille des mailles que sur le bord du domaine. Il faut donc considérer les taux de convergence mesurés plus comme des valeurs pratiques que théoriques. Malgré ces fluctuations, la courbe d'erreur est cohérente : la pente moyenne décroît avec l'ordre de la méthode.

Déplacement d'un vortex

On considère une perturbation du champ magnétique, qui est transportée sur le domaine de calcul selon un angle de 45° . Le domaine est périodique dans toutes les directions. Le temps de calcul est de $t = 10$ s. Au temps final, le vortex doit retrouver sa position initiale, après avoir traversé le domaine une fois exactement. Ce test nous permet d'étudier la précision du schéma pour les conditions initiales

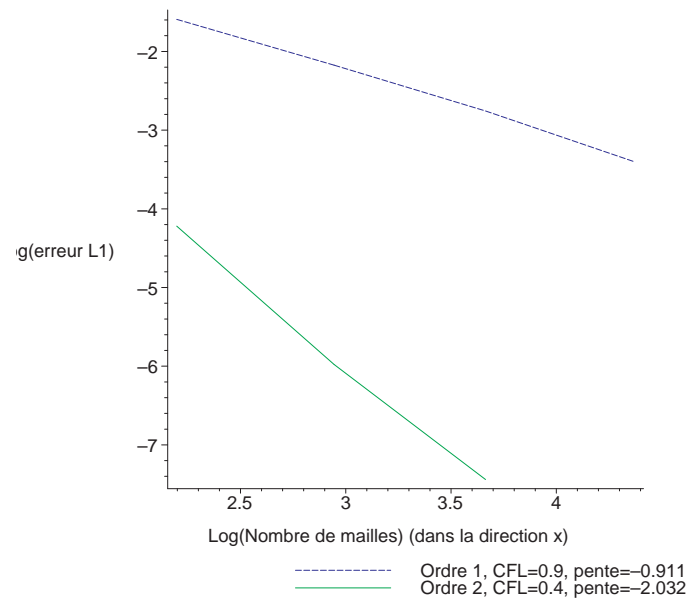


FIG. 4.5.21 – Erreur en norme L^1 : ρ sans limiteur de pente.

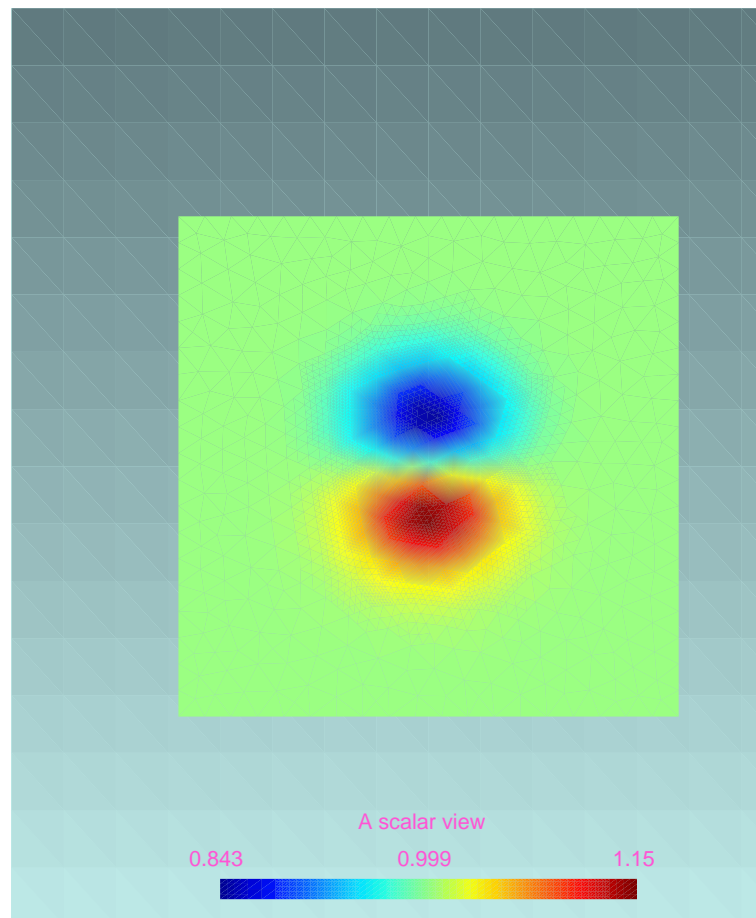
suivantes :

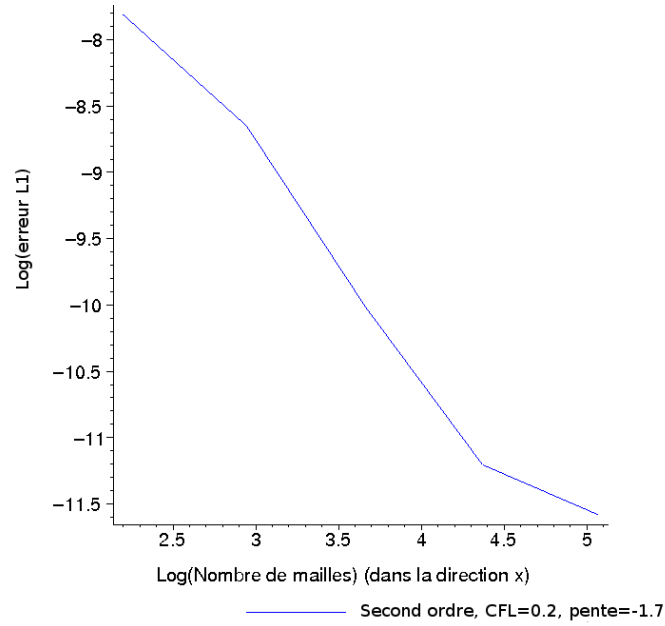
$$(\rho, u, v, w, p, B_x, B_y, B_z) = (1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0). \quad (4.88)$$

Le coefficient adiabatique est $\gamma = \frac{5}{3}$. La position initiale du vortex est le centre du domaine. Une perturbation est appliquée sur les champs de vitesse et magnétique à l'instant initial. La condition initiale est de la forme :

$$\begin{aligned} \rho(x) &= 1, \\ u(x) &= 1 - y \frac{\kappa}{2\pi} \exp\left(\frac{1}{2}(1 - r^2)\right), \\ v(x) &= 1 + x \frac{\kappa}{2\pi} \exp\left(\frac{1}{2}(1 - r^2)\right), \\ w(x) &= 0, \\ p(x) &= 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\mu}{2\pi}\right)^2 (1 - r^2) \exp(1 - r^2), \\ b_x(x) &= -y \frac{\mu}{2\pi} \exp\left(\frac{1}{2}(1 - r^2)\right), \\ b_y(x) &= x \frac{\mu}{2\pi} \exp\left(\frac{1}{2}(1 - r^2)\right), \\ b_z(x) &= 0, \\ \psi(x) &= 1. \end{aligned}$$

On impose $\kappa = 1.0$, $\mu = 1.0$ et $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Le profil du champ magnétique est présenté en figure 4.5.22. La comparaison à la donnée initiale nous donne une estimation de l'erreur en norme L^1 pour la densité (voir la figure 4.5.23).

FIG. 4.5.22 – Test du vortex : champ de vitesse \mathbf{u} .

FIG. 4.5.23 – Erreur en norme L^1 : ρ sans limiteur de pente

4.5.3 Instabilités de Kelvin Helmholtz

On s'intéresse à un test proposé dans [DKK⁺02]. Il s'agit d'instabilités de Kelvin-Helmholtz propagées sur un domaine $[0, 1] \times [-1, 1]$ aux conditions aux limites périodiques. Le maillage utilisé est présenté en figure 4.5.24 : il admet 3 niveaux de CFL. La condition initiale est donnée par

$$(\rho, u_1, u_2, u_3, p, B_1, B_2, B_3) = (1, u_x^0, u_y^0, 0, 1, 0, 0, 50), \quad (4.89)$$

$$\begin{aligned} u_x^0(x, y) &= 5(\tanh(20(y + 0.5)) \\ &\quad - (\tanh(20(y - 0.5)) + 1)), \end{aligned} \quad (4.90)$$

$$\begin{aligned} u_y^0(x, y) &= 0.25 \sin(2\pi x)(e^{-100(y+0.5)^2} \\ &\quad - e^{-100(y-0.5)^2}). \end{aligned} \quad (4.91)$$

Le temps de calcul est $T_{final} = 0.5$ s et $CFL = 0.4$. On utilise une approche de pas de temps local qui permet de passer de 5 967 s de temps de calcul à 4 573 s. On présente l'évolution de la masse volumique pour le premier et le second ordre en figure 4.5.25.

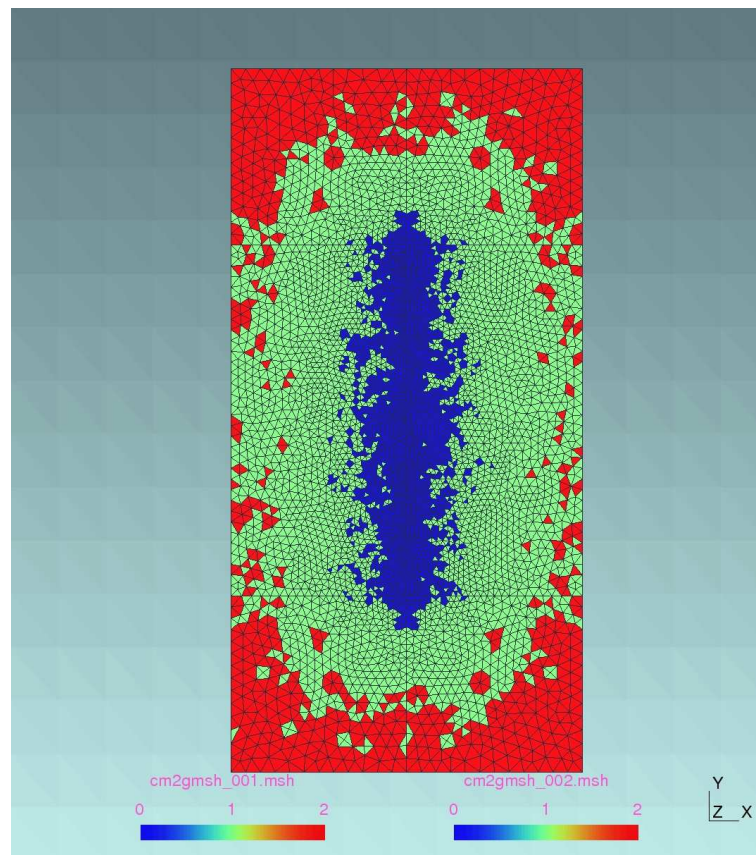


FIG. 4.5.24 – Maillage utilisé pour les instabilités de Kelvin-Helmholtz.

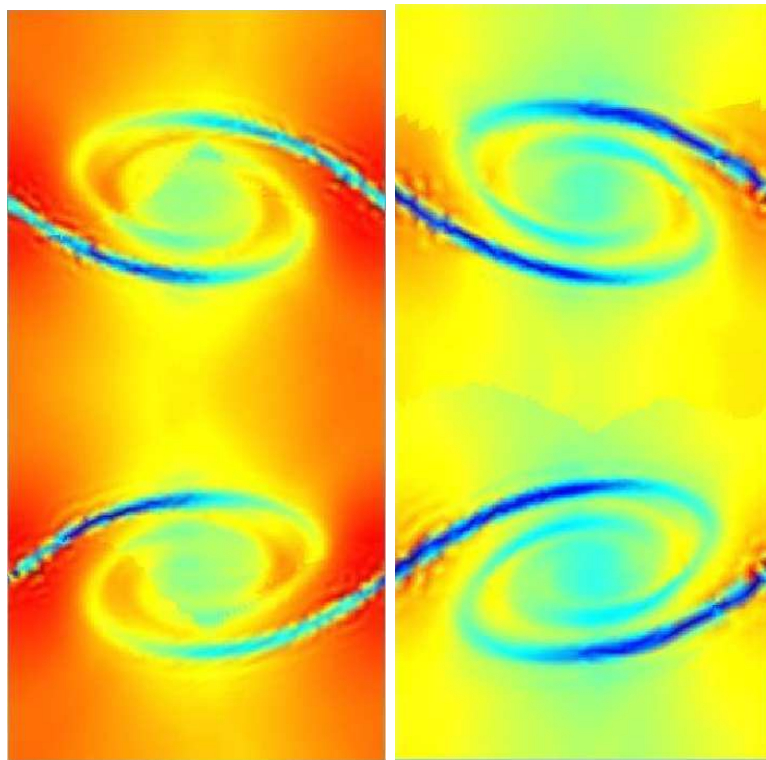


FIG. 4.5.25 – Masse volumique pour les instabilités de Kelvin-Helmholtz : à gauche, premier ordre, $\rho \in [0.62, 1.22]$, à droite, second ordre, $\rho \in [0.62, 1.26]$.

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit la mise en œuvre d'une méthode d'ordre élevé pour des modèles de fluides complexes. Nous avons incorporés ces algorithmes dans un code 3D parallèle pour résoudre des systèmes hyperboliques de lois de conservation (CM2 : Code Multi-physique Multi-échelle).

Le schéma Galerkin discontinu proposé peut être appliqué à des écoulements tridimensionnels sur maillages non-structurés. La méthode présente de bonnes propriétés. La discrétisation en espace est entropique. L'usage de flux numérique, comme celui de VFRoe introduit au chapitre 3, permet d'augmenter la précision du schéma.

L'originalité de notre méthode réside dans la discrétisation en temps. D'une part, l'intégration par une méthode d'Adams-Bashforth ne nécessite qu'un calcul de flux par pas de temps, à l'inverse des méthodes de Runge-Kutta d'ordre k qui nécessitent k appels aux flux. Bien que la condition de stabilité des méthodes d'Adams-Bashforth soit plus restrictive que celle des approches Runge-Kutta, la méthode demeure compétitive si l'on se restreint à des méthodes d'ordre 3. Un avantage majeur de l'intégration par les méthodes d'Adams est qu'elles facilitent l'usage de techniques de pas de temps locaux. Il s'agit d'utiliser plusieurs micro pas de temps, établis selon le pas d'espace local, pour évaluer les termes de flux et les termes sources. Une fois le macro pas de temps atteint, la synchronisation est effectuée de sorte que le schéma reste conservatif et consistant. L'algorithme en temps permet au final d'optimiser le temps de calcul de manière significative.

La précision du schéma est fortement augmentée avec la montée en ordre, en témoignent les simulations numériques. Toutefois le schéma, comme d'autre méthode d'ordre élevé, présente des oscillations non physiques dans les chocs. Il est nécessaire d'introduire un limiteur de pentes. On utilise dans ce chapitre un limiteur très simple, conservatif et entropique. Il est très satisfaisant pour les problèmes unidimensionnels. Il s'avère cependant trop robuste et dissipatif en dimensions supérieures.

Le schéma Galerkin discontinu est bien approprié à la modélisation de fluides conducteurs. Il était donc naturel de s'intéresser aux équations de la magnétohydrodynamique. Ce système inclut une condition de divergence nulle sur le champ magnétique. Or la résolution de ce type d'équation mène à des difficultés numériques. Les méthodes pour gérer la divergence sont nombreuses. On a choisi d'appliquer celle introduite par Kröner *et al.* dans [DKK⁺02]. La méthode dite de « divergence cleaning » est facile à mettre en œuvre et donne de bons résultats numériques.

D'autre part, un aspect intéressant du système de la MHD idéale est que le problème de Riemann peut admettre des solutions multiples. Dans le cas de données initiales coplanaires pour le champ magnétique, certaines valeurs propres peuvent coïncider. L'étude d'un modèle simplifié nous a permis de mettre en avant ce phénomène et d'en donner des illustrations numériques.

ÉTUDE DE LA THERMODYNAMIQUE DE CHANGEMENT DE PHASE : CONSTRUCTION DE LOIS D'ÉTAT ADMISSIBLES

Cette partie est consacrée à la modélisation d'écoulements avec transition de phase, ou plus précisément aux lois de comportements qui interviennent dans ce type d'écoulements. L'évolution de tels fluides est décrite par les équations d'Euler, auxquelles on adjoint une loi d'état qui définit la pression du fluide comme une fonction de la masse volumique et de l'énergie. Selon les principes de la thermodynamique, cette loi de pression doit satisfaire des contraintes de convexité qui assurent, notamment, l'hyperbolicité du système d'Euler. L'équation de van der Waals est un modèle classique de transition de phase. Il est bien connu que cette loi d'état n'est pas globalement convexe. De ce fait, les équations du fluide sont de type hyperbolique/elliptique [MP89]. Pour retrouver une loi d'état admissible, il est nécessaire d'appliquer la construction de Maxwell (ou loi des aires égales). Cette construction revient à calculer l'enveloppe convexe de l'énergie de van der Waals. Le principe de convexification intervient également lorsque l'on souhaite mélanger plusieurs fluides décrits par des lois différentes. Les outils d'approximation standards, tels que l'interpolation polynomiale, ne préservent en général pas la convexité ce qui peut entraîner des comportements non physiques. Dans cette partie on montre que la structure naturelle pour la construction de lois d'état admissibles est la théorie des algèbres dites max-plus [KM97], elles-mêmes étroitement liées à la transformée de Legendre-Fenchel. Ces outils sont d'ordinaire utilisés pour des problèmes de contrôle optimal ou en théorie des probabilités. Une fois la

structure établie, on en déduit naturellement des algorithmes de construction de lois d'état admissibles pour modéliser des fluides réels.

Le plan de cette partie est le suivant.

Dans un premier chapitre, on rappelle la théorie de la thermodynamique pour une phase pure (liquide ou vapeur typiquement). L'énergie interne est une fonction convexe de l'entropie et du volume du fluide, aussi bien en variables extensives qu'intensives. Puis l'on s'intéresse à la thermodynamique de mélange. Il est important de distinguer les mélanges selon qu'ils soient miscibles ou non.

On considère donc d'abord un mélange immiscible de deux phases d'un même corps pur comme dans [HS06]. D'après le principe d'énergie minimale, l'énergie du mélange s'avère être l'inf-convolution des énergies de chaque phase en variables extensives. Puis considérant les variables intensives, on montre que l'énergie du mélange est l'enveloppe convexe du minimum des deux énergies. Cette propriété est bien connue (voir [Fac08] par exemple).

De manière similaire, on parvient à formuler l'énergie d'un mélange miscible comme une inf-convolution des énergies de chaque phase, que ce soit en variables extensives ou intensives.

Les opérations d'inf-convolution et de convexification du minimum sont des opérations relativement complexes. Or, par transformée de Legendre, elles deviennent nettement plus simples puisqu'elles sont transformées respectivement en addition et maximum. La transformée de Legendre joue donc un rôle particulier pour la construction de lois d'état à l'équilibre. Par ailleurs, comme la transformée de Fourier, la transformée de Legendre peut être calculée numériquement au moyen d'un algorithme rapide (voir Brenier [Bre89] et Lucet [Luc96, Luc97]). Au chapitre 6 sont rappelées les propriétés générales de la transformée de Fenchel-Legendre. On détaille également un algorithme de transformée de Legendre rapide (TLR).

Le chapitre 7 est consacré aux applications numériques de la TLR dans le cadre thermodynamique. Dans un premier temps, on montre que la transformée de Legendre permet de définir facilement des changements de variables utiles. Ceux-ci sont utilisés notamment dans le calcul numérique des courbes isothermes. Les applications numériques concernent ensuite la convexification de la loi de van der Waals. En effet, appliquer successivement deux transformées de Legendre revient à convexifier l'énergie de van der Waals, qui est initialement non convexe. Nous montrons aussi que la convexification de l'énergie est équivalente à la construction de Maxwell, ou loi des aires égales. Nous vérifions que la transformée de Legendre discrète permet de retrouver numériquement ces résultats. Ensuite, on s'intéresse à l'équilibre d'un mélange immiscible de deux gaz parfaits. Les résultats sont en accord avec ceux obtenus par Jaouen [Jao01] et Helluy et Seguin [HS06]. On propose également l'étude d'un mélange miscible pour illustrer la généralité de notre approche. Une étude analogue est menée sur un mélange de gaz raides.

THERMODYNAMIQUE DU CHANGEMENT DE PHASE

Ce chapitre concerne la description thermodynamique de la transition de phase liquide-vapeur et la construction de lois d'état admissibles de changement de phase. On rappelle d'abord des résultats classiques de thermodynamique écrits pour un seul fluide (inspirés des ouvrages de thermodynamique de Callen [Cal85] et Landau et Lifschitz [LE94]). L'énergie extensive d'un fluide est une fonction convexe de ses arguments : le volume, la masse et l'entropie. Ces propriétés de convexité assurent notamment l'hyperbolicité des équations d'Euler. Or lorsque la transition de phase intervient, l'énergie du fluide perd sa convexité. Pour retrouver la stabilité il faut considérer la convexifiée de l'énergie. On rappelle comment sont construites les courbes de coexistence dans le plan pression-température (ou courbes de saturation) ainsi que les courbes isothermes, caractérisant le dôme de saturation, dans le plan pression-volume.

Une autre manière de construire une loi d'état pour la transition de phase consiste à considérer séparément les énergies extensives des phases pures liquide et gazeuse [Cal85]. D'après les principes fondamentaux de la thermodynamique, l'énergie du mélange hors équilibre est la somme des énergies de chaque phase. À l'équilibre, l'énergie du mélange tend vers un minimum. Cette construction est utilisée par exemple par Helluy et Seguin dans [HS06] ou par Faccanoni [AFK07, Fac08]. Dans ce chapitre, nous reprenons cette construction en distinguant les mélanges immiscibles et miscibles. D'une part nous montrerons que l'énergie extensive d'un mélange s'exprime comme une inf-convolution des énergies de chaque phase, quelque soit la miscibilité du mélange. Lorsque l'on passe aux variables intensives, il est nécessaire de distinguer les cas. Dans le cas immiscible l'énergie intensive de mélange est l'enveloppe convexe du minimum des énergies de chaque phase. Dans le cas miscible, l'énergie intensive volumique est définie par l'inf-convolution des énergies intensives volumiques de chaque phase. De façon analogue, on caractérise l'entropie d'un mélange diphasique en termes de sup-convolution et d'enveloppe concave.

5.1 Loi de comportement et hypothèses

5.1.1 Définition de loi d'état d'une phase pure

On considère un corps pur de masse $M \geq 0$, occupant un volume $V \geq 0$ et d'énergie $E \geq 0$. On suppose le système entièrement décrit par le vecteur :

$$\widetilde{W} = (V, M, E) \in \widetilde{C}.$$

L'ensemble \widetilde{C} est un cône convexe de \mathbb{R}^3 donné par

$$\widetilde{C} = \{\widetilde{W} = (V, M, E), V \geq 0, M \geq 0, E \geq 0\},$$

qui définit des états admissibles. Nous introduisons la fonction d'entropie du système en se référant aux ouvrages de Landau et Lifschitz [LE94]. On désigne par $P(W)$ l'ensemble de tous les états microscopiques correspondants au même état macroscopique W . On note ω_n la probabilité de l'état microscopique $n \in P(W)$. L'entropie du système est donnée par la formule de Shannon :

$$S(W) = - \sum_{n \in P(W)} \omega_n \ln(\omega_n).$$

Puisque $0 \leq \omega_n \leq 1$, l'entropie S est donc une quantité positive. Par ailleurs, l'entropie est également une quantité extensive, dont on rappelle la définition.

Définition 5.1.1. *Soit F une application de C dans \mathbb{R}^+ . La quantité F est dite extensive si et seulement si F est Positivement Homogène de degré un (ou PH1), i.e.*

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}^+, \forall W \in C, F(\lambda W) = \lambda F(W). \quad (5.1)$$

Il est aussi commode d'introduire les variables intensives.

Définition 5.1.2. *Soit F une application de C dans \mathbb{R}^+ . La quantité F est dite intensive si et seulement si F est Positivement Homogène de degré zéro (ou PH0), i.e.*

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}^+, \forall W \in C, F(\lambda W) = F(W). \quad (5.2)$$

Il s'ensuit la définition suivante.

Définition 5.1.3. *Supposons $M \neq 0$ et $V \neq 0$. Le quotient de deux quantités extensives nous permet de construire différentes variables intensives, soit massiques soit volumiques :*

- le volume massique (ou spécifique) : $\tau = \frac{V}{M}$,
- l'entropie massique (ou spécifique) : $s = \frac{S}{M}$,
- l'énergie massique (ou spécifique) : $e = \frac{E}{M}$,
- la masse volumique : $\rho = 1/\tau = \frac{M}{V}$,
- l'entropie volumique : $\sigma = \rho s = \frac{S}{V}$,
- l'énergie volumique : $\varepsilon = \rho e = \frac{E}{V}$.

Le postulat suivant rappelle les propriétés vérifiées par l'entropie [Cal85] :

Postulat 5.1.4. *L'entropie S est une fonction de classe C^1 sur le domaine \tilde{C} , extensive et concave par rapport à $\tilde{W} = (V, M, E)$. De plus la dérivée de l'entropie par rapport à l'énergie est positive : $\frac{\partial S}{\partial E} > 0$.*

Désormais on suppose l'entropie prolongée par $-\infty$ en dehors de \tilde{C} :

$$S(\tilde{W}) = \begin{cases} S(\tilde{W}), & \text{si } \tilde{W} \in \tilde{C}, \\ -\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Pour les calculs, il se trouve qu'il est plus pratique d'écrire les principes de la thermodynamique en travaillant avec l'énergie plutôt que l'entropie. Ceci se fait facilement grâce au changement de variable $(V, M, E) \rightarrow (V, M, S)$, bijectif selon le postulat 5.1.4. On choisit donc dans la suite du chapitre, de décrire le système par son énergie interne :

$$E : (V, M, S) \rightarrow E(V, M, S).$$

On notera $W = (V, M, S)$ le vecteur d'état et C le cône convexe de contraintes

$$C = \{W = (V, M, S), V \geq 0, M \geq 0, S \geq 0\}.$$

De façon analogue à l'entropie, l'énergie satisfait les propriétés suivantes :

Proposition 5.1.5. *L'énergie est une fonction de classe C^1 sur le domaine C , extensive et convexe par rapport à $W = (V, M, S)$ et $\frac{\partial E}{\partial S} > 0$.*

Démonstration. D'après le principe de conservation de l'énergie d'un système, l'énergie est une quantité additive. Ceci implique que c'est une variable extensive. Nous utilisons le postulat 5.1.4 pour prouver la convexité de l'énergie. Puisque l'entropie S est concave par rapport à $\tilde{W} = (V, M, E)$, la surface d'équation $S = S(V, M, E)$ délimite une région convexe $\Omega = \{S \leq S(V, M, E)\}$. Or par hypothèse, on sait que $\frac{\partial S}{\partial E} > 0$. L'entropie S est donc une fonction croissante de l'énergie E . Alors l'ensemble convexe Ω peut être défini comme $\Omega = \{E \geq E(V, M, S)\}$. On en déduit que $E(V, M, S)$ est une fonction convexe de ses arguments $W = (V, M, S)$. Puisque S est de classe C^1 , il en est de même pour l'énergie. \square

L'énergie est donc étendue par $+\infty$ en dehors du domaine C . On sait par ailleurs que l'énergie vérifie la formule fondamentale :

$$dE = TdS - pdV + \mu dM, \quad (5.4)$$

où T désigne la température, p la pression et μ le potentiel de Gibbs ou potentiel chimique. On en déduit que :

$$T = \frac{\partial E}{\partial S}, \quad (5.5)$$

$$p = -\frac{\partial E}{\partial V}, \quad (5.6)$$

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial M}. \quad (5.7)$$

En tant que dérivées partielles de fonctions PH1, ces quantités sont des variables intensives. La relation d'Euler pour les fonctions PH1 se traduit par :

$$E(W) = \nabla E(W) \cdot W, \quad (5.8)$$

soit :

$$\begin{aligned} E &= M \frac{\partial E}{\partial M} + V \frac{\partial E}{\partial V} + S \frac{\partial E}{\partial S} \\ &= M\mu - Vp + ST. \end{aligned}$$

En divisant cette relation par $M \neq 0$, on déduit

Proposition 5.1.6. *La relation de Gibbs définit le potentiel chimique comme étant :*

$$\mu = \tau p - Ts + e. \quad (5.9)$$

Puisque l'énergie E est une fonction PH1, en divisant (5.4) par M , on obtient la relation intensive suivante :

Proposition 5.1.7. *La relation fondamentale (5.4) admet une formulation intensive massique :*

$$de = Tds - pd\tau. \quad (5.10)$$

La relation (5.10) se traduit en variables volumiques :

$$d\varepsilon = Td\sigma + \mu d\rho. \quad (5.11)$$

Démonstration. Ce résultat repose sur la traduction de la relation fondamentale (5.10) et sur la définition des variables intensives e et ε (voir définition 5.1.3) :

$$\begin{aligned} de &= Tds - pd\tau \\ &= Td\left(\frac{\sigma}{\rho}\right) - pd\left(\frac{1}{\rho}\right) \\ &= \frac{T}{\rho}d\sigma - \frac{T\sigma}{\rho^2}d\rho + \frac{p}{\rho^2}d\rho. \end{aligned}$$

or $e = \varepsilon/\rho$, d'où :

$$d\varepsilon = Td\sigma + \left(\frac{p - T\sigma + \varepsilon}{\rho}\right) d\rho.$$

Or le potentiel chimique est donné par la relation de Gibbs (5.9) :

$$\mu = \tau p - Ts + e = \frac{p - T\sigma + \varepsilon}{\rho}.$$

Ceci mène à la conclusion. □

Pour que l'énergie vérifie les propriétés thermodynamiques usuelles, on suppose que les quantités T et p sont positives. Ainsi l'énergie e (resp. ε) est une fonction croissante de s (resp. σ) et décroissante de τ (resp. ρ). De plus la convexité de l'énergie est préservée en variables intensives :

Proposition 5.1.8. *Les équations d'état $e = e(\tau, s)$ et $\varepsilon = \varepsilon(\rho, \sigma)$ sont des fonctions convexes de leurs arguments.*

Démonstration. On rappelle que

$$e(\tau, s) = E\left(1, \frac{V}{M}, \frac{S}{M}\right).$$

D'après le postulat 5.1.5, l'énergie extensive est une fonction convexe de ses arguments. La section $E\left(1, \frac{V}{M}, \frac{S}{M}\right) = E(1, \tau, s)$ est donc également convexe, ce qui prouve la convexité de l'énergie spécifique e . La preuve s'applique de façon analogue à l'énergie volumique ε . \square

De la même façon, on prouve que les entropies intensives s et σ sont des fonctions concaves de leurs arguments.

Par la suite on suppose les fonctions e et ε strictement convexes de classe \mathcal{C}^2 , dans le cas de corps pur. On verra par la suite que les énergies sont simplement de classe C^1 dans le cas de mélange (voir théorème 5.2.10).

Remarques 5.1.9.

1. La positivité de la température et la stricte convexité de e implique que le changement de variable $(\tau, s) \mapsto e$ peut être inversé globalement et s'écrire $(\tau, e) \mapsto s$. En d'autres termes la relation $(\tau, s) \mapsto (\tau, e)$ est un difféomorphisme global lorsque e est strictement convexe [Cro91]. De ce fait l'entropie $(\tau, e) \mapsto s$ admet des propriétés analogues à l'énergie $(\tau, s) \mapsto e$.
2. La concavité de l'entropie s implique l'hyperbolicité du système d'Euler dès lors que la température T est positive. En effet le système a pour valeurs propres $u - c$, u et $u + c$, où u désigne la vitesse du fluide et c la vitesse du son, qui dépend de la pression $p(\tau, e)$ selon :

$$c^2 = \tau^2 \left(p \frac{\partial p}{\partial e} - \frac{\partial p}{\partial \tau} \right).$$

La relation (5.10) nous mène à la formulation suivante :

$$\rho^2 c^2 = -T \left(p^2 \frac{\partial^2 s}{\partial e^2} - 2p \frac{\partial^2 s}{\partial \tau \partial e} + \frac{\partial^2 s}{\partial \tau^2} \right). \quad (5.12)$$

Puisque l'entropie s est concave, sa matrice hessienne est semi-définie négative. Ceci implique que la vitesse du son c est réelle si et seulement si $T > 0$. Contrairement aux hypothèses de concavité de s et de positivité de T , la condition $p > 0$ n'est absolument pas nécessaire pour garantir l'hyperbolicité du système d'Euler. Concernant la validité des changements de variables et la convexité des potentiels correspondants, on peut se référer à la thèse de Croisille [Cro91].

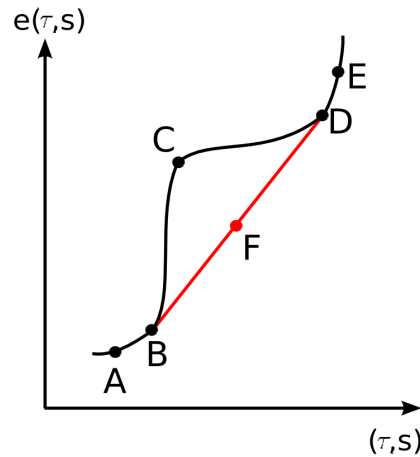


FIG. 5.1.1 – L'équation d'état e est donnée par la courbe ABCDE. Puisqu'elle est non convexe, la portion BCD est remplacée par le segment BFD .

5.1.2 Description du changement de phase avec un seul fluide

Il s'agit maintenant de faire le lien entre la thermodynamique d'une phase pure et le comportement d'un fluide en transition de phase. Dans le cas d'une phase pure, l'énergie (resp. l'entropie) du fluide est une fonction convexe (resp. concave). Lorsque le système présente une transition de phase, l'énergie (resp. l'entropie) perd sa convexité (resp. concavité). Cette description du phénomène de changement de phase est classique (voir Callen [Cal85], Jaouen [Jao01] par exemple). Nous reprenons ici quelques aspects de cette description.

Considérons la figure 5.1.1 qui décrit le comportement de l'énergie interne e en fonction de ses arguments τ et s . Les états AB et DE désignent des phases pures (une seule phase). La courbe ABCDE traduit le passage d'une phase pure à l'autre. On observe que cette courbe est non convexe et conduit donc à des instabilités (voir [Cal85]). De manière à garantir la convexité de l'énergie, il faut remplacer la courbe BCD par le segment BFD. Les états appartenant à ce segment sont des combinaisons convexes des états B et D.

Le long de ce segment, l'énergie vérifie :

$$\begin{aligned}\frac{\partial e}{\partial \tau|_s} &= -p = \frac{e_B - e_D}{\tau_B - \tau_D} = \text{cste}, \\ \frac{\partial e}{\partial s|_\tau} &= T = \frac{e_B - e_D}{s_B - s_D} = \text{cste}.\end{aligned}$$

D'après la relation de Gibbs (5.9), le potentiel chimique μ est donc aussi constant le long du segment BD. On en déduit que la transition de phase se fait à pression, température et potentiel de Gibbs constants. Ainsi deux phases pures ne peuvent exister à l'équilibre thermodynamique qu'à condition que les pressions et températures de chaque phase soient égales. Les relations entre pression et température définissent une courbe dans le plan (T, p) . Cette courbe est appelée courbe de coexistence ou de saturation (voir figure 5.1.2).

On souhaite déterminer l'équation de la courbe de coexistence entre les phases liquide et gazeuse. Pour ce faire on considère le potentiel chimique μ de chaque

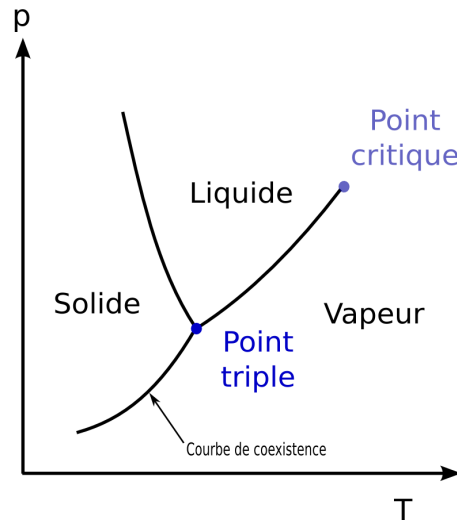


FIG. 5.1.2 – Courbe de coexistence.

phase. Remarquons d'abord que le potentiel chimique est une fonction de la pression p et de la température T . D'après la relation de Gibbs (5.9) et la relation fondamentale (5.10), on peut exprimer la différentielle du potentiel chimique selon :

$$d\mu = s dT - \tau dp. \quad (5.13)$$

Ainsi μ est une fonction de p et T , dont les dérivées sont :

$$\frac{\partial \mu}{\partial p} = -\tau, \quad \frac{\partial \mu}{\partial T} = s.$$

Considérons un point (\tilde{p}, \tilde{T}) de la courbe de coexistence. Les potentiels de Gibbs des phases gazeuse et liquide en ce point vérifient :

$$\mu_{vap}(\tilde{p}, \tilde{T}) = \mu_{liq}(\tilde{p}, \tilde{T}),$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_{vap}}{\partial p} &= -\tau_{gaz}, & \frac{\partial \mu_{liq}}{\partial p} &= -\tau_{liq}, \\ \frac{\partial \mu_{vap}}{\partial T} &= s_{gaz}, & \frac{\partial \mu_{liq}}{\partial T} &= s_{liq}. \end{aligned}$$

Les états liquide et vapeur sont néanmoins différents puisque $\tau_{vap} \neq \tau_{liq}$ et $s_{vap} \neq s_{liq}$. De fait on a la

Définition 5.1.10. *Lorsque les dérivées de μ sont discontinues, le changement de phase est du premier ordre.*

C'est le cas des transitions liquide-vapeur que l'on étudie. Toute combinaison convexe du type

$$\begin{cases} \tau = \lambda \tau_{vap} + (1 - \lambda) \tau_{liq}, \\ s = \lambda s_{vap} + (1 - \lambda) s_{liq}, \\ e = \lambda e_{vap} + (1 - \lambda) e_{liq}, \end{cases}$$

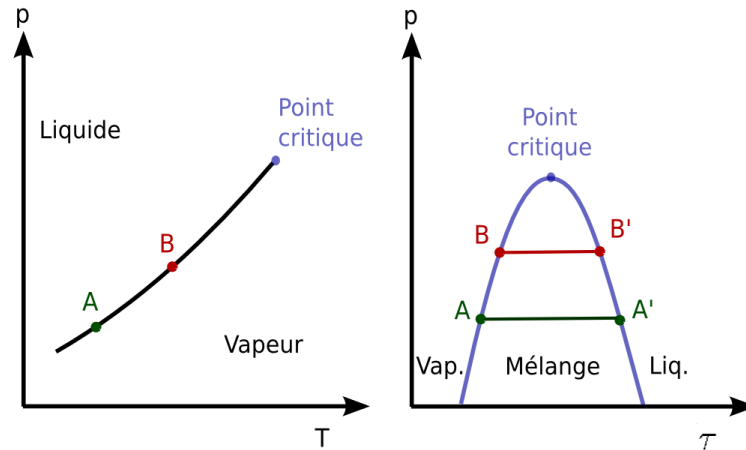


FIG. 5.1.3 – Correspondance entre courbe de coexistence et courbe de saturation : un état A appartenant à la courbe de coexistence correspond à un segment AA' dans le plan (τ, p)

définit un état à la pression \tilde{p} et à la température \tilde{T} tel que $\mu_{gaz} = \mu_{liq}$. La réunion de ces segments définit la zone dite de changement de phase.

La figure 5.1.3 présente la courbe de coexistence entre les phases liquide et vapeur à gauche et la zone de changement de phase correspondante dans le plan (τ, p) à droite. Dans ce plan la courbe délimitant les deux phases pures de la zone de mélange est la frontière du dôme de saturation. Sa projection dans le plan (T, p) est la courbe de coexistence ou courbe de saturation. Un état appartenant A à la courbe de coexistence correspond à un segment AA' dans le plan (τ, p) . L'ensemble des extrémités des segments définit les bords du dôme de saturation. Au point critique, le segment se réduit à un point. Puisque la transition de phase intervient à température et pression constantes, les segments AA' et BB' sont horizontaux dans les plans (τ, p) et (τ, T) .

Nous avons rappelé ici la description classique du phénomène de transition de phase. Dans le paragraphe suivant nous rappelons une autre description légèrement différente et moins classique (elle est cependant aussi donnée dans [Cal85]). Les phases liquide et vapeur seront désormais décrites par deux lois d'état distinctes. En utilisant le second principe de la thermodynamique, les propriétés de conservation d'énergie et d'additivité d'entropie, on parvient à caractériser les entropies et énergies du mélange. En particulier on souhaite déterminer une structure mathématique pour calculer des lois d'état de mélange, de sorte que les contraintes de convexité rappelées ci-dessus soient vérifiées.

5.2 Thermodynamique de changement de phase (description à deux fluides)

Cette dernière partie concerne la construction de lois d'état de mélange. On considère un fluide composé de deux phases. Chacune est décrite séparément par son énergie extensive E_i , dépendant de l'état $W_i \in \mathbb{R}^3$. Rappelons que l'énergie

est étendue par $+\infty$ en dehors du cône de contraintes C . Notons M la masse du mélange, V son volume, S son entropie et $W = (V, M, S)$ le vecteur d'état du mélange. De façon similaire, chaque phase peut être décrite par son entropie S_i , qui dépend alors de l'état $\widetilde{W} = (V_i, M_i, E_i) \in \mathbb{R}^3$, l'entropie étant prolongée par $-\infty$ en dehors de \widetilde{C} selon la relation (5.3). On souhaite exprimer l'énergie et l'entropie du mélange en fonction des énergies et entropies de chaque phase.

Supposons que les deux constituants du mélange ne sont pas à l'équilibre à l'instant initial $t = 0$. Par définition, l'entropie du mélange est la somme des entropies de chaque constituant :

$$S(\widetilde{W}_1, \widetilde{W}_2) = S_1(\widetilde{W}_1) + S_2(\widetilde{W}_2).$$

Au cours du temps, un équilibre s'établit progressivement entre les deux constituants. Le second principe de la thermodynamique établit que l'entropie du mélange croît jusqu'à atteindre un maximum à l'équilibre. L'optimisation de l'entropie s'effectue sur un ensemble de contraintes à déterminer. De façon similaire, lorsque les deux constituants ne sont pas à l'équilibre, l'énergie du mélange est la somme des énergies de chaque phase :

$$E(W_1, W_2) = E_1(W_1) + E_2(W_2).$$

Le principe de minimisation d'énergie est équivalent au principe de maximisation de l'entropie [Cal85] : l'énergie du mélange décroît jusqu'à atteindre un minimum à l'équilibre.

Revenons maintenant sur les contraintes dans le problème d'optimisation. La conservation de la masse impose la contrainte :

$$M = M_1 + M_2.$$

En s'appuyant sur la conservation de l'énergie, on formule la contrainte d'énergie suivante :

$$E = E_1 + E_2.$$

Afin d'exprimer l'énergie du mélange, on impose une contrainte d'entropie, en utilisant le fait que l'entropie est une quantité additive :

$$S = S_1 + S_2.$$

Que l'on minimise l'énergie ou que l'on maximise l'entropie, il faut établir une contrainte sur le volume. Pour ce faire il faut distinguer selon la nature miscible ou non miscible du mélange.

5.2.1 Mélange immiscible

Si le mélange est immiscible, le volume vérifie :

$$V = V_1 + V_2. \tag{5.14}$$

Alors le vecteur d'état $W \in \mathbb{R}^3$ est la somme des vecteurs d'état de chaque phase :

$$W = W_1 + W_2.$$

Rappelons que $W_i \in C$, $i = 1, 2$, et que l'énergie est prolongée suivant la relation :

$$E(W) = \begin{cases} E(W), & \text{si } W \in C, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.15)$$

On peut donc éliminer le vecteur W_2 et introduire le cube de contraintes Q :

$$Q = \{W_1 \in \mathbb{R}^3, 0 \leq W_1 \leq W\}.$$

Les précédents commentaires peuvent alors être formalisés selon le postulat suivant :

Postulat 5.2.1. *Hors équilibre, l'énergie d'un mélange immiscible est :*

$$E(W) = E_1(W_1) + E_2(W - W_1), \quad W_1 \in Q.$$

À l'équilibre, l'énergie du mélange immiscible est une inf-convolution des énergies de chaque phase :

$$E(W) = \min_{W_1 \in Q} E_1(W_1) + E_2(W - W_1) \quad (5.16)$$

$$= \min_{W_1 \in \mathbb{R}^3} E_1(W_1) + E_2(W - W_1) \quad (5.17)$$

$$= E_1 \square E_2 (W). \quad (5.18)$$

Puisque l'énergie $W \mapsto E(W)$ est continue sur le cube Q , le problème d'optimisation convexe admet au moins une solution. La convexité de l'énergie assure que la valeur du minimum est unique (même si les W_1 pour lesquels le minimum est atteint ne sont pas forcément uniques) et la relation $W \mapsto E(W)$ est donc bien définie.

Remarque 5.2.2. L'opération définissant l'énergie du mélange est une inf-convolution, notée \square . Cette opération est très utile en analyse convexe et est étroitement reliée à la transformée de Legendre-Fenchel. En section 6 sont rappelées les définitions et propriétés de ces deux opérations. On propose également un algorithme pour calculer la transformée de Legendre et l'inf-convolution. De nombreuses applications de cet algorithme sont données en chapitre 7.

Le minimum peut être atteint en un W_1 sur les bords du cube de contraintes ∂Q ou dans son intérieur $\overset{\circ}{Q}$. Si le maximum est atteint dans $\overset{\circ}{Q}$, les deux phases sont présentes à l'équilibre ce qui correspond à un mélange en équilibre à saturation. Remarquons au passage que dans ce cas, les vocabulaires mathématiques et physiques ne sont pas en accord ! La saturation physique (qui signifie équilibre thermique, chimique et mécanique) ne correspond pas du tout à la saturation mathématique des contraintes (le maximum est atteint sur le bord du domaine des contraintes). En effet, supposons la contrainte de masse saturée. Alors on a soit $M_1 = M$ soit $M_1 = 0$, c'est-à-dire qu'une seule phase est stable, et donc que la saturation physique n'est pas atteinte.

Le minimum peut être calculé par une succession d'optimisations par rapport à l'entropie, le volume et la masse.

Proposition 5.2.3. *Supposons le mélange parfaitement immiscible et les pressions positives. Soit $\overline{W}_1 \in Q$ l'état minimisant l'énergie à l'équilibre.*

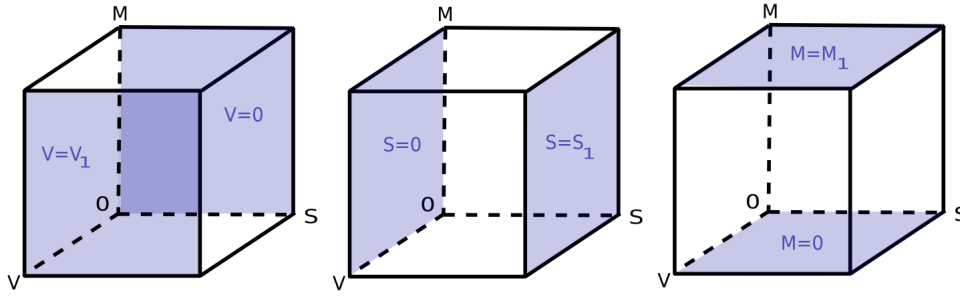


FIG. 5.2.1 – Cube de contraintes Q . Si le minimum est atteint dans l'intérieur du cube, pression, température et potentiel chimique sont égaux. Si le minimum est atteint sur les bords du cube, il faut distinguer selon que les contraintes de volume, de masse ou d'entropie sont saturées ou non. Le maximum peut également être atteint sur une arête ou dans un coin.

- Si $\bar{W}_1 \in \overset{\circ}{Q}$, les températures, pressions et potentiels chimiques de chaque phase sont égaux.
- Si $\bar{W}_1 \in \partial Q$, alors le minimum est atteint sur les bords du cube de contraintes. Il faut distinguer les cas :
 1. Si la contrainte de volume est saturée (voir figure 5.2.1, cube gauche), on a :
 - soit $\bar{V}_1 = V$, alors $(-p_1 + p_2)(V_1 - V) \geq 0$, i.e. $p_1 \geq p_2$,
 - soit $\bar{V}_1 = 0$, alors $(-p_1 + p_2)(V_1) \geq 0$, i.e. $p_1 \leq p_2$.
 2. Si la contrainte d'entropie est saturée (voir figure 5.2.1, cube central), on a :
 - soit $\bar{S}_1 = S$, alors $(T_1 + T_2)(S_1 - S) \geq 0$, i.e. $T_1 \geq T_2$,
 - soit $\bar{S}_1 = 0$, alors $(T_1 + T_2)(S_1) \geq 0$, i.e. $T_1 \leq T_2$.
 3. Si la contrainte de masse est saturée (voir figure 5.2.1, cube droit), on a :
 - soit $\bar{M}_1 = M$, alors $(\mu_1 + \mu_2)(M_1 - M) \geq 0$, i.e. $\mu_1 \geq \mu_2$,
 - soit $\bar{M}_1 = 0$, alors $(\mu_1 + \mu_2)(M_1) \geq 0$, i.e. $\mu_1 \leq \mu_2$.

Démonstration. Supposons que le minimum \bar{W}_1 soit atteint dans l'intérieur du domaine Q . L'optimisation par rapport à l'entropie S_1 s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial S_1} (E_1(M_1, S_1, V_1) + E_2(M - M_1, V - V_1, S - S_1)) = T_1 - T_2 = 0. \quad (5.19)$$

Le minimum est donc atteint en $T_1 = T_2$. De même l'optimisation par rapport à V_1 implique :

$$p_1 = p_2. \quad (5.20)$$

L'égalité des potentiels chimiques découlent de l'annulation de la dérivée de E par rapport à M_1 :

$$\frac{\partial E}{\partial M_1} = -\mu_1 + \mu_2 = 0. \quad (5.21)$$

Supposons que le minimum \bar{W}_1 est atteint sur le bord du cube de contrainte ∂Q . Puisque E est une fonction convexe, on a pour tout $W_1 \in Q$:

$$\nabla_{W_1} E(W)(W_1 - \bar{W}_1) \geq 0.$$

Supposons que le minimum correspond à la saturation de la contrainte de volume. Alors on a :

$$\frac{\partial}{\partial V_1} (E_1(M_1, S_1, V_1) + E_2(M - M_1, V - V_1, S - S_1)) = -p_1 + p_2,$$

soit encore :

$$(-p_1 + p_2)(V_1 - \bar{V}_1) \geq 0.$$

Si le volume est saturé de sorte que $\bar{V}_1 = V$, alors l'inégalité revient à :

$$(-p_1 + p_2) \leq 0.$$

Alors la pression du mélange correspond à la pression de la phase (2). Inversement, si $\bar{V}_1 = 0$, l'inégalité devient :

$$(-p_1 + p_2) \geq 0.$$

La pression du mélange est celle de la phase (1). En appliquant le même raisonnement sur les contraintes de masse et d'entropie, on complète la démonstration. \square

Remarque 5.2.4. Si le minimum d'énergie est atteint sur les bords du cube de contraintes, le mélange peut présenter des propriétés intéressantes, bien que probablement pathologiques. Considérons par exemple un mélange de deux phases : l'une est décrite par une loi de type gaz parfait (cette loi d'état sera détaillée en chapitre 7) de coefficient polytropique $\gamma_1 = 1.4$:

$$E_1 = M_1 \left(\frac{V_1}{M_1} + 1 \right)^{1-\gamma_1} \exp \left(\frac{S_1}{M_1} \right),$$

l'autre par une loi arbitraire :

$$E_2 = 0.01M_2 + S_2 + 0.01 \frac{M_2}{\frac{V_2}{M_2} + 1}.$$

En accord avec les principes de la thermodynamique, l'énergie E_2 est bien convexe et décroissante par rapport à V_2 . Le volume, la masse et l'entropie du système global sont fixés :

$$V = 2, \quad M = 1, \quad S = 1.$$

On suppose que le minimum d'énergie est atteint à saturation de la contrainte de volume, de sorte que $V_1 = V$. En établissant l'égalité des températures et des potentiels chimiques, on est amené à résoudre numériquement un système de deux équations :

$$\begin{aligned} T_1 &= T_2, \\ \mu_1 &= \mu_2, \end{aligned}$$

à deux inconnues (M_1, S_1) . En résolvant le système avec Maple, on obtient la solution :

$$\begin{aligned} V_1 &= 2, & M_1 &= 0.06783, & S_1 &= 0.09272. \\ V_2 &= 0, & M_2 &= 0.93217, & S_2 &= 0.90728, \end{aligned}$$

telle que $p_1 = 0.01312 > p_2 = 0.01$. Ainsi la phase (2) occupe un volume nul, mais sa masse et son entropie sont non nulles.

De façon similaire, il est possible de définir l'entropie du mélange à l'équilibre comme solution d'un problème de maximisation. Puisque l'entropie est prolongée par $-\infty$ en dehors du domaine \tilde{C} , on obtient une formulation analogue à (5.16).

Postulat 5.2.5. *À l'équilibre, l'entropie d'un mélange immiscible est la sup-convolution des entropies de chaque phase :*

$$\begin{aligned} S(\tilde{W}) &= \max_{\tilde{W}_1 \in \tilde{Q}} S_1(\tilde{W}_1) + S_2(\tilde{W} - \tilde{W}_1) \\ &= \max_{\tilde{W}_1 \in \mathbb{R}^3} S_1(\tilde{W}_1) + S_2(\tilde{W} - \tilde{W}_1) \\ &= S_1 \diamond S_2(\tilde{W}), \end{aligned} \tag{5.22}$$

où \diamond désigne l'opération de sup-convolution et \tilde{Q} est le cube de contraintes :

$$\tilde{Q} = \left\{ \tilde{W} \in \mathbb{R}^3, 0 \leq \tilde{W}_1 \leq \tilde{W} \right\}.$$

5.2.2 Cas miscible

La construction de la loi d'état de mélange miscible est similaire à celle utilisée dans le cas immiscible. On considère toujours deux phases d'un même corps pur, totalement décrites par leurs énergies E_i , $i = 1, 2$. Comme dans le cas immiscible, chaque phase est caractérisée par son vecteur W_i de variables $W_i = (V_i, M_i, S_i) \in C$. On s'intéresse également à l'entropie du mélange. Nous considérons alors les vecteurs d'états $\tilde{W}_i = (V_i, M_i, E_i) \in \tilde{C}$.

Les deux phases étant miscibles, elles peuvent occuper tout le volume *i.e.*

$$V = V_1 = V_2.$$

Cela arrive par exemple lorsque deux gaz suffisamment dilués sont mélangés. Chacun des deux gaz se comporte comme si l'autre n'était pas présent car les collisions entre les molécules des deux gaz sont rares. On note Z_i les vecteurs d'états $Z_i = (M_i, S_i)$. Alors le vecteur d'état Z du mélange est la somme des vecteurs d'état de chaque constituant :

$$Z = Z_1 + Z_2.$$

En introduisant l'ensemble des contraintes carré $Q = \{Z_1 \in \mathbb{R}^2, 0 \leq Z_1 \leq Z\}$, on peut caractériser l'énergie d'un mélange miscible :

Postulat 5.2.6. *Hors équilibre, l'énergie d'un mélange miscible est la somme des énergies de chaque phase :*

$$E(V, Z) = E_1(V, Z_1) + E_2(V, Z - Z_1). \tag{5.23}$$

À l'équilibre l'énergie est l'inf-convolution par rapport à la variable Z des énergies de chaque phase :

$$\begin{aligned} E(V, Z) &= \min_{Z_1 \in Q} E_1(V, Z_1) + E_2(V, Z - Z_1) \\ &= \min_{Z_1 \in \mathbb{R}^2} E_1(V, Z_1) + E_2(V, Z - Z_1). \\ E(V, \cdot) &= (E_1(V, \cdot) \square E_2(V, \cdot)). \end{aligned} \quad (5.24)$$

De la même manière, on introduit le vecteur $\tilde{Z}_i = (M_i, E_i) \in \mathbb{R}^2$. L'entropie à l'équilibre est définie par :

Postulat 5.2.7. À l'équilibre, l'entropie d'un mélange miscible est la sup-convolution des entropies de chaque phase :

$$\begin{aligned} S(V, \tilde{Z}) &= \max_{\tilde{Z}_1 \in \tilde{Q}} S_1(V, \tilde{Z}_1) + S_2(V, \tilde{Z} - \tilde{Z}_1) \\ &= \max_{\tilde{Z}_1 \in \mathbb{R}^2} S_1(V, \tilde{Z}_1) + S_2(V, \tilde{Z} - \tilde{Z}_1). \\ S(V, \cdot) &= (S_1(V, \cdot) \diamond S_2(V, \cdot)). \end{aligned} \quad (5.25)$$

où \tilde{Q} est le carré de contraintes :

$$\tilde{Q} = \left\{ \tilde{Z} \in \mathbb{R}^2, 0 \leq \tilde{Z}_1 \leq \tilde{Z} \right\}.$$

Comme dans le cas immiscible, le minimum d'énergie peut être atteint à l'intérieur du carré de contraintes Q ou sur ses bords. Les potentiels vérifient alors la proposition suivante.

Proposition 5.2.8. Supposons le mélange parfaitement miscible et les pressions positives. Soit $\bar{Z}_1 \in Q$ l'état minimisant l'énergie à l'équilibre.

- Si $\bar{Z}_1 \in \overset{\circ}{Q}$, les températures et potentiels chimiques de chaque phase sont égaux :

$$\mu_1 = \mu_2 = \mu, \quad (5.26)$$

$$T_1 = T_2 = T, \quad (5.27)$$

et la pression du mélange satisfait la loi de Dalton :

$$p_1 + p_2 = p. \quad (5.28)$$

- Si $\bar{Z}_1 \in \partial Q$, alors le minimum est atteint sur les bords du carré de contraintes. La pression vérifie :

$$p_1 + p_2 = p. \quad (5.28)$$

Pour caractériser les températures et potentiels chimiques, il faut distinguer les cas :

1. Si la contrainte d'entropie est saturée, on a :
 - soit $\bar{S}_1 = S$, alors $(T_1 + T_2)(S_1 - S) \geq 0$, i.e. $T_1 \geq T_2$,
 - soit $\bar{S}_1 = 0$, alors $(T_1 + T_2)(S_1) \geq 0$, i.e. $T_1 \leq T_2$.
2. Si la contrainte de masse est saturée, on a :

- soit $\bar{M}_1 = M$, alors $(\mu_1 + \mu_2)(M_1 - M) \geq 0$, i.e. $\mu_1 \geq \mu_2$,
- soit $\bar{M}_1 = 0$, alors $(\mu_1 + \mu_2)(M_1) \geq 0$, i.e. $\mu_1 \leq \mu_2$.

Démonstration. Supposons maintenant le minimum \bar{Z} atteint dans le domaine de contraintes \bar{Q} . L'optimisation par rapport à l'entropie S_1 s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial S_1} (E_1(M_1, S_1, V) + E_2(M - M_1, V, S - S_1)) = T_1 - T_2. \quad (5.29)$$

Le maximum est donc atteint en $T_1 = T_2$. De même l'optimisation par rapport à M_1 implique :

$$\mu_1 = \mu_2 = \mu. \quad (5.30)$$

La dérivation par rapport au volume V conduit à :

$$\frac{\partial E}{\partial V} = -p_1 - p_2 = -p. \quad (5.31)$$

La pression du mélange est la somme des pressions des deux phases, ce qui revient à énoncer la loi de Dalton.

Supposons le minimum atteint sur les bords du domaine de contraintes $\bar{Z} \in \partial Q$. Le gradient de E par rapport à \bar{Z} n'est pas nul. L'énergie étant une fonction convexe de Z , on a par définition :

$$\forall Z \in Q, \nabla E(\bar{Z})(Z - \bar{Z}) \geq 0.$$

Si la contrainte de masse est saturée, alors l'inégalité devient :

$$(\mu_1 - \mu_2)(M - \bar{M}) \geq 0.$$

Si $\bar{M} = M$ alors $\mu_1 \geq \mu_2$, seule la phase (1) est présente. Inversement si $\bar{M} = 0$, alors $\mu_2 \geq \mu_1$, seule la phase (2) est présente. Le même raisonnement mené sur la contrainte d'entropie permet de conclure la démonstration. \square

5.2.3 Formulations intensives

En pratique, il est utile de traduire les résultats obtenus de variables extensives en variables intensives. En effet, les équations de la mécanique des fluides sont écrites en variables intensives. En variables intensives, la description du changement de phase est donnée dans de nombreux travaux. Citons par exemple Callen [Cal85], Jaouen [Jao01] ou Faccanoni [Fac08].

Par la suite nous désignons respectivement par $\underline{\text{co}}(f)$ et $\overline{\text{co}}(f)$ l'enveloppe convexe fermée et l'enveloppe concave fermée d'une fonction f donnée. On en rappelle la définition

Définition 5.2.9. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}$ une fonction non identiquement égale à $\pm\infty$. On appelle enveloppe convexe fermée de f la fonction définie par :

$$\underline{\text{co}}(f)(x) := \sup \{a \cdot x + b, \forall y \in \mathbb{R}^n, a \cdot y + b \leq f(y), (a, b) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n\}.$$

Son enveloppe concave fermée est :

$$\overline{\text{co}}(f)(x) := \inf \{a \cdot x + b, \forall y \in \mathbb{R}^n, a \cdot y + b \geq f(y), (a, b) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n\}.$$

Cas immiscible

Considérons d'abord que les deux phases sont immiscibles, c'est-à-dire que

$$V = V_1 + V_2.$$

Théorème 5.2.10. *À l'équilibre l'énergie du mélange e est l'enveloppe convexe fermée du minimum des deux énergies e_1 et e_2 . En d'autres termes*

$$e = \underline{co}(\min(e_1, e_2)). \quad (5.32)$$

On propose une démonstration similaire à celle formulée par Facanoni [Fac08].

Démonstration. Soient E_1 et E_2 les énergies des phases (1) et (2) respectivement. L'énergie du mélange à l'équilibre vérifie pour un état W_1 donné :

$$E(W_1, W_2) = E_1(W_1) + E_2(W_2) = E_1(W_1) + E_2(W - W_1), \quad (5.33)$$

où $0 \leq W_1 \leq W$. Dans le cas où le minimum est atteint à l'intérieur du domaine de contraintes, *i.e.* quand $0 < W_1 < W$, alors on a :

$$\nabla_{W_1}(E(W_1) + E(W - W_1)) = 0, \quad (5.34)$$

ce qui donne :

$$p_1 = p_2, \quad \mu_1 = \mu_2, \quad T_1 = T_2. \quad (5.35)$$

À l'équilibre, on retrouve que les pressions, les potentiels chimiques et les températures des deux phases sont égaux. On peut définir la pression, le potentiel chimique et la température du mélange par :

$$p := p_1 = p_2, \quad \mu := \mu_1 = \mu_2, \quad T := T_1 = T_2. \quad (5.36)$$

D'autre part, puisque les énergies extensives sont des fonctions PH1, on peut diviser (5.33) par $M \neq 0$ et obtenir :

$$e(\tau, s) = \varphi e_1(\tau_1, s_1) + (1 - \varphi)e_2(\tau_2, s_2), \quad (5.37)$$

avec $0 \leq \varphi = \frac{M_1}{M} \leq 1$, $\tau_i = \frac{V_i}{M_i}$ et $s_i = \frac{S_i}{M_i}$. Soit N (resp. N_i , $i = 1, 2$) le point $(\tau, s, e(\tau, s))$ (resp. $(\tau_i, s_i, e_i(\tau_i, s_i))$) appartenant à la surface \mathcal{E} d'équation $e = e(\tau, s)$ (resp. \mathcal{E}_i d'équation $e = e_i(\tau_i, s_i)$). On observe que le point N appartient au segment joignant N_1 et N_2 car

$$\begin{cases} e = \varphi e_1 + (1 - \varphi)e_2, \\ \tau = \varphi \tau_1 + (1 - \varphi)\tau_2, \\ s = \varphi s_1 + (1 - \varphi)s_2. \end{cases} \quad (5.38)$$

Si $\varphi = 0$ (resp. $\varphi = 1$), l'énergie du mélange est l'énergie de la phase (1) (resp. de la phase (2)) et il n'y a rien à démontrer. On considère donc le cas $0 < \varphi < 1$. D'après (5.10) et (5.36), l'équation du plan tangent à la surface \mathcal{E}_i au point N_i , $i = 1, 2$, est donné par :

$$e = -p_i(\tau - \tau_i) + T_i(s - s_i) = -p(\tau - \tau_i) + T(s - s_i). \quad (5.39)$$

On observe que N appartient à ces deux plans, qui sont par ailleurs parallèles. Cela démontre que N appartient à un plan bitangent aux surfaces \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 . La surface d'énergie du mélange est donc l'enveloppe convexe du minimum des deux surfaces, c'est-à-dire :

$$e = \underline{\text{co}}(\min(e_1, e_2)). \quad (5.40)$$

□

Remarque 5.2.11. Cette démonstration s'appuie sur des hypothèses de régularité sur les énergies. On propose au chapitre 6 une démonstration basée sur les propriétés de l'inf-convolution et de la transformée de Legendre.

Par la suite on utilisera la notation suivante :

Définition 5.2.12. Soient e_i , $i = 1, 2$ les énergies des deux phases. L'énergie du mélange immiscible est notée :

$$e_1 \uplus e_2 := \underline{\text{co}}(\min(e_1, e_2)). \quad (5.41)$$

Le théorème (5.2.10) admet une formulation analogue pour les énergies volumiques.

Théorème 5.2.13. À l'équilibre la surface d'énergie du mélange ε est l'enveloppe convexe fermée des surfaces ε_1 et ε_2 , c'est-à-dire

$$\varepsilon = \underline{\text{co}}(\min(\varepsilon_1, \varepsilon_2)) = \varepsilon_1 \uplus \varepsilon_2. \quad (5.42)$$

La démonstration repose sur les mêmes arguments que la preuve du théorème 5.2.10.

L'opération \uplus préserve évidemment la convexité. Elle est associative, commutative et son élément neutre est la fonction $f \equiv +\infty$.

En réalisant la même construction, on caractérise l'entropie à l'équilibre (on retrouve ces résultats dans [AFK07] et [HS06]).

Corollaire 5.2.14. À l'équilibre la surface d'entropie du mélange s est l'enveloppe concave fermée des surfaces s_1 et s_2 , c'est-à-dire

$$s = \overline{\text{co}}(\max(s_1, s_2)) = s_1 \pitchfork s_2. \quad (5.43)$$

L'entropie volumique vérifie également :

$$\sigma = \sigma_1 \pitchfork \sigma_2. \quad (5.44)$$

Les preuves sont identiques à celles du théorème 5.2.10, elles-même inspirées des travaux de Faccononi [Fac08].

Mélange miscible

Lorsque les deux phases sont miscibles, on rappelle que $V = V_1 = V_2$. En utilisant le fait que l'énergie E et l'entropie S sont des fonctions PH1, on peut exprimer les problèmes d'optimisation en variables intensives.

Théorème 5.2.15. *L'énergie volumique du mélange miscible est donnée par une opération d'inf-convolution :*

$$\begin{aligned}\varepsilon(\rho, \sigma) &= \min_{(\rho_1, \sigma_1) \in D} \varepsilon_1(\rho_1, \sigma_1) + \varepsilon_2(\rho - \rho_1, \sigma - \sigma_1) \\ &= \min_{(\rho_1, \sigma_1) \in \mathbb{R}^2} \varepsilon_1(\rho_1, \sigma_1) + \varepsilon_2(\rho - \rho_1, \sigma - \sigma_1) \\ &= \varepsilon_1 \square \varepsilon_2(\rho, \sigma).\end{aligned}\tag{5.45}$$

avec, pour $i = 1, 2$,

$$\begin{aligned}\sigma_i &= \rho_i s_i, \\ D &= \{(\rho_i, \sigma_i), 0 \leq \rho_i \leq \rho, 0 \leq \sigma_i \leq \sigma\}, \\ \varepsilon_i(\rho_i, \sigma_i) &= \rho e_i(\tau_i, s_i).\end{aligned}\tag{5.46}$$

Démonstration. On considère l'énergie du mélange en variables extensives donnée par (5.24). Puisque E est PH1, on peut diviser par le volume fixé V pour obtenir

$$\begin{aligned}E\left(\frac{M}{V}, \frac{S}{V}, 1\right) &= \\ \min_{(M_1, S_1) \in Q} E_1\left(\frac{M_1}{V}, \frac{S_1}{V}, 1\right) &+ E_2\left(\frac{M - M_1}{V}, \frac{S - S_1}{V}, 1\right).\end{aligned}\tag{5.47}$$

En utilisant les notations (5.46), la formulation intensive est immédiate. \square

On énonce également

Corollaire 5.2.16. *L'entropie volumique du mélange miscible est donnée par une opération de sup-convolution :*

$$\begin{aligned}\sigma(\rho, \varepsilon) &= \max_{(\rho_1, \varepsilon_1) \in \tilde{D}} \sigma_1(\rho_1, \varepsilon_1) + \sigma_2(\rho - \rho_1, \varepsilon - \varepsilon_1) \\ &= \max_{(\rho_1, \varepsilon_1) \in \mathbb{R}^2} \sigma_1(\rho_1, \varepsilon_1) + \sigma_2(\rho - \rho_1, \varepsilon - \varepsilon_1) \\ &= \sigma_1 \diamond \sigma_2(\rho, \varepsilon).\end{aligned}\tag{5.48}$$

avec, pour $i = 1, 2$,

$$\begin{aligned}\varepsilon_i &= \rho_i e_i, \\ \tilde{D} &= \{(\rho_i, \varepsilon_i), 0 \leq \rho_i \leq \rho, 0 \leq \varepsilon_i \leq \varepsilon\}, \\ \sigma_i(\rho_i, \varepsilon_i) &= \rho s_i(\tau_i, e_i).\end{aligned}\tag{5.49}$$

5.3 Conclusion

Pour construire des modèles de transition de phase, on a repris un procédé classique, que l'on retrouve dans les travaux de Callen [Cal85] ou Helluy et Seguin [HS06]. Il s'agit de décrire la transition de phase liquide-vapeur au moyen d'un mélange binaire. Hors équilibre, l'énergie du mélange est la somme des énergies de chaque phase. À l'équilibre l'énergie décroît jusqu'à atteindre un minimum. Il s'agit donc de résoudre un problème de minimisation. Dans le jeu de variables extensives, l'énergie du mélange s'exprime comme l'inf-convolution des énergies de chaque constituant, quelque soit la nature miscible ou immiscible du mélange. De même l'entropie extensive du mélange à l'équilibre est une sup-convolution des entropies de chaque phase. L'optimisation des énergies extensives nous a permis de retrouver des propriétés de la transition de phase :

- dans le cas immiscible, la transition de phase se fait à pression, température et potentiels chimiques constants,
- dans le cas miscible, le mélange obéit à la loi de Dalton. La transition de phase se fait à température et potentiel chimique constants.

En variables intensives, il faut distinguer selon la miscibilité du mélange. Dans le cas immiscible, l'énergie molaire (resp. volumique) est donnée par l'enveloppe convexe des énergies molaires (resp. volumiques) de chaque phase. On retrouve un résultat classique de thermodynamique (voir par exemple Callen [Cal85]), généralisé par Faccanoni [Fac08] et Jaouen [Jao01] dans leurs thèses. Dans le cas miscible, seule l'énergie volumique peut être calculée simplement. Elle correspond à l'inf-convolution des énergies volumiques de chaque phase.

On peut donc caractériser la transition de phase au moyen des opérations Ψ et \square . En terme plus algébriques, on a déterminé un monoïde sur l'espace des fonctions convexes, muni des opérations \square et Ψ , structure naturelle pour la construction de lois d'état admissibles.

De façon analogue les lois \mathfrak{m} et \diamond définissent une structure algébrique sur l'espace des fonctions concaves, qui nous permet de caractériser l'entropie des mélanges immiscibles ou miscibles à l'équilibre.

Par la suite, on se concentrera sur les opérations Ψ et \square . En particulier, on examinera leur lien avec la transformée de Legendre-Fenchel. La mise en œuvre d'un algorithme de transformée de Legendre rapide nous permettra, au chapitre 7, la construction numérique des lois d'état pour la transition de phase.

APPROCHE NUMÉRIQUE DE LA TRANSFORMÉE DE LEGENDRE

La transformée de Legendre-Fenchel (TL) est un outil usuel de la thermodynamique ([Cal85], chap. 5). Elle permet de définir différents potentiels : potentiel de Gibbs, enthalpie... Au chapitre 5, on a vu que les deux opérations \boxplus et \boxminus interviennent dans la définition de l'énergie à l'équilibre d'un mélange diphasique. Or ces opérations d'analyse convexe sont étroitement liées à la transformée de Legendre. Soient deux fluides décrits par leurs énergies volumiques ε_i , $i = 1, 2$; on rappelle que :

- si les deux phases sont miscibles, l'énergie volumique du mélange est l'inf-convolution des deux énergies :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \boxminus \varepsilon_2,$$

- si le mélange est immiscible, l'énergie (massique ou volumique) à l'équilibre est l'enveloppe convexe du minimum des deux énergies :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \boxplus \varepsilon_2.$$

On insistera dans ce chapitre sur les propriétés de la transformée de Legendre, à savoir :

- la TL préserve la convexité,
- la TL d'une inf-convolution est une addition,
- la TL d'un minimum est un maximum.

Ainsi l'algèbre des fonctions convexes de \mathbb{R}^n munie des lois \boxminus et \boxplus dans le domaine réel correspond, dans le domaine de Legendre, à l'espace des fonctions convexes de \mathbb{R}^n muni des lois $+$ et \max .

La transformée de Legendre, de même que la transformée de Fourier, admet un algorithme rapide développé par Brenier [Bre89] et Lucet [Luc96, Luc97]. Nous reprenons ici l'algorithme proposé par Lucet dans [Luc96] dont nous améliorons le traitement des bords du domaine. Notre méthode repose sur l'étude de la transformée de Legendre de fonctions linéaires par morceaux. La première étape consiste à décrire l'algorithme dans le cas monodimensionnel. À la manière de Lucet [Luc97], on commence par calculer l'enveloppe convexe de la fonction affine par morceaux.

Cette opération permet de diminuer la complexité de l'algorithme initial de Brenier [Bre89]. L'extension aux dimensions supérieures repose sur la propriété de factorisation [Luc97] de la TL : seules des transformées 1D interviennent dans la transformée de Legendre multidimensionnelle. Il s'ensuit que les propriétés de convergence et de complexité s'appliquent également au cas 2D. Le chapitre est complété par différentes illustrations numériques mono- et bi-dimensionnelles qui attestent du bon comportement de notre algorithme.

6.1 Rappels et propriétés

Dans un premier temps sont rappelées des notions d'analyse convexe et certaines propriétés de la transformée de Legendre et de l'inf-convolution. Pour plus de détails le lecteur pourra consulter les ouvrages de Hiriart-Urruty et Lemaréchal [HUL01a, HUL01b] ou Rockafellar [Roc97]. Par la suite on note $\text{Conv}(\mathbb{R}^n)$ l'ensemble des fonctions convexes de \mathbb{R}^n à valeurs dans $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$.

Définition 6.1.1. *On appelle domaine de $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, noté $\text{dom}(f)$, le sous-ensemble de \mathbb{R}^n où f prend des valeurs finies :*

$$\text{dom}(f) := \{x \in \mathbb{R}^n, f(x) < +\infty\}.$$

Si $\text{dom}(f) \neq \emptyset$, la fonction f est dite propre.

Pour simplifier l'exposé, on suppose désormais que toute fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ considérée est propre et qu'il existe toujours une fonction affine la minorant

$$\text{il existe } (s, b) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}, f(x) \geq \langle s, x \rangle - b, \text{ pour tout } x \in \mathbb{R}^n,$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire de \mathbb{R}^n . Il est classique en analyse convexe de considérer la fonction indicatrice convexe

Définition 6.1.2. *Soit A un ensemble de \mathbb{R}^n . On appelle fonction indicatrice convexe de A , notée I_A , la fonction définie sur \mathbb{R}^n à valeurs dans $\overline{\mathbb{R}}$ suivante :*

$$I_A(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in A, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases}$$

La fonction I_A ainsi définie est convexe si et seulement si A est convexe. Une autre fonction importante associée à l'ensemble A est sa fonction « support » :

Définition 6.1.3. *Soit A un ensemble de \mathbb{R}^n . On appelle fonction support de A , notée σ_A la fonction définie sur \mathbb{R}^n et à valeurs dans \mathbb{R} suivante :*

$$\sigma_A(p) = \sup_{x \in A} \langle p, x \rangle.$$

On observe que la fonction support est convexe même lorsque l'ensemble A ne l'est pas. Elle est également positivement homogène de degré 1, c'est-à-dire que :

$$\forall \alpha > 0, \forall p \in \mathbb{R}^n, \sigma_A(\alpha p) = \alpha \sigma_A(p).$$

On donne ici la définition de la transformée de Legendre :

Définition 6.1.4. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction propre. Sa conjuguée f^* est définie par

$$f^* : s \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (6.1)$$

$$s \mapsto \sup_{x \in \text{dom}(f)} \{ \langle s, x \rangle - f(x) \}. \quad (6.2)$$

L'application $f \mapsto f^*$ est appelée transformée de Legendre.

On observe immédiatement que la conjuguée est toujours convexe puisqu'elle s'exprime comme l'enveloppe supérieure d'une famille de fonctions affines en s . En d'autres termes, le domaine de f^* est l'ensemble des pentes de toutes les fonctions affines minimisant f sur \mathbb{R}^n . Cette définition implique l'inégalité de Young-Fenchel :

$$\langle s, x \rangle \leq f(x) + f^*(s), \quad \forall x \in \text{dom}(f) \text{ et } \forall s \in \text{dom}(f^*).$$

On introduit également la biconjuguée f^{**} de la fonction f définie par :

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, f^{**}(x) = (f^*)^*(s) = \sup \{ \langle s, x \rangle - f^*(s), s \in \text{dom}(f^*) \}.$$

A titre illustratif on détaille la transformée de Legendre de fonctions linéaires par morceaux.

Exemple 6.1.5. Considérons l'indicatrice convexe $I_{[a,b]}$ de l'intervalle $[a, b] \subset \mathbb{R}$:

$$I_{[a,b]}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } a \leq x \leq b, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Alors

$$(I_{[a,b]})^*(\chi) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (\chi x - I_{[a,b]}(x)) = \sup_{x \in [a,b]} \chi x,$$

soit encore :

$$(I_{[a,b]})^*(\chi) = \begin{cases} 0, & \text{si } \chi = 0, \\ a\chi, & \text{si } \chi < 0, \\ b\chi, & \text{si } \chi > 0. \end{cases}$$

En d'autres termes, la transformée de Legendre de l'indicatrice convexe d'un ensemble A est la fonction support de cet ensemble A :

$$(I_A)^* = \sigma_A.$$

Exemple 6.1.6. On considère la valeur absolue sur le domaine $[a, b]$ ($a < 0 < b$) :

$$f(x) = \begin{cases} -x, & \text{si } a \leq x \leq 0, \\ x, & \text{si } 0 \leq x \leq b, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Alors sa conjuguée f^* est identiquement nulle sur $[-1, 1]$ i.e.

$$f^*(s) = \begin{cases} as - 1, & \text{si } s \leq -1, \\ 0, & \text{si } -1 \leq s \leq 1, \\ bs - 1, & \text{si } s \geq 1. \end{cases}$$

Rappelons les deux définitions suivantes :

Définition 6.1.7. Une fonction f est dite *semi-continue inférieurement (sci)* en un point x si

$$f(x) \leq \liminf_{y \rightarrow x} f(y).$$

Définition 6.1.8. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ une fonction non nécessairement convexe. On appelle *sous-gradient* de f en x (avec $f(x) < +\infty$) tout vecteur de $r \in \mathbb{R}^n$ qui vérifie

$$f(y) - f(x) \geq \langle r, y - x \rangle, \forall y \in \mathbb{R}^n.$$

L'ensemble (vide ou non vide) de ces vecteurs est appelé *sous-différentiel* de f en x et est noté $\partial f(x)$.

La transformée de Legendre vérifie les propriétés suivantes :

Proposition 6.1.9. Soit f une fonction convexe et propre. Alors

- la conjuguée de f est une fonction convexe semi-continue inférieurement,
- Si f^* est propre la biconjuguée de f est l'enveloppe convexe fermée de f :

$$f^{**} = \underline{\text{co}}(f).$$

Lorsque l'on calcule la conjuguée f^* , on considère l'ensemble des fonctions affines minorant f . Cet ensemble coïncide avec l'ensemble des fonctions affines minorant l'enveloppe convexe $\text{co}(f)$. Il s'ensuit que f et $\text{co}(f)$ admettent la même conjuguée. Considérons une fonction f convexe sci. Alors $f^{**} = f$, ce qui signifie que la transformée de Legendre est une involution sur l'ensemble des fonctions convexes de \mathbb{R}^n . On a de plus :

Proposition 6.1.10. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe sci. Alors

$$\begin{aligned} sx = f(x) + f^*(s) & \text{ si et seulement si } x \in \text{dom}(f) \text{ et } s \in \partial f(x), \\ s \in \partial f(x) & \text{ si et seulement si } x \in \partial f^*(s). \end{aligned}$$

Dans le cadre thermodynamique, rappelons que l'énergie à l'équilibre d'un mélange binaire immiscible est l'enveloppe convexe du minimum des énergies de chaque phase (voir théorème 5.2.10). Par hypothèse, l'énergie d'un fluide est une fonction convexe et sans perte de généralité on peut supposer qu'elle est également propre et semi-continue inférieurement. Les propositions ci-dessous sont donc vérifiées. En particulier, d'après la proposition 6.1.9, une manière de calculer l'énergie du mélange serait de construire la biconjuguée du minimum des énergies de chaque phase, en appliquant deux transformées de Legendre successives. On peut également s'appuyer sur la proposition suivante :

Proposition 6.1.11. Soit $(f_j)_{j \in J}$ une famille de fonctions propres, minorées par une même fonction affine. Alors

$$\left(\inf_j f_j \right)^* = \sup_j (f_j^*).$$

En conséquence

$$\left(\min(f_1, f_2) \right)^* = \left(\text{co}(\min(f_1, f_2)) \right)^* = \max(f_1^*, f_2^*).$$

Supposons connues les conjuguées des énergies de chacune des phases. Alors le calcul de l'énergie de mélange, dans le domaine de Legendre, se résume au calcul du maximum des conjuguées des énergies.

De façon similaire, nous énonçons des propriétés relatives à l'opération d'inf-convolution, qui caractérise l'énergie d'un mélange binaire miscible. Rappelons tout d'abord la définition

Définition 6.1.12. Soient f_1 et f_2 deux fonctions convexes de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} . On appelle inf-convolution de f_1 et f_2 la fonction

$$\begin{aligned} f(x) = (f_1 \square f_2)(x) &= \inf_{x_1+x_2=x} f_1(x_1) + f_2(x_2) \\ &= \inf_{y \in \mathbb{R}^n} f_1(y) + f_2(x-y). \end{aligned}$$

S'il existe une fonction affine $x \mapsto s_0x - r_0$ qui minore f_1 et f_2 alors f est convexe.

L'inf-convolution préserve la convexité. De ce fait, à l'équilibre, l'énergie volumique d'un mélange miscible, définie comme l'inf-convolution des énergies volumiques de chaque phase, demeure convexe.

Par la suite, on rappelle certaines propriétés associant transformée de Legendre et inf-convolution.

Proposition 6.1.13. Soient f_1 et f_2 deux fonctions convexes sci, minorées par une même fonction affine. Alors la transformée de Legendre de leur inf-convolution est

$$(f_1 \square f_2)^* = f_1^* + f_2^*.$$

La version duale de ce résultat est

Proposition 6.1.14. Soient f_1 et f_2 deux fonctions convexes sci. La conjuguée de leur somme vérifie

$$(f_1 + f_2)^* = f_1^* \square f_2^*.$$

La transformée de Legendre étant involutive pour les fonctions convexes semi-continues inférieurement, elle assure que si f_1 et f_2 sont convexes sci alors :

$$(f_1 \square f_2) = (f_1^* + f_2^*)^*. \quad (6.3)$$

Ces propriétés montrent que l'addition est l'opération duale de l'inf-convolution.

Ces rappels nous fournissent également une nouvelle démonstration plus courte, plus générale et plus élégante du théorème 5.2.10, uniquement basée sur l'optimisation convexe.

Preuve du théorème 5.2.10. On considère un mélange immiscible de deux phases décrites par leurs énergies extensives E_i , $i = 1, 2$. On rappelle que :

$$E(W) = (E_1 \square E_2)(W), \quad W \in \mathbb{R}^3.$$

Puisque la transformée de Legendre est involutive pour les fonctions convexes sci, on a :

$$E^{**} = (E_1^* + E_2^*)^*.$$

Or la transformée de Legendre de E_1 s'écrit :

$$\begin{aligned} E_1^*(M', S', V') &= \sup_{M, S, V \geq 0} (MM' + SS' + VV' - E_1(M, S, V)) \\ &= \sup_{M, S, V \geq 0} V(\rho M' + \sigma S' + V' - \varepsilon_1(\rho, \sigma)) \\ &= \sup_{V \geq 0} V(V' + \varepsilon_1^*(M', S')). \end{aligned}$$

Soit l'ensemble $A := \{M', S', V', \varepsilon_1^*(M', S') \geq -V'\}$. On observe que E_1^* est la fonction indicatrice de A . Il s'agit en fait d'une caractérisation des fonctions PH1 [HUL01a]. De la même manière la transformée de Legendre E_2^* est l'indicatrice de l'ensemble $B := \{M', S', V', \varepsilon_2^*(M', S') \geq -V'\}$. Alors $E^* = \mathbb{I}_{A \cap B}$, où

$$A \cap B := \{M', S', V', \max(\varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*)(M', S') \geq -V'\}.$$

D'après la proposition 6.1.11, l'ensemble $A \cap B$ peut être défini comme :

$$A \cap B := \{M, S, V, (\min(\varepsilon_1, \varepsilon_2))^*(M, S) \geq -V\}.$$

En d'autres termes ε est l'enveloppe convexe de $\min(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$. □

Les théorèmes 5.2.10 et 5.46 admettent des preuves similaires.

Au chapitre précédent, on a montré qu'à l'équilibre, l'énergie volumique d'un mélange miscible binaire est l'inf-convolution des énergies volumiques de chaque phase. Supposons connues les conjuguées des énergies volumiques. Dans le domaine de Legendre, la conjuguée de l'énergie du mélange est simplement la somme des énergies conjuguées de chaque phase.

En résumé, on énonce

Proposition 6.1.15. *Soit la structure algébrique (\mathbb{U}, \square) sur l'espace des fonctions convexes de \mathbb{R}^n introduite au chapitre 5. La transformée de Legendre définit sa structure algébrique duale $(\max, +)$ sur l'espace des fonctions convexes de \mathbb{R}^n dans le domaine de Legendre.*

Si les énergies conjuguées de chaque phase sont connues, il est donc très facile de construire l'énergie du mélange dans l'espace de Legendre, puisque les opérations se limitent aux \max et $+$. Dans le chapitre 7, nous construirons les transformées de Legendre des énergies et entropies massiques et volumiques. On utilisera ensuite l'algèbre $(\max, +)$ pour calculer numériquement des lois d'état de mélanges immiscibles ou miscibles de façon simple.

Remarque 6.1.16. Le terme « algèbre » $(\max, +)$ est abusif. En effet la loi \max n'est pas une loi de groupe mais une loi idempotente *i.e.* $\max(a, a) = a$. La distributivité de la loi $+$ sur la loi \max est vérifiée, il s'agit donc d'un semi-anneau sur l'ensemble des fonctions convexes de \mathbb{R}^n . Par abus de langage, on parle de structure d'algèbre comme il est d'usage dans les ouvrages de Maslov [Mas87, KM97]. De la même manière l'opération \mathbb{U} est idempotente sur l'ensemble des fonctions convexes de \mathbb{R}^n . Les lois \mathbb{U} et \square sont des lois de composition interne sur $Conv(\mathbb{R}^n)$ qui vérifient la distributivité de \square sur \mathbb{U} . Il s'agit donc d'une structure de semi-anneau sur $Conv(\mathbb{R}^n)$.

6.2 Algorithme de Transformée de Legendre

Il s'agit maintenant de construire un algorithme de transformée de Legendre. Dans un premier temps, on souhaite établir un algorithme monodimensionnel. L'extension aux dimensions supérieures reposera sur des produits tensoriels de transformées monodimensionnelles. Nous nous basons sur les travaux de Brenier [Bre89] et de Lucet [Luc96, Luc97]. L'algorithme proposé par Lucet en 1996 est une extension de celui de Brenier. Il repose sur l'analogie entre transformée de Fourier rapide (ou Fast Fourier Transform, abrégé FFT) et transformée de Legendre rapide. Il s'agit d'un algorithme récursif, construit de façon similaire à l'algorithme de FFT de Cooley-Tuckey. Sa complexité est en $N \log(N)$, où N est le nombre de points d'échantillonnage. Cet algorithme a été amélioré dans [Luc97] avec une complexité en $O(N)$. La méthode repose sur la transformée de Legendre de fonctions affines par morceaux. On introduit pour commencer un ensemble de fonctions affines par morceaux stable par transformée de Legendre. Il s'agit ensuite de traduire la définition 6.1.4 pour cet ensemble de fonction. À la façon de Lucet [Luc97], on propose un algorithme rapide dont la complexité est linéaire par rapport au nombre de points d'échantillonnage. L'algorithme consiste à calculer d'abord l'enveloppe convexe de la fonction affine que l'on veut transformer.

L'extension aux dimensions supérieures est facilitée par la propriété de « factorisation » de la transformée de Legendre [Luc97]. On détaillera le cas bidimensionnel, suffisant pour la construction de lois d'état. Nous ferons référence aux résultats de complexité et de convergence démontrés par Lucet. Des résultats numériques complètent le paragraphe.

6.2.1 Transformée de Legendre de fonctions affines par morceaux

Ce paragraphe porte sur la transformée de Legendre de fonctions affines par morceaux. On introduit tout d'abord la notion de fonctions affines de type « boîte » et de type « affine » illustrées en figure 6.2.1.

Définition 6.2.1. Soit $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue linéaire par morceaux sur l'intervalle $[a, b] \in \mathbb{R}$. La fonction f est prolongée en dehors du domaine :

- soit par $+\infty$:

$$f(x) = f(x) + I_{[a,b]}(x) = \begin{cases} f(x), & \text{si } x \in [a, b], \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.4)$$

On dira alors que f est de type boîte.

- soit par des droites affines :

$$f(x) = \begin{cases} f'(a)(x - a) + f(a), & \text{si } x \leq a, \\ f(x), & \text{si } x \in [a, b], \\ f'(b)(x - b) + f(b), & \text{si } x \geq b. \end{cases} \quad (6.5)$$

Alors la fonction f est dite de type affine.

Alors on a

Proposition 6.2.2. L'ensemble des fonctions de type affine ou boîte est stable par les opérations max et +, par transformée de Legendre, convexification et inf-convolution.

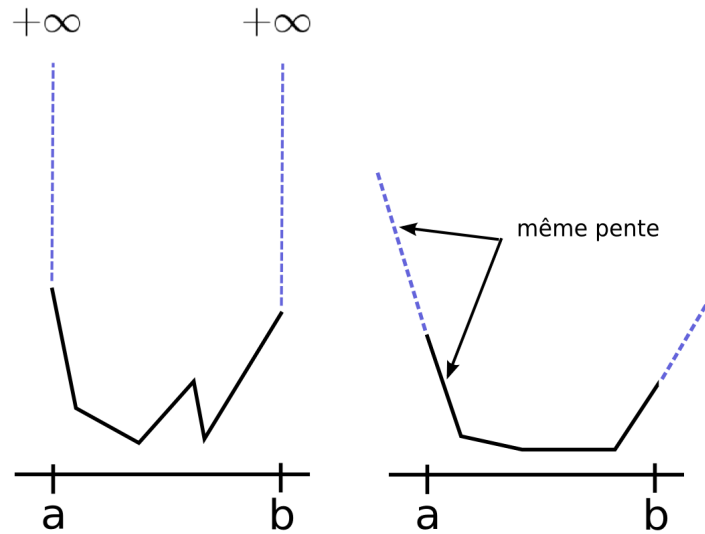


FIG. 6.2.1 – Fonctions linéaires par morceaux de type boîte (à gauche) et de type affine (à droite).

Démonstration. Soient f_1 et f_2 deux fonctions de type boîte (resp. de type affine). Il est clair que le max et la somme de f_1 et f_2 est de type boîte (resp. de type affine). De même l'enveloppe convexe d'une fonction de type boîte (resp. de type affine) est de type boîte (resp. de type affine). Considérons une fonction f de type boîte et calculons sa conjuguée. La fonction f est supposée prolongée par $+\infty$ en dehors d'un domaine $[a, b]$. Soit $s = \inf_{x \in [a, b]} (\inf \partial f(x))$. On pose $\lambda < s$. La conjuguée de f est donnée par :

$$\begin{aligned} f^*(\lambda) &= \max_{x \in \mathbb{R}} \lambda x - f(x) \\ &= \max_{x \in \mathbb{R}} \lambda x - f(x) - I_{[a, b]}(x) \\ &= \max_{x \in [a, b]} \lambda x - f(x). \end{aligned}$$

Supposons que $x \in]a, b[$ maximise $f^*(\lambda)$. Alors λ appartient au sous-différentiel de f en x , ce qui est contredit par l'hypothèse $\lambda < s$. On a donc forcément $f^*(\lambda) = \lambda a - f(a)$ ou $f^*(\lambda) = \lambda b - f(b)$. De façon similaire on montre que la conjuguée d'une fonction de type affine est de type boîte. \square

On détaille la transformée de Legendre d'une fonction de type boîte, la procédure étant similaire pour une fonction de type affine. Considérons une fonction f continue et affine par morceaux sur l'intervalle $[a, b] \subset \mathbb{R}$, prolongée par $+\infty$ en dehors du domaine. Soit $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un ensemble de $N + 1$ points distincts ordonnés de l'intervalle $[a, b]$. La fonction f vérifie

$$\forall x \in \mathbb{R}, f(x) = \begin{cases} \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} (x - x_i) + f(x_i), & \text{si } x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ +\infty, & \text{si } i \in \{0, \dots, N - 1\}, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.6)$$

D'après la définition 6.1.4, le domaine de la conjuguée f^* est l'ensemble des pentes de toutes les fonctions affines minimisant f . D'autre part la conjuguée de l'enveloppe convexe d'une fonction f coïncide avec la conjuguée f^* :

$$(\text{co}(f))^* = f^*.$$

Ainsi on peut commencer par construire l'enveloppe convexe de la fonction f avant d'en calculer la transformée de Legendre. De cette manière la complexité de l'algorithme introduit dans [Luc96] diminue de $\mathcal{O}(N \log(N))$ à $\mathcal{O}(N)$, dans la mesure où la convexification peut être effectuée avec une complexité linéaire [Luc96]. De nombreux algorithmes sont proposés par Lucet (par exemple l'algorithme *Beneath-Beyond* ou *Divide-and-Conquer* décrits par Edelsbrunner [Ede87] ou Preparata et Shamos [PS85]). On détaille ici un algorithme simple pour construire l'enveloppe convexe de la fonction affine par morceaux f .

Soient P_i les points de coordonnées $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \dots, N$. L'enveloppe convexe discrète $\text{co}(f)$ est donnée par l'ensemble des points P_k , $k = 0, \dots, N^*$ ($N^* \leq N$), tels que les pentes de $\text{co}(f)$, entre deux points consécutifs, forment une suite croissante. Par exemple si f est une fonction concave, son enveloppe convexe $\text{co}(f)$ est définie par l'ensemble $\{P_0, P_N\}$. On introduit certaines notations préliminaires.

On désigne par G la liste de points $G := \{P_i, i = 0, \dots, N\}$ et $|G|$ son cardinal. La pente entre deux points P_i et P_k de G est :

$$S(P_i, P_k) = \frac{f(x_i) - f(x_k)}{x_i - x_k}.$$

L'algorithme de convexification est le suivant :

```

Procédure Co( $G$ )
  remove : booléen ;
  Tant que ( $(|G| > 2)$  ET (remove = vrai)) faire
    remove  $\leftarrow$  faux ;
    Pour  $i = 1, \dots, |G| - 1$  faire
      Si ( $S(P_{i-1}, P_i) < S(P_i, P_{i+1})$ ) Alors
         $G = G \setminus \{P_i\}$ 
        remove  $\leftarrow$  vrai
      Fin Si
    Fin Pour
  Fait
Fin

```

Algorithme 4: Algorithme de convexification.

De cette manière $\text{co}(f)$ est une fonction convexe linéaire par morceaux de type boîte, dont les pentes sont :

$$\xi_i = \frac{\text{co}(f)(x_i) - \text{co}(f)(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, N^*,$$

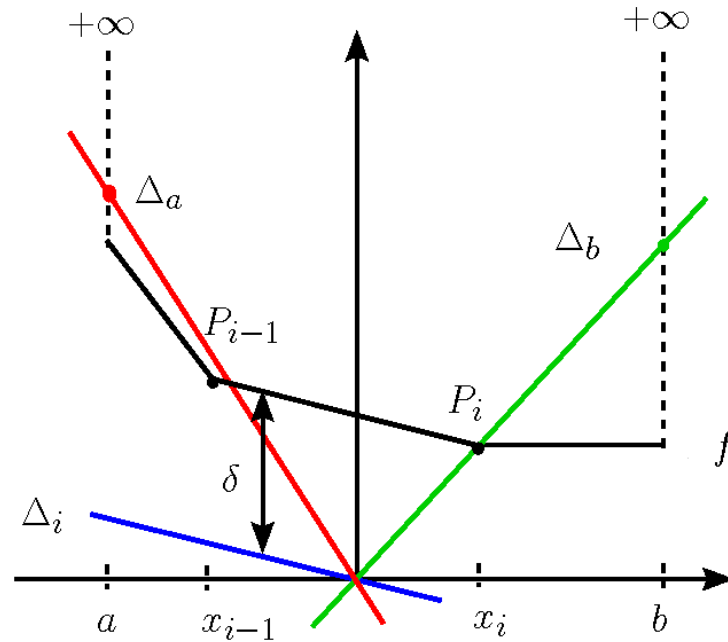


FIG. 6.2.2 – Transformée de Legendre d'une fonction de type boîte linéaire par morceaux.

où N^* désigne la discrétisation du domaine dual de $\text{co}(f)$. La suite de pentes vérifie :

$$\xi_1 \leq \xi_2 \leq \dots \leq \xi_{N^*}. \quad (6.7)$$

Remarques 6.2.3.

1. Cet algorithme est manifestement non optimal puisque l'on parcourt l'ensemble des points P_i à chaque itération. Moyennant quelques modifications on peut obtenir un algorithme de complexité en $O(N)$ (on évite alors de parcourir les pentes déjà ordonnées).
2. Le procédé de convexification est identique pour les fonctions de type affine. L'enveloppe convexe discrète ainsi construite demeure de type affine.
3. Par la suite on pose $N^* = N$ pour des questions de lisibilité. Cependant la discrétisation du domaine dual peut différer de celle du domaine réel.

Le calcul de la conjuguée $(\text{co}(f))^*$ est le suivant (voir figure 6.2.2).

- Pour tout x fixé dans $]x_{i-1}, x_i[$, $i \in \{1, \dots, N\}$, soit Δ_i la droite de pente ξ_i . Par définition la valeur $(\text{co}(f))^*(\xi_i)$ est la distance (algébrique) maximale δ entre le segment $[P_{i-1}, P_i]$ et la droite Δ_i .
- Pour tout $x < a$ (resp. $x > b$) fixé, on trace la droite Δ_a de pente ξ_1 (resp. la droite Δ_b de pente ξ_N). Puisque $\text{co}(f)$ est prolongée par $+\infty$ en dehors de l'intervalle $[a, b]$, la distance maximale entre Δ_a (resp. Δ_b) et $\text{co}(f)$ est atteinte en a (resp. b).

En d'autres termes la conjuguée de f^* satisfait :

$$f^*(\xi) = (\text{co}(f))^*(\xi) = \begin{cases} a\xi - \text{co}(f)(a), & \text{si } \xi \leq \xi_1, \\ x_i\xi - \text{co}(f)(x_i), & \text{si } \xi_i \leq \xi \leq \xi_{i+1}, \\ & i = 1, \dots, N-1, \\ b\xi - \text{co}(f)(b), & \text{si } \xi \geq \xi_N. \end{cases} \quad (6.8)$$

La fonction $(\text{co}(f))^*$, convexe linéaire par morceaux, est définie sur le domaine dual $[\xi_1, \xi_N]$ et est prolongée par des droites de pentes a et b en dehors du domaine (elle est donc de type affine). En général les points de discrétisation de $(\text{co}(f))^*$ ne sont plus équirépartis sur le domaine. Aussi peut-il être nécessaire d'échantillonner la conjuguée une fois de plus. Cette opération s'avère essentielle pour l'algorithme 2D décrit plus bas.

Remarque 6.2.4. En appliquant une seconde fois l'algorithme, on calcule la bi-conjuguée f^{**} , qui définit l'enveloppe convexe de la fonction f . L'opération peut sembler redondante puisque l'on construit justement l'enveloppe convexe pour déterminer f^* . Elle est néanmoins essentielle dans le cas multidimensionnel. En effet, s'il existe des algorithmes de convexification de complexité linéaire dans le plan, ce n'est plus le cas pour \mathbb{R}^n , $n \geq 3$ [Ede87]. D'après la proposition 6.1.9, appliquer l'algorithme de transformée de Legendre deux fois à une surface donnée est donc un moyen efficace de calculer l'approximation de son enveloppe convexe.

6.3 Algorithme de TLR unidimensionnel : synthèse

Le procédé de transformée de Legendre rapide a été détaillé pour des fonctions linéaires par morceaux de type boîte ou affine. Dans ce chapitre, l'algorithme est généralisé à toute fonction à valeurs réelles. Pour ce faire on introduit un opérateur d'interpolation.

Soit $f : [a, b] \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction non nécessairement continue.

Définition 6.3.1. Soit $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ un ensemble de $N + 1$ points distincts de l'intervalle $[a, b]$ tel que :

$$x_i = a + i \frac{b-a}{N}, \quad i = 0, \dots, N.$$

On note Πf la projection de f telle que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \Pi f(x) = \begin{cases} \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) + f(x_i), & \text{si } x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ & i \in \{0, \dots, N-1\}, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.9)$$

L'opérateur d'interpolation linéaire définit ainsi une fonction de type boîte.

De façon similaire l'opérateur d'interpolation pourrait prolonger la fonction interpolée par des droites affines.

Puisque l'on interpole la fonction f , on calcule une approximation de sa transformée de Legendre. Rappelons l'algorithme de transformée de Legendre approchée unidimensionnelle pour une fonction f quelconque :

- Étape 1 :** Construire l'enveloppe convexe $\text{co}(\Pi f)$.
- Étape 2 :** Déterminer l'ensemble dual discret Γ des pentes de $\text{co}(\Pi f)$.
- Étape 3 :** Calculer $(\text{co}(\Pi f))^*$, d'après la formule (6.8).
- Étape 4 :** Calculer l'approximation de la conjuguée $f^* \simeq \Pi((\text{co}(\Pi f))^*)$ en utilisant l'opérateur d'interpolation linéaire (pour conserver N valeurs discrètes).
- Étape 5 :** **Étendre f^* par des droites affines en dehors du domaine dual Γ .**

Algorithme 5: Algorithme de transformée de Legendre 1D pour une fonction de type boîte.

On insiste sur le fait que la transformée de Legendre d'une fonction de type boîte est une fonction de type affine.

Bien que les deux opérations soient identiques d'un point de vue algorithmique, on détaille l'algorithme de transformée de Legendre pour une fonction de type affine. Considérons une fonction $g : [a, b] \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ prolongée par des droites affines. L'algorithme inverse est le suivant :

- Étape 1 :** Construire l'enveloppe convexe $\text{co}(\Pi g)$.
- Étape 2 :** Déterminer l'ensemble dual discret Δ des pentes de $\text{co}(\Pi g)$.
- Étape 3 :** Calculer $(\text{co}(\Pi g))^*$, d'après la formule (6.8).
- Étape 4 :** Calculer l'approximation de la conjuguée $g^* \simeq \Pi((\text{co}(\Pi g))^*)$ en utilisant l'opérateur d'interpolation linéaire (pour conserver N valeurs discrètes).
- Étape 5 :** **Étendre g^* par $+\infty$ en dehors du domaine Δ .**

Algorithme 6: Algorithme de transformée de Legendre 1D inverse pour une fonction de type affine.

La transformée de Legendre d'une fonction de type affine est une fonction de type boîte.

Considérons une fonction de type boîte f définie sur un domaine $[a, b]$ (prolongée par $+\infty$ en dehors). Calculer sa biconjuguée revient à appliquer l'algorithme 6.3 pour en déduire sa conjuguée de type affine f^* . L'algorithme 6.3 appliqué à la conjuguée définit la biconjuguée qui sera à nouveau de type boîte. Par construction le domaine de f^{**} , *i.e.*

$$\text{dom}(f^{**}) = \{x \in \mathbb{R}, f^{**}(x) \neq +\infty\},$$

est exactement le domaine d'étude initial $[a, b]$.

Les exemples suivant illustrent l'effet de l'échantillonnage sur le calcul de conjuguées ou biconjuguées.

Exemple 6.3.2. On considère l'indicatrice convexe $I_{[-2,3]}$ (voir exemple 6.1.5). Le calcul de sa conjuguée et de sa biconjuguée donne les résultats présentés en figures 6.3.1. Les résultats numériques relatifs à l'exemple 6.1.6 sont donnés en figures 6.3.2.

Exemple 6.3.3. Les figures 6.3.3 présentent les effets de la discrétisation sur le calcul de la biconjuguée de la fonction $f(x) = x^2$.

6.3.1 Extension aux dimensions supérieures

Le passage aux dimensions supérieures est assez immédiat puisque la transformée de Legendre dans \mathbb{R}^n équivaut à n transformées de Legendre dans \mathbb{R} . Ainsi la complexité de l'algorithme est également en $\mathcal{O}(N)$, où N est le nombre de points de discrétisation dans \mathbb{R}^n .

Pour $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, la définition 6.1.4 donne une expression de la conjuguée f^* :

$$f^*(\xi) = \sup_{x_1 \in \mathbb{R}} \left[\xi_1 x_1 + \sup_{x_2 \in \mathbb{R}} \left[\xi_2 x_2 + \dots + \sup_{x_d \in \mathbb{R}} [\xi_d x_d - f(x)] \right] \right]. \quad (6.10)$$

Pour plus de clarté, on se limite au cas bidimensionnel :

$$f^*(\xi_1, \xi_2) = \sup_{x_1 \in \mathbb{R}} \left[\xi_1 x_1 + \sup_{x_2 \in \mathbb{R}} [\xi_2 x_2 - f(x_1, x_2)] \right]. \quad (6.11)$$

Par la suite on notera $f^{*,1}$ (resp. $f^{*,2}$) la transformée de Legendre partielle par rapport à la variable x_1 (resp. x_2). Selon (6.11) on voit que :

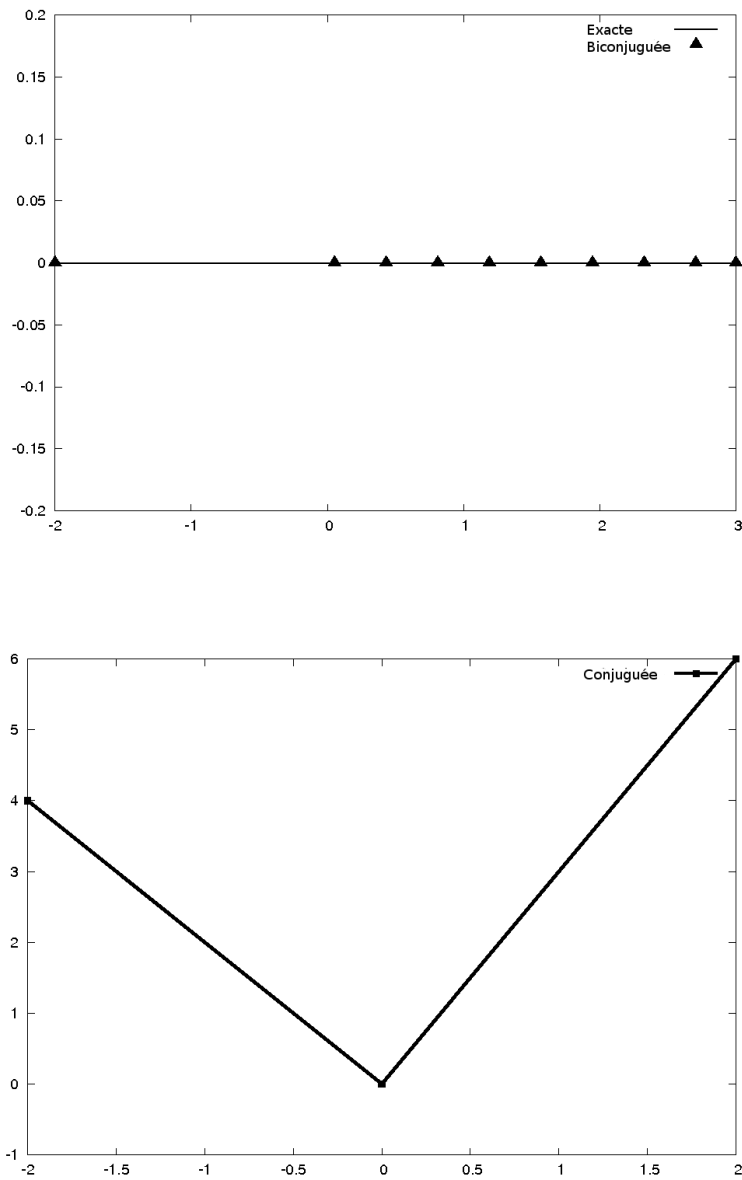
Proposition 6.3.4. La transformée de Legendre multidimensionnelle ne nécessite que des transformées unidimensionnelles, i.e.

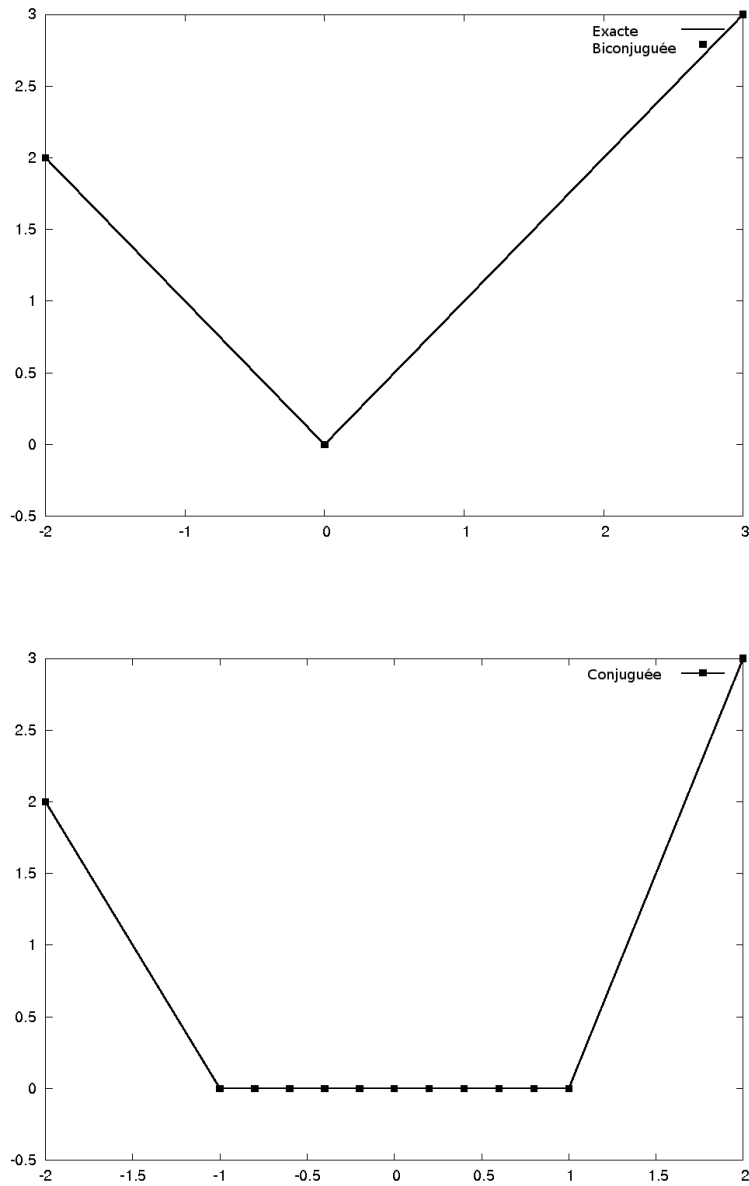
$$f^* = (-f^{*,2})^{*,1}.$$

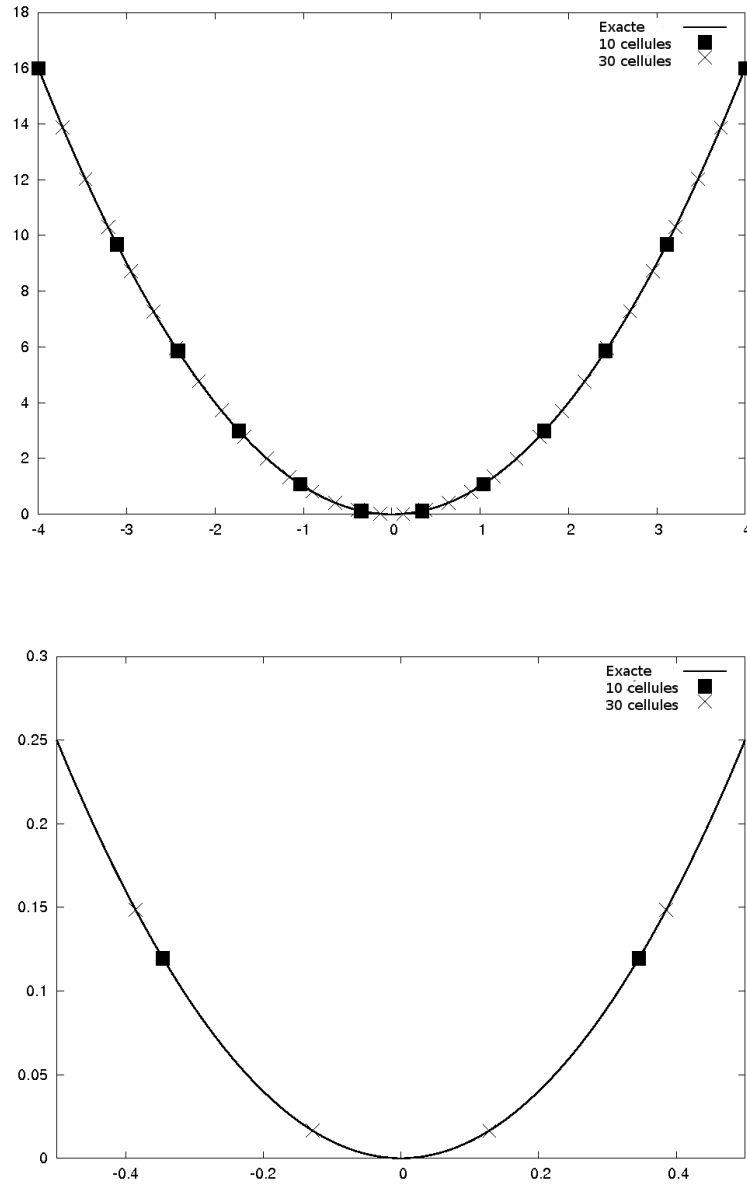
Cette proposition s'étend facilement aux dimensions supérieures. De ce fait les résultats de complexité et de convergence énoncés dans [Luc97] restent valables.

Remarque 6.3.5. Si f est convexe par rapport à x_1 , alors $f^{*,2}$ est concave par rapport à x_1 . Cela explique l'apparition de l'opposé $-f^{*,2}$ pour que f^* soit une fonction convexe.

Soit $f : [a, b] \times [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction à deux variables réelles. On suppose f prolongée par $+\infty$ en dehors de $[a, b] \times [c, d]$. L'algorithme de calcul de l'approximation de la transformée de Legendre bidimensionnelle est le suivant :

FIG. 6.3.1 – Conjuguée et biconjuguée de $I_{[-2,3]}$.

FIG. 6.3.2 – Conjuguée et biconjuguée de $f(x) = |x| + I_{[-2,3]}$.

FIG. 6.3.3 – Conjuguée et biconjuguée de $f(x) = x^2 + I_{[-4,4]}$.

Étape 1 : Discrétisation : Construire les ensembles discrets X et Y tels que ¹ :

$$X := \left\{ x_i = a + i \frac{b-a}{N}, \quad i = 0, \dots, N \right\}, \quad (6.12)$$

$$Y := \left\{ y_j = c + j \frac{d-c}{M}, \quad j = 0, \dots, M \right\}. \quad (6.13)$$

Étape 2 : Pour $y_j \in Y, j \in \{1, \dots, M\}$ **faire**

Construire la fonction affine par morceaux $\Pi f(\cdot, y_j)$.

Construire l'enveloppe convexe $\text{co}(\Pi f)(\cdot, y_j)$.

Déterminer l'ensemble $\Xi = \{\xi_1, \dots, \xi_N\}$

des pentes de $\text{co}(\Pi f)(\cdot, y_j)$.

Calculer l'approximation $f^{*,1} \simeq \Pi \left((\text{co}(\Pi f))^{*,1} \right)$

en utilisant l'algorithme 6.3.

Fin Pour

Étape 3 : Pour $\xi_i \in \Gamma, i \in \{1, \dots, N\}$ **faire**

Construire la fonction affine par morceaux $\Pi(-f^{*,1})(\xi_i, \cdot)$.

Construire l'enveloppe convexe $\text{co}(\Pi(-f^{*,1}))(\xi_i, \cdot)$.

Déterminer l'ensemble $\Gamma = \{\gamma_1, \dots, \gamma_M\}$

des pentes de $\text{co}(\Pi(-f^{*,1}))(\xi_i, \cdot)$.

Calculer l'approximation $f^* \simeq \Pi \left((\text{co}(\Pi(-f^{*,1})))^{*,2} \right)$

en utilisant l'algorithme 6.3.

Fin Pour

Algorithme 7: Algorithme de transformée de Legendre bidimensionnelle.

La surface obtenue est prolongée par des surfaces réglées en dehors du domaine dual. En effet considérons $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Son graphe est appelé surface réglée dans la direction ξ si

$$f(\xi, \gamma) = g(\gamma) + h(\gamma)(\xi - \xi_0),$$

où g et h sont des fonctions données arbitraires, $(\xi, \gamma) \in \mathbb{R}^2$ et $\xi_0 \in \mathbb{R}$. D'après la définition, pour $\xi < \xi_1$ et $\xi > \xi_N$ (resp. pour $\gamma < \gamma_1$ et $\gamma > \gamma_M$), la conjuguée partielle $f^{*,1}(\xi, \gamma)$ (resp. $f^{*,2}(\xi, \gamma)$) définit une surface réglée dans la direction ξ (resp. dans la direction γ). Par conséquent le graphe de f^* est localement un hyperplan dans $\mathbb{R}^2 \setminus \{([a, b] \times \mathbb{R}) \cup (\mathbb{R} \times [c, d])\}$.

De la même manière on peut définir l'algorithme bidimensionnel pour une surface prolongée par des surfaces réglées. La surface conjuguée serait dans ce cas prolongée par $+\infty$ en dehors du domaine dual.

¹Pour ne pas alourdir les notations et sans perte de généralité, on suppose la discrétisation du domaine dual identique à celle du domaine réel. Sans confusion, on note également Π l'opérateur d'interpolation dans la direction y . Il s'agit d'un abus de notation, l'opérateur Π étant défini spécifiquement dans la direction x .

6.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons examiné le lien entre transformée de Legendre et opérations \boxplus et \boxtimes introduites au chapitre 5. Notamment on a montré que, par transformée de Legendre, elles deviennent des opérations duales qui sont respectivement \max et $+$. Ainsi les calculs de lois d'état de mélange binaire peuvent être effectués de façon simple dans le cadre des algèbres $(\max, +)$. Bien qu'il s'agisse d'un outil classique de recherche opérationnelle [Mas87, KM97] et de probabilités (nous nous référons au site <http://www.inria.fr/recherche/equipes/maxplus.fr.html> de l'équipe MAXPLUS INRIA), il n'est pas utilisé, à notre connaissance, dans le cadre thermodynamique.

La transformée de Legendre possède de bonnes propriétés algorithmiques. D'une part, c'est une opération stable pour les fonctions affines par morceaux de type boîte ou de type affine. La construction de l'algorithme 1D repose sur l'étude de la transformée de Legendre pour cet ensemble de fonctions. À la manière de Lucet [Luc97], il s'agit en premier lieu de construire l'enveloppe convexe de la fonction affine considérée. De cette manière la complexité de l'algorithme est améliorée et l'on se ramène à une complexité linéaire. Puis le calcul de la transformée de Legendre se résume à la traduction de la définition 6.1.4. Notre approche est cependant plus robuste que celle proposée par Lucet [Luc96] en particulier sur les bords du domaine de calcul. On insiste sur le fait que la TLR d'une fonction de type boîte est une fonction de type affine et inversement. L'algorithme est construit de sorte que la biconjuguée d'une fonction convexe f est identiquement égale à la fonction f .

D'autre part, l'extension bidimensionnelle repose sur la propriété de factorisation de la transformée de Legendre : la transformée de Legendre sur \mathbb{R}^n correspond à n TL sur \mathbb{R} . L'algorithme 2D consiste simplement à appliquer l'algorithme 1D une fois sur les lignes de la surface tabulée puis une seconde fois sur les colonnes. Les résultats de convergence et de complexité restent donc valables en dimension supérieure. Il s'agit maintenant d'appliquer l'algorithme de transformée de Legendre rapide à la construction de lois d'état pour la transition de phase.

CONSTRUCTION DE LOIS D'ÉTAT ADMISSIBLES

Nous avons vu que la thermodynamique de transition de phase liquide-vapeur peut être décrite par deux opérations sur l'espace des fonctions convexes de \mathbb{R}^2 : l'inf-convolution \square et la convexification du minimum Ψ . Le lien entre cette algèbre et la transformée de Legendre, étudiée en chapitre 6, nous a permis de définir une algèbre duale $(\max, +)$ dans l'espace de Legendre. Nous avons aussi développé un algorithme de transformée de Legendre rapide. Dans ce chapitre on s'attache à utiliser ces outils pour construire numériquement des lois d'état tabulées.

La transformée de Legendre est utilisée pour définir des changements de variables très utiles en thermodynamique (pour une étude mathématique, on se réfère à la thèse de croisille [Cro91]). Nous commençons donc par établir la version discrète de ces changements de variables. Ils seront utilisés pour l'étude numérique des courbes isothermes et le calcul des fractions de masse.

Nous montrons ensuite comment le procédé de convexification numérique peut être appliqué à la loi de van der Waals.

Dans le cas immiscible, on décrit numériquement un modèle simple de transition, étudié par Jaouen [Jao01], Faccanoni [Fac08], Helluy et Seguin [HS06].

Nous considérons enfin un mélange miscible.

7.1 Changement de variables et isothermes

Ce paragraphe traite de la correspondance entre l'algèbre (Ψ, \square) , introduite au chapitre 5, et l'algèbre duale $(\max, +)$, définie par la proposition 6.1.15. On exprime les transformées de Legendre des équations d'état complètes en variables volumiques et massiques. On constatera que travailler dans le domaine de Legendre simplifie les opérations nécessaires à la construction de lois d'état admissibles.

7.1.1 Conjuguées de lois d'état complètes

La transformée de Legendre est un outil classique en thermodynamique qui permet de définir différents potentiels. Dans ce paragraphe, nous exprimons les

conjuguées (éventuellement partielles) des équations d'état complètes introduites précédemment.

Proposition 7.1.1. *Les transformées de Legendre des énergies massique e^* et volumique ε^* sont définies respectivement par le potentiel chimique et par la pression :*

$$e^*(-p, T) = -\mu(p, T), \quad (7.1)$$

$$\varepsilon^*(\mu, T) = p(\mu, T). \quad (7.2)$$

Démonstration. L'énergie massique $e(\tau, s)$ est une fonction convexe de ses arguments dont les dérivées sont :

$$\frac{\partial e}{\partial \tau} = -p, \quad \frac{\partial e}{\partial s} = T.$$

La conjuguée est donnée par la définition 6.1.4 :

$$e^*(-p, T) = Ts - \tau p - e(\tau, s)$$

D'après la relation de Gibbs (5.9) le membre de droite est l'opposé du potentiel chimique $\mu(p, T)$. On considère maintenant l'énergie volumique $\varepsilon(\rho, \sigma)$. La formulation volumique de la relation fondamentale (5.11) implique que ses dérivées sont :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} = \mu, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} = T.$$

D'après la définition 6.1.4, on a :

$$\begin{aligned} \varepsilon^*(\mu, T) &= T\sigma + \mu\rho - \varepsilon(\rho, \sigma) \\ &= \rho(Ts + \mu - e). \end{aligned}$$

La définition du potentiel de Gibbs :

$$\mu = \tau p - Ts + e, \quad (5.9)$$

nous permet de conclure. □

Grâce à la transformée de Legendre, nous obtenons une troisième définition du potentiel chimique, qui s'avère être la conjuguée de l'énergie massique. Rappelons que la première définition du potentiel chimique (5.9) est issue de la relation d'Euler, la seconde (5.7) étant donnée par la relation fondamentale en variables extensives.

La conjuguée e^* étant une fonction convexe de ses arguments, par propriété de la transformée de Legendre, on en déduit très simplement que le potentiel chimique est une fonction concave de p et T . De même, la pression est une fonction convexe de μ et de T .

De façon similaire on souhaite calculer les conjuguées des entropies. Puisque ce sont des fonctions concaves de leurs arguments, on effectue les calculs sur leurs opposées.

Proposition 7.1.2. *Les transformées de Legendre des entropies massique s^* et volumique σ^* sont :*

$$(-s)^* \left(-\frac{p}{T}, -\frac{1}{T} \right) = -\frac{1}{T} \mu(p, T), \quad (7.3)$$

$$(-\sigma)^* \left(\frac{\mu}{T}, -\frac{1}{T} \right) = -\frac{1}{T} p(\mu, T). \quad (7.4)$$

Le preuve est similaire à celle donnée pour la proposition 7.1.1.

On s'intéresse aussi aux transformées de Legendre partielles de l'énergie massique, qui définissent des potentiels connus :

Proposition 7.1.3. *La transformée de Legendre partielle de l'énergie massique $e(\tau, s)$ par rapport à τ est l'opposée de l'enthalpie :*

$$e^{*,\tau}(-p, s) = -p\tau - e = -h(-p, s). \quad (7.5)$$

De même la transformée de Legendre partielle de l'énergie massique $e(\tau, s)$ par rapport à s est l'opposée de l'énergie libre de Helmholtz :

$$e^{*,s}(\tau, T) = Ts - e = -f(\tau, T). \quad (7.6)$$

Ces potentiels vérifient de plus les relations suivantes :

$$dh = \tau dp + T ds, \quad (7.7)$$

$$df = -pd\tau - sdT. \quad (7.8)$$

Les transformées de Legendre partielles de l'entropie massique $s(\tau, e)$ définissent les mêmes potentiels, au facteur $\frac{1}{T}$ près.

Dans ce paragraphe, nous avons déterminé les conjuguées de l'énergie et de l'entropie. Pour construire l'énergie ou l'entropie de mélange, miscible ou non-miscible, on peut maintenant se placer dans le domaine de Legendre. Ainsi on est amené à utiliser uniquement les opérations max et +, plus faciles à manipuler que les opérations Ψ et \square . Le paragraphe suivant traite de cette mise en œuvre.

7.1.2 Correspondance $(\Psi, \square, Conv(\mathbb{R}^n))$ - $(\max, +, Conv(\mathbb{R}^n))$

Dans le chapitre 5, on a montré qu'à l'équilibre, l'énergie d'un mélange binaire était définie par les opérations Ψ et \square selon la nature miscible ou non du mélange. La propriété 6.1.15 garantit que ces opérations correspondent respectivement aux opérations max et + dans l'espace de Legendre. Dans ce paragraphe, on détaille les énergies de mélanges immiscibles et miscibles. On insiste en particulier sur l'interprétation physique des résultats.

Cas immiscible

On considère un mélange immiscible de deux phases, notées (1) et (2), d'un même corps pur. Chaque phase est décrite par son énergie massique $e_i(\tau, s)$, $i = 1, 2$. On a alors

Proposition 7.1.4. *La conjuguée de l'énergie massique du mélange est :*

$$e^*(-p, T) = -\mu(p, T). \quad (7.9)$$

À l'équilibre, le potentiel chimique du mélange est le minimum des potentiels de chaque phase :

$$\mu(p, T) = \min(\mu_1, \mu_2)(p, T). \quad (7.10)$$

En supposant les deux phases décrites par leurs énergies volumiques $\varepsilon_i(\tau, s)$, $i = 1, 2$, on a

Proposition 7.1.5. *La conjuguée de l'énergie volumique du mélange est :*

$$\varepsilon^*(\mu, T) = p(\mu, T). \quad (7.11)$$

À l'équilibre, la pression du mélange est le maximum des pressions de chaque phase :

$$p(\mu, T) = \max(p_1, p_2)(\mu, T). \quad (7.12)$$

Les relations (7.10) et (7.12) définissent la coexistence des deux phases qui correspond à :

$$\mu(p, T) = \mu_1(p, T) = \mu_2(p, T),$$

et

$$p(\mu, T) = p_1(\mu, T) = p_2(\mu, T).$$

Cas miscible

Dans le cas miscible, le passage aux variables intensives nous oblige à travailler dans les variables volumiques. On considère donc que les deux phases du mélange sont décrites par leurs énergies volumiques $\varepsilon_i(\rho, \sigma)$, $i = 1, 2$.

Proposition 7.1.6. *La conjuguée de l'énergie volumique du mélange est :*

$$\varepsilon^*(\mu, T) = p(\mu, T).$$

À l'équilibre, la pression du mélange miscible est la somme des pressions de chaque phase :

$$p(\mu, T) = p_1(\mu, T) + p_2(\mu, T). \quad (7.13)$$

On retrouve ainsi la loi de Dalton vérifiée par les mélanges miscibles et démontrée dans la proposition 5.28.

En travaillant avec l'entropie volumique du mélange, on obtiendrait le même résultat.

7.1.3 Courbes isothermes

Il est classique en thermodynamique d'étudier les courbes isothermes dans le plan (τ, p) . De manière à générer ces courbes automatiquement, on détaille les différents changements de variables les définissant selon le type de mélange et la loi d'état complète considérée.

Supposons un fluide décrit par son énergie massique $e(\tau, s)$. On rappelle que la transformée de Legendre partielle de e par rapport à s est l'opposée de l'énergie libre de Helmholtz :

$$f(\tau, T) = Ts - e(\tau, s), \quad (7.6)$$

qui vérifie la relation :

$$df = pd\tau + sdT. \quad (7.8)$$

Il s'ensuit que la pression peut être calculée comme :

$$\frac{\partial f}{\partial \tau}(\tau, T) = p(\tau, T). \quad (7.14)$$

Le calcul numérique des courbes isothermes se déroule comme suit. Tout d'abord on tabule l'énergie $e(\tau, s)$, pour des intervalles de volume spécifique τ et d'entropie s donnés. L'algorithme de TLR est ensuite appliqué une fois dans la direction s pour calculer la fonction d'énergie libre de Helmholtz tabulée $\Pi(f)$. Enfin les courbes isothermes sont construites d'après les pentes de $\Pi(f)$ dans la direction τ , calculées par différence finies. En d'autres termes, à température fixée, on trace l'approximation numérique de la courbe paramétrée $\tau \mapsto \left(\tau, \frac{\partial f}{\partial \tau}(\tau, T) \right)$.

Il s'agit maintenant d'appliquer l'algorithme de transformée de Legendre rapide dans le contexte thermodynamique. Au chapitre 5, on a vu comment construire des lois d'état de mélange en utilisant les lois d'état de deux phases et les opérations \square et \uplus . En considérant des lois de gaz parfaits ou de gaz raides, on construira des lois de mélanges miscibles ou immiscibles. Dans un premier temps, on s'intéresse au modèle de van der Waals.

7.2 Application du procédé de convexification au modèle de van der Waals

L'équation d'état de van der Waals est sans doute le modèle le plus connu de transition de phase. Son énergie est donnée par :

$$e(\tau, s) = (\tau - b)^{-\frac{R}{c_V}} \exp\left(\frac{s}{c_V}\right) - \frac{a}{\tau}, \quad (7.15)$$

où R est la constante des gaz parfaits, c_V désigne la chaleur spécifique à volume constant, a et b sont des constantes positives. Pour une construction détaillée du modèle, le lecteur pourra consulter le chapitre 3.5 de [Cal85]. Des études approfondies de cette loi d'état sont menées par Voß [Voß05] et Faccanoni [Fac08] dans leurs thèses.

La relation fondamentale (5.4) nous donne les expressions de la température et de la pression :

$$T = \frac{1}{c_V}(\tau - b)^{\frac{R}{c_V}} \exp\left(\frac{s}{c_V}\right) = c_V \left(e + \frac{a}{\tau} \right), \quad (7.16)$$

$$p = \frac{R}{c_V}(\tau - b)^{-1-\frac{R}{c_V}} \exp\left(\frac{s}{c_V}\right) - \frac{a}{\tau^2} = \frac{RT}{\tau - b} - \frac{a}{\tau^2}. \quad (7.17)$$

Constantes	Valeurs
R	$8.314 J.K^{-1}.mol^{-1}$
c_V	$4186 J.Kg^{-1}.K^{-1}$
a	$0.544 Pa.m^{-6}$
b	$30.510^{-6} m^3$

TAB. 7.1 – Constantes de van der Waals pour l'eau liquide.

Les valeurs des paramètres pour l'eau liquide figurent en table 7.2. Pour d'autres matériaux on se réfère à l'ouvrage de Callen [Cal85] ou aux thèses de Jaouen [Jao01] et Faccononi [Fac08].

La particularité de ce modèle réside dans la non-convexité de l'énergie. Sous une certaine température T_c , dite température critique, la pression peut être localement une fonction croissante du volume spécifique. Le schéma 7.2 illustre le comportement des courbes isothermes sous-critiques, critiques et supercritiques dans le plan (τ, p) . Considérons pour commencer l'isotherme sous-critique en bleu. On observe qu'il existe deux valeurs de volume spécifique n_1 et n_2 telles que :

$$\begin{aligned} p'(n_1) &= p'(n_2) = 0, \\ p'(\tau) &> 0, \quad \forall \tau \in [n_1, n_2]. \end{aligned}$$

Il s'agit des points spinodaux. Si l'on considère toutes les courbes isothermes sous-critiques, le lieu géométrique décrit par ces points est appelée zone spinodale. La frontière de la zone de saturation correspond au lieu des points τ_1 et τ_2 qui vérifient, pour tout $T < T_c$:

$$p^*(\tau_2 - \tau_1) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} p(\tau, T) d\tau, \quad (7.18)$$

$$p^* = p(\tau_1, T), \quad (7.19)$$

$$p^* = p(\tau_2, T). \quad (7.20)$$

Dans cette zone, les phases gazeuse et liquide coexistent. Pour $\tau \in [\tau_1, n_1]$ et $\tau \in [n_2, \tau_2]$, le mélange est très instable et se voit immédiatement transformé en liquide ou vapeur. Ces zones sont dites métastables. À la température critique, les valeurs τ_1 et τ_2 coïncident : l'isotherme critique (en rouge) admet un point d'inflexion en $\tau_1 = \tau_2 = \tau_c$ qui définit le point critique C .

Remarque 7.2.1. Dans le cas de l'eau, le point critique correspond à $T_c = 273,16$ K et $P_c = 611$ Pa.

Il est fréquent d'introduire le modèle « réduit » de van der Waals, que l'on obtient en adimensionnant (7.15) autour du point critique. La position du point critique s'obtient en annulant les dérivées première et seconde de la pression :

$$\frac{\partial p}{\partial \tau}|_T = 0, \quad \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2}|_T = 0.$$

On définit ainsi un état réduit caractérisé par :

$$p_c = \frac{a}{27b^2}, \quad T_c = \frac{8a}{27Rb}, \quad \tau_c = 3b.$$

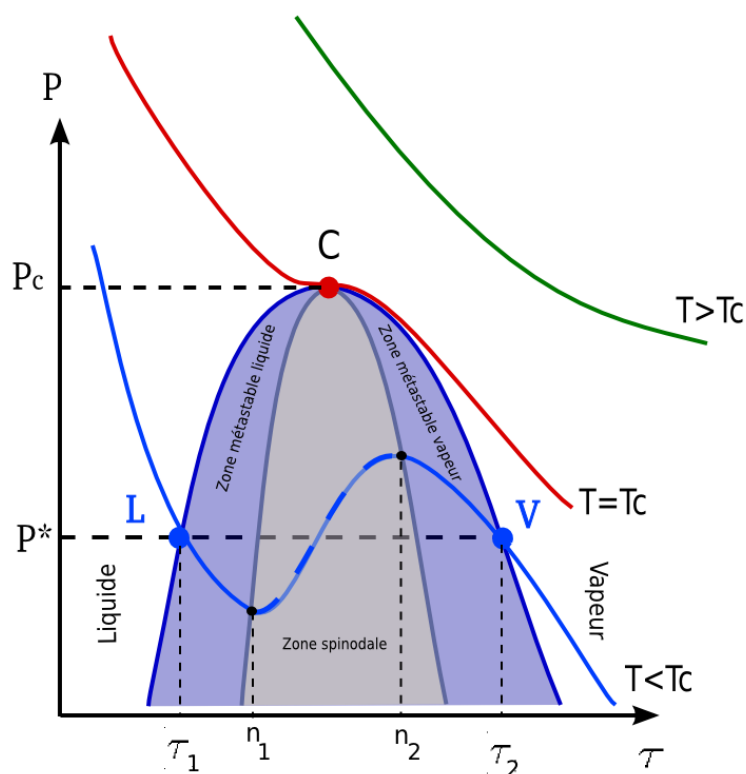


FIG. 7.2.1 – Modèle de van der Waals. Le dôme de saturation est limité par la courbe bleue. On distingue dans la zone de mélange les zones métastables et la zone spinodale. Le sommet du dôme de saturation est appelé point critique, noté c . En dessous de la température critique, les courbes isothermes sont croissantes dans la zone spinodale. Au point critique, l'isotherme critique admet un point d'inflexion. Au delà de la température critique, les isothermes sont décroissantes en accord avec la physique.

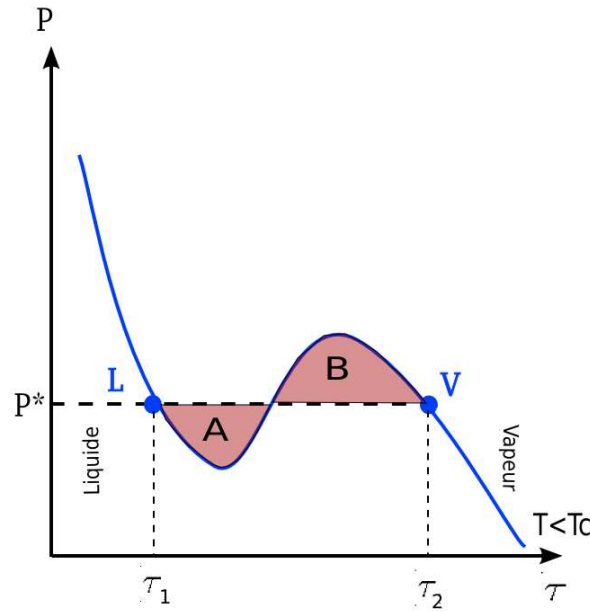


FIG. 7.2.2 – Modèle de van der Waals : construction de Maxwell. Dans la zone spinodale, les isothermes sous-critiques sont croissantes par rapport au volume spécifique. La portion croissante, physiquement incorrecte, doit être remplacée par le segment $[L, V]$ de sorte que les aires **A** et **B** soient égales. Ainsi la transition de phase est réalisée à température et pression constantes.

En divisant les variables d'état par ces valeurs réduites, on introduit les variables adimensionnées :

$$\bar{p} = \frac{p}{p_c}, \quad \bar{T} = \frac{T}{T_c}, \quad \bar{\tau} = \frac{\tau}{\tau_c}.$$

Pour plus de lisibilité, on s'affranchit de la notation $\bar{\cdot}$. L'énergie spécifique adimensionnée de van der Waals est donnée par :

$$e(\tau, s) = \begin{cases} \frac{\exp(s)}{(3\tau - 1)^{8/3}} - \frac{3}{\tau} & \text{si } \tau > \frac{1}{3}, s > 0, \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.21)$$

Dans ce cas, le point critique correspond à $T_c = 1$, $p_c = 1$ et $\tau_c = 1$.

Au dessus du point critique, les isothermes (courbe verte) sont à nouveau monotones. Dans la zone spinodale, le comportement des isothermes sous-critiques n'est pas physiquement admissible puisque $\frac{\partial p}{\partial \tau|_T} > 0$. Il est donc nécessaire de corriger ce modèle dans la zone sous-critique. La construction de Maxwell, ou loi des aires égales, consiste à remplacer la portion non-valide de l'isotherme sous-critique par le segment $[L, V]$ de sorte que les aires **A** et **B**, délimitées par l'isotherme d'origine et le segment $[L, V]$, soient égales (voir figure 7.2.2). Il s'agit donc de déterminer le couple (τ_1, τ_2) de sorte que les relations (7.18)-(7.20) soient satisfaites. La mise en oeuvre d'une telle construction est laborieuse puisque les valeurs τ_1 et τ_2 ne se déterminent pas analytiquement. Pour une étude plus complète de la construction de Maxwell, on se réfère aux travaux de Voß et Müller [DMV05, MV06, Voß05].

Proposition 7.2.2. *La loi des aires égales est équivalente à la construction de l'enveloppe convexe de la surface d'énergie (7.15).*

Démonstration. L'énergie e est une fonction convexe de ses arguments, hormis dans la zone spinodale. On introduit l'énergie libre de Helmholtz $F(\tau, T)$ définie comme l'opposée de la transformée de Legendre partielle de l'énergie $e(\tau, s)$ par rapport à l'entropie :

$$e^{*,s}(\tau, T) = Ts - e(\tau, s) = -F(\tau, T).$$

On peut relier l'enveloppe convexe de l'énergie à l'énergie libre F suivant :

$$\overline{\text{co}}(e) = e^{**} = F^{(**,\tau)^*,T}.$$

D'après les propriétés de l'opération de transformée de Legendre, l'énergie libre $F(\tau, T)$ est concave par rapport à T , mais pas globalement convexe par rapport à τ (voir figure 7.2.3). On note τ_1 et τ_2 les points frontière de la zone de non-convexité à T fixé. Puisque $F^{**,\tau}(\tau, T)$ est la convexifiée de F dans la direction τ , $F^{**,\tau}(\tau, T)$ est convexe par rapport à τ (et toujours concave par rapport à T) et linéaire entre τ_1 et τ_2 . La relation (7.8) assure que $\frac{\partial F}{\partial \tau} = p$, alors il vient :

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} \frac{\partial F^{**,\tau}}{\partial \tau} d\tau = K = p_0(\tau_2 - \tau_1).$$

D'autre part on a :

$$\begin{aligned} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \frac{\partial F}{\partial \tau} d\tau &= F(\tau_2, T) - F(\tau_1, T) \\ &= F^{**,\tau}(\tau_2, T) - F^{**,\tau}(\tau_1, T) \\ &= K. \end{aligned}$$

Ainsi $\int_{\tau_1}^{\tau_2} p(\tau, T) d\tau = p_0(\tau_2 - \tau_1)$. On retrouve bien la loi des aires égales. \square

Dans la suite du paragraphe, nous appliquons l'algorithme de transformée de Legendre rapide décrit au chapitre 6 pour construire la loi des aires égales et corriger les courbes isothermes du modèle de van der Waals. On insiste en particulier sur l'aspect numérique de la construction.

On considère un fluide décrit par l'équation d'état (7.15) et les paramètres consignés en table 7.2. Le domaine de calcul est :

$$s \in [5.7 \times 10^3, 5.77 \times 10^3] \quad \tau \in [5. \times 10^{-5}, 3. \times 10^{-4}].$$

La grille contient 1000×1000 points de discrétisation. En appliquant deux fois l'algorithme 6.3.1 à l'énergie tabulée $\Pi(e)$, on calcule l'approximation de son enveloppe convexe $\underline{\text{co}}(e(\tau, s))$. Le dôme de saturation dans le plan (τ, p) est simplement obtenu en calculant :

$$H(e, \underline{\text{co}}(e)) = \begin{cases} 1, & \text{si } e(\tau, s) > \underline{\text{co}}(e)(\tau, s) + 10^{-4}, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.22)$$

La zone où la quantité $H(e, \underline{\text{co}}(e))$ est positive correspond au dôme de saturation. Cette construction mène aux résultats présentés en figure 7.2.4.

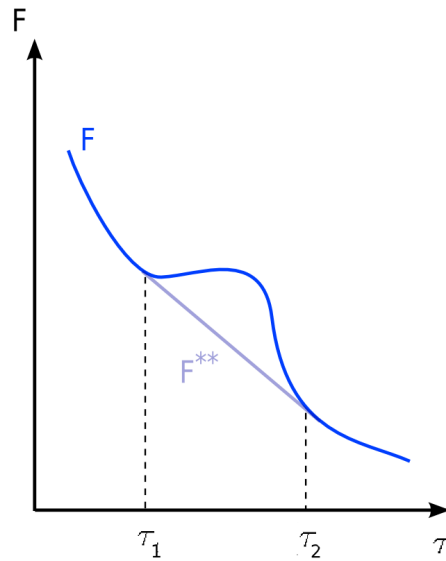


FIG. 7.2.3 – Profil de l'énergie libre de Helmholtz $F(\tau, T)$ et de sa biconjuguée $F^{**}(\tau, T)$ à température fixée.

En utilisant les changements de variables décrits en début de chapitre, il est facile de construire les courbes isothermes de l'énergie initiale $\Pi(e)$ et de la convexifiée $\underline{\text{co}}(e)$. On considère la surface d'énergie tabulée $\Pi(e)$. L'algorithme de TLR est appliqué une fois dans la direction s pour obtenir l'énergie libre de Helmholtz tabulée $\Pi(F)$. D'après la relation (7.8), la pression est donnée par :

$$p = \frac{\partial F}{\partial \tau}.$$

Pour tracer la pression en fonction de τ , il suffit de calculer les pentes de $\Pi(F)$ par différences finies. La même procédure est appliquée à l'enveloppe convexe de l'énergie $\underline{\text{co}}(e)$ pour obtenir les courbes isothermes corrigées. De cette façon on peut comparer les courbes isothermes avant le processus de convexification (voir figure 7.2.5) et après (voir figure 7.2.6). On observe que la construction de l'enveloppe convexe de l'énergie de van der Waals permet de corriger les courbes isothermes en accord avec la loi des aires égales. Après correction, la transition de phase s'effectue à pression et température constantes.

7.3 Lois d'états de mélange diphasique

Dans cette section, on utilise les algèbres (\cup, \square) et $(\max, +)$ pour construire des lois d'état de mélange. Il s'agit dans un premier temps de construire des lois de mélanges binaires. Les opérations permettent néanmoins de construire des lois de pressions pour des mélanges constitués d'un nombre arbitraire de phases.

En pratique, on se donne les équations définissant les énergies de chacune des phases et on compose les opérations. Dans ce chapitre on considère les lois classiques des gaz parfaits et des gaz raides. Le mélange binaire immiscible de gaz parfaits a fait l'objet de nombreuses études. On se réfère en particulier aux

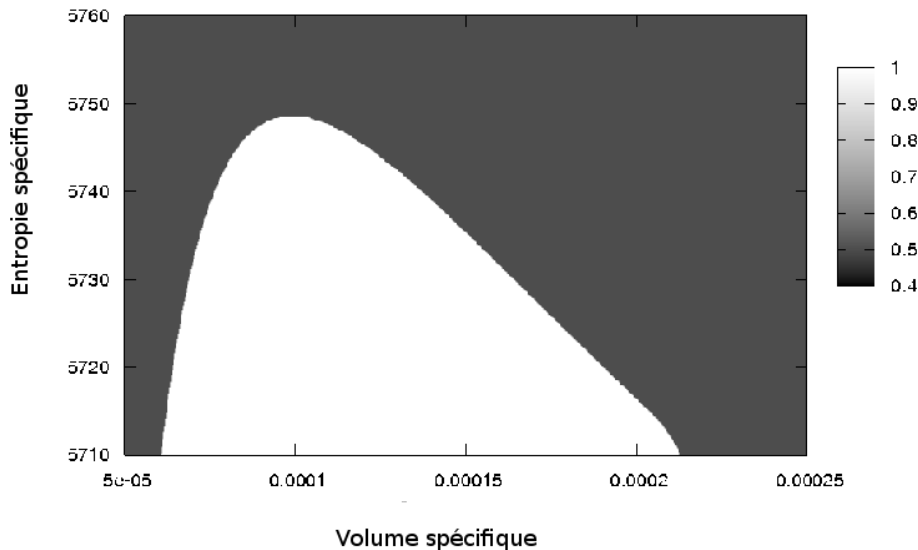


FIG. 7.2.4 – Modèle de van der Waals : dôme de saturation. La zone de saturation est donnée par la formule (7.22). La zone de mélange correspond aux valeurs positives de $H(e, \underline{co}(e))$.

travaux de Jaouen [Jao01] et Allaire *et al.* [AFK07]. Le cas d'un mélange miscible est également mentionné dans [HS06]. Le cas des mélanges de gaz raides est étudié en détail par Faccanoni dans sa thèse [Fac08].

Après une description rapide des modèles de gaz parfaits et raides, on construit un mélange immiscible de gaz parfaits. On détaille l'expression analytique de l'énergie du mélange. On montre que le calcul numérique des courbes isothermes est en accord avec les calculs analytiques. Si les chaleurs spécifiques à volume constants c_V de chaque phase sont égales, la zone de saturation est une bande. On retrouve alors les résultats de Jaouen. On propose un calcul pour lequel les chaleurs spécifiques sont supposées différentes de 1. Dans ce cas, la bande de saturation est « tordue » mais ne présente pas de point critique. Il s'agit d'un exemple décrit par Faccanoni ([Fac08], chap. 5) que nous reprenons ci-dessous. Il n'est pas possible d'écrire de façon analytique l'énergie d'un mélange miscible binaire de gaz parfaits. On présente donc le profil des courbes isothermes obtenues par l'algorithme de transformée de Legendre rapide. On vérifie également que, dans ce cas, la fraction de masse de la phase (1) n'est pas constante. Cette fraction de masse est très facile à calculer à partir de la transformée de Legendre de l'énergie volumique. Dans le cas de gaz parfait, il est possible d'exprimer l'énergie du mélange explicitement. Ce n'est plus le cas pour un mélange de gaz raides (pour plus de détails, le lecteur pourra consulter le chapitre 6 de [Fac08]). L'algorithme de TLR nous permet de décrire numériquement la zone de saturation d'un mélange immiscible de deux gaz parfaits. De même on construit les isothermes dans le cas miscible.

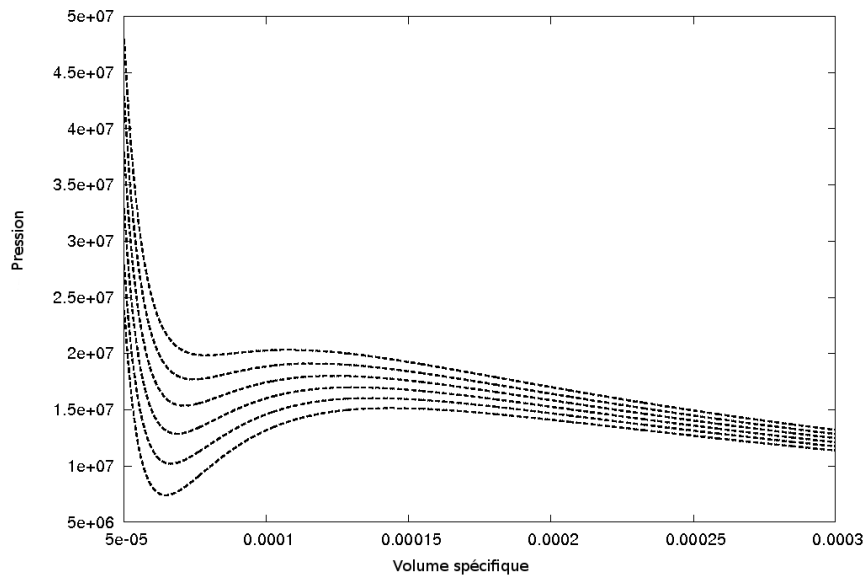


FIG. 7.2.5 – Courbes isothermes du modèle de van der Waals sous le point critique. Ces isothermes sont obtenues par l'algorithme de transformée de Legendre rapide 6.3.1 appliqué à l'énergie tabulée $\Pi(e)$ sur une grille de 1000×1000 points. Le domaine de calcul est $(s, \tau) \in [5.7 \times 10^3, 5.77 \times 10^3] \times [5. \times 10^{-5}, 3. \times 10^{-4}]$. Sans le procédé de convexification, la pression augmente avec le volume spécifique dans la zone spinodale.

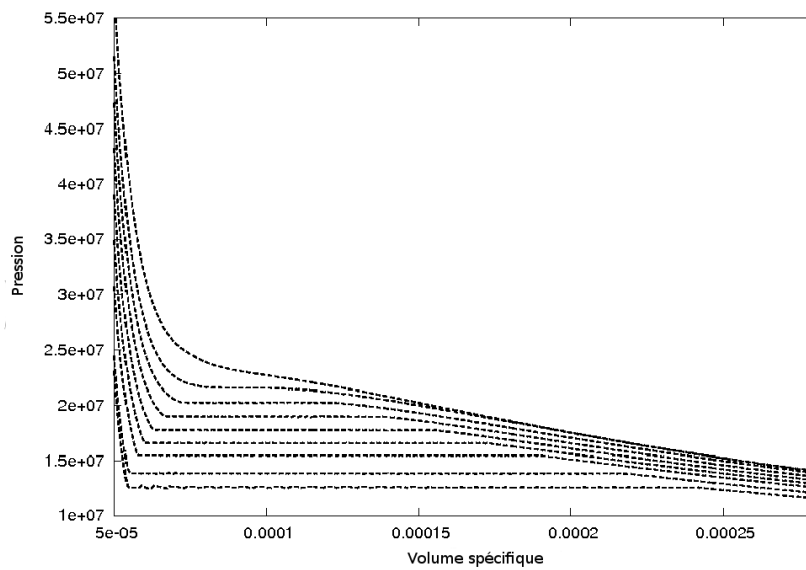


FIG. 7.2.6 – Courbes isothermes du modèle de van der Waals après convexification. Ces isothermes sont obtenues par l'algorithme de transformée de Legendre rapide 6.3.1 appliqué à l'énergie tabulée $co(e)$ sur une grille de 1000×1000 points. Le domaine de calcul est $(s, \tau) \in [5.7 \times 10^3, 5.77 \times 10^3] \times [5. \times 10^{-5}, 3. \times 10^{-4}]$. Grâce à la construction de l'enveloppe convexe $co(e)$, la pression retrouve un comportement physiquement admissible dans la zone de saturation.

7.3.1 Loi d'état des gaz parfaits et raides

Suivant la loi de Boyle, le modèle des gaz parfaits suppose que le produit de la pression et du volume est constant à température fixée :

$$pV = RT,$$

où R désigne la constante spécifique des gaz parfaits (qui correspond au ratio de la constante universelle des gaz parfaits et de la masse). Cette loi n'est valide que pour les faibles densités, donc les gaz, puisqu'elle suppose que les atomes n'interagissent pas. La loi des gaz raides est un modèle plus adapté aux liquides : elle intègre les effets d'attraction et de répulsion. La loi d'état complète est donnée par :

$$e(\tau, s) = \tau^{1-\gamma} \exp\left(\frac{s-s_0}{c_V}\right) - Q + \pi\tau. \quad (7.23)$$

Les constantes γ , s_0 , c_V , Q et π décrivent la thermodynamique du fluide : la quantité Q est la chaleur latente, $\gamma > 1$ est le coefficient polytropique, s_0 est l'entropie de référence, $c_V > 0$ est la chaleur spécifique à volume constant. Le produit $\gamma\pi \geq 0$ traduit les effets d'attraction moléculaire. D'ailleurs en posant $\pi = 0$ et $Q = 0$ on retrouve l'énergie d'un gaz parfait.

Remarque 7.3.1. Les hypothèses sur les paramètres assurent la positivité de la température, de la pression et de la vitesse du son (mais pas de l'entropie) ainsi que la convexité de l'énergie (les preuves rigoureuses figurent dans [Fac08]).

D'après la formule fondamentale (5.4) on déduit :

$$T(\tau, s) = \frac{\partial e}{\partial s|_{\tau}}(\tau, s) = \frac{1}{c_V} \tau^{1-\gamma} \exp\left(\frac{s-s_0}{c_V}\right), \quad (7.24)$$

$$p(\tau, s) = -\frac{\partial e}{\partial \tau|_s}(\tau, s) = (\gamma-1)\tau^{-\gamma} \exp\left(\frac{s-s_0}{c_V}\right) - \pi, \quad (7.25)$$

soit encore

$$p = (\gamma-1)c_V \frac{T}{\tau} - \pi. \quad (7.26)$$

D'après la relation de Gibbs (5.9), le potentiel chimique d'un gaz raide est :

$$\mu(p, T) = c_V T \left(\gamma - \ln \left((c_V T)^\gamma \left(\frac{\gamma-1}{p+\pi} \right)^{\gamma-1} \right) \right) - T s_0 - Q. \quad (7.27)$$

On observe donc qu'à volume fixé, la pression p est une fonction linéaire de la température T . A température fixée, les courbes isothermes sont des branches d'hyperbole. Aussi le modèle est-il satisfaisant dans les phases pures.

7.3.2 Mélange immiscible de deux gaz parfaits

Description analytique du changement de phase

Dans ce paragraphe on considère un mélange immiscible à l'équilibre. Les phases liquide et vapeur (notées 1 et 2 respectivement) sont décrites par des lois

de gaz parfaits :

$$e_1(s_1, \tau_1) = \exp\left(\frac{s_1}{c_{V,1}}\right) \tau_1^{1-\gamma_1}, \quad (7.28)$$

$$e_2(s_2, \tau_2) = \exp\left(\frac{s_2}{c_{V,2}}\right) \tau_2^{1-\gamma_2}, \quad (7.29)$$

avec $\gamma_1 > \gamma_2$ (les entropies de référence sont supposées nulles). Pour établir l'énergie du mélange, on traduit les égalités de températures, pressions et potentiels chimiques des phases.

L'égalité des températures $T_1 = T_2 = T$ implique :

$$\begin{aligned} e_1 &= c_{V,1}T, \\ e_2 &= c_{V,2}T. \end{aligned}$$

En imposant l'égalité des pressions $p_1 = p_2 = p$, il vient :

$$\tau_2 = \frac{c_{V,2}(\gamma_2 - 1)}{c_{V,1}(\gamma_1 - 1)} \tau_1. \quad (7.30)$$

Enfin l'égalité des potentiels chimiques s'écrit :

$$\begin{aligned} c_{V,1}T \left(\gamma_1 - \ln \left((c_{V,1}T)^{\gamma_1} \left(\frac{\gamma_1 - 1}{p} \right)^{\gamma_1 - 1} \right) \right) = \\ c_{V,2}T \left(\gamma_2 - \ln \left((c_{V,2}T)^{\gamma_2} \left(\frac{\gamma_1 - 1}{p} \right)^{\gamma_2 - 1} \right) \right). \end{aligned}$$

Après calculs, on en déduit l'expression du volume spécifique τ_1 en fonction de la température :

$$\tau_1 = \left(\frac{c_{V,2}^{\gamma_2}}{c_{V,1}^{\gamma_1}} T^{c_{V,2} - c_{V,1}} \frac{(\gamma_2 - 1)^{(\gamma_2 - 1)c_{V,2}}}{(\gamma_1 - 1)^{(\gamma_1 - 1)c_{V,1}}} \exp(\gamma_1 c_{V,1} - \gamma_2 c_{V,2}) \right)^{\kappa}, \quad (7.31)$$

où $\kappa = \frac{1}{c_{V,2}(\gamma_2 - 1) - c_{V,1}(\gamma_1 - 1)}$.

En traduisant τ_1 en termes de pression et température, on en déduit l'équation de la courbe de coexistence :

$$p = \left(\exp(c_{V,2}\gamma_2 - c_{V,1}\gamma_1) \frac{(c_{V,1}\gamma_1(\gamma_1 - 1)^{\gamma_1 - 1})^{c_{V,1}}}{(c_{V,2}\gamma_2(\gamma_1 - 1)^{\gamma_2 - 1})^{c_{V,2}}} \right)^{\kappa} \times T^{\kappa(\gamma_1 c_{V,1} - \gamma_2 c_{V,2})}. \quad (7.32)$$

Mélange binaire immiscible avec $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$

Si l'on suppose $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, l'équation de la courbe de coexistence dans le plan (T, p) se simplifie :

$$p = \exp(-1) \left(\frac{(\gamma_1 - 1)^{\gamma_1 - 1}}{(\gamma_2 - 1)^{\gamma_2 - 1}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1 - \gamma_2}} T. \quad (7.33)$$

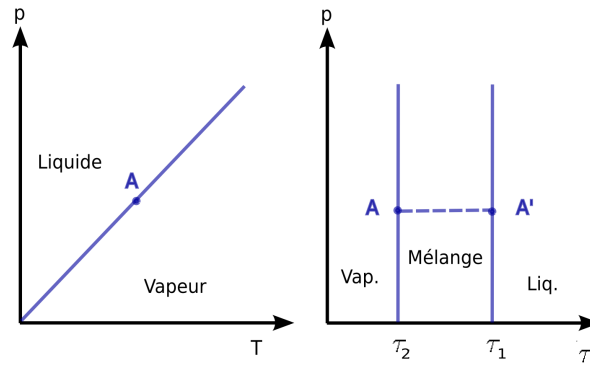


FIG. 7.3.1 – Courbe de coexistence et zone de saturation d'un mélange immiscible de deux gaz parfaits. Un point A de la courbe de coexistence correspond au segment AB dans le plan (T, p) . Les courbes isobares et isothermes coïncident dans la zone de mélange.

Dans le plan (T, p) , la courbe de coexistence est donc une droite.

D'après (7.26), la pression vérifie la relation :

$$p = \frac{(\gamma_i - 1)T}{\tau} = \kappa T, \quad (7.34)$$

$$\text{avec } \kappa = \exp(-1) \left(\frac{(\gamma_1 - 1)^{\gamma_1 - 1}}{(\gamma_2 - 1)^{\gamma_2 - 1}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1 - \gamma_2}}.$$

En combinant les différentes relations, on en déduit que la pression du mélange est :

$$p(\tau, T) = \begin{cases} (\gamma_2 - 1) \frac{T}{\tau}, & \text{si } \tau \leq \tau_2, \\ \kappa T, & \text{si } \tau_2 \leq \tau \leq \tau_1, \\ (\gamma_1 - 1) \frac{T}{\tau}, & \text{si } \tau \geq \tau_1. \end{cases} \quad (7.35)$$

À température constante, on constate que la pression est constante dans la zone $[\tau_2, \tau_1]$. De part et d'autre de la zone de mélange, la pression est celle du gaz parfait décrivant la phase (1) ou (2). Le schéma 7.3.1 illustre la zone de coexistence et la zone de saturation d'un mélange immiscible de deux gaz parfaits. Soit A un point de la courbe de coexistence dans le plan (T, p) . Il correspond au segment horizontal $[AA']$ dans le plan (τ, p) (voir figure 7.3.1). Contrairement au modèle de van der Waals, la transition de phase liquide-vapeur ne présente pas de comportement critique.

Les mêmes résultats peuvent être obtenus numériquement.

Zone de saturation On introduit la fonction suivante

$$H(e, (\min(e_1, e_2))^{**}) = \begin{cases} 1, & \text{si } e(\tau, s) > (\min(e_1, e_2))^{**}(\tau, s), \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.36)$$

La zone de saturation correspond aux valeurs positives de $H(e, (\min(e_1, e_2))^{**})$. Il faut donc construire l'enveloppe convexe de $\min(e_1, e_2)^{**}$ en utilisant l'algorithme de transformée de Legendre rapide. En pratique, la procédure est la suivante :

Liquide	Vapeur
$\gamma_1 = 1.6$	$\gamma_2 = 1.5$
$c_{V,1} = 1 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$c_{V,2} = 1 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$s_{0,1} = 0 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$s_{0,2} = 0 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$Q_1 = 0 \text{ J.Kg}^{-1}$	$Q_2 = 0 \text{ J.Kg}^{-1}$
$\pi_1 = 0 \text{ Pa}$	$\pi_2 = 0 \text{ Pa}$

TAB. 7.2 – Paramètres des gaz parfaits pour le mélange immiscible.

- construire les énergies tabulées $\Pi(e_1)$ et $\Pi(e_2)$,
- en déduire la table $\min(\Pi(e_1), \Pi(e_2))$,
- appliquer deux fois l'algorithme 6.3.1 à la surface tabulée $\min(\Pi(e_1), \Pi(e_2))$.

De cette manière, on obtient une approximation de l'enveloppe convexe du minimum de e_1 et e_2 .

La figure 7.3.2 présente la zone de saturation pour un mélange immiscible de gaz parfaits dont les paramètres sont donnés en table 7.3.2. Le calcul est effectué sur le domaine discret $(\tau, s) \in [0.8, 1.2] \times [0.8, 1.2]$ contenant 1000×1000 points de discrétisation. On observe que le dôme de saturation ne présente pas de point critique. Les bords de la zone de saturation sont bien verticaux en accord avec la définition de τ_1 et τ_2 .

Courbes isothermes Pour tracer les isothermes, on peut

- soit construire la fonction d'énergie libre de Helmholtz, comme pour le modèle de van der Waals,
- soit se placer dans le domaine de Legendre et calculer la pression du mélange $p(\mu, T)$ en se basant sur la proposition 7.12.

Dans le cas des gaz parfaits, la pression p s'exprime comme une fonction de μ et T :

$$p(\mu, T) = (\gamma - 1) \left(T^{-\gamma} \exp\left(\frac{\gamma - \mu}{T}\right) \right)^{\frac{1}{1 - \gamma}}.$$

On connaît donc explicitement la conjuguée de l'énergie volumique ε . D'autre part, la pression du mélange vérifie :

$$p(\mu, T) = \max(p_1, p_2)(\mu, T).$$

Puisque $\frac{\partial p}{\partial \mu} = \rho = 1/\tau$, il suffit de calculer les pentes de la pression du mélange dans la direction μ par différences finies, pour tracer la pression p en fonction du volume massique τ . Le calcul est réalisé sur le domaine $(\mu, T) \in [-2, 3] \times [5, 6]$. La discrétisation est de 1000 points dans les deux directions.

La figure 7.3.3 présente les courbes isothermes au voisinage de la zone de saturation. Puisque la transition de phase intervient à pression et température constantes, les isothermes sont horizontales dans la zone de mélange du plan (τ, p) . Les courbes présentent une discontinuité de pente au travers de la courbe de saturation comme l'illustre la figure 7.3.3.

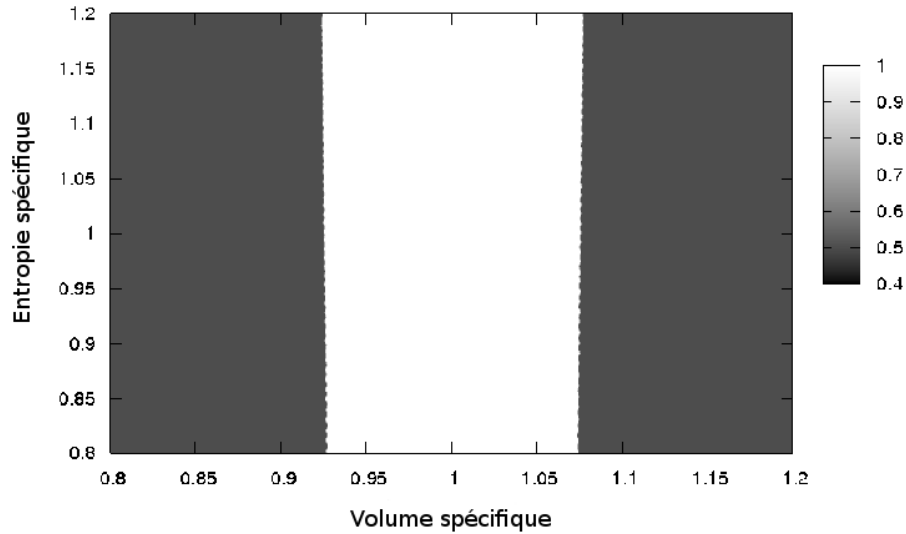


FIG. 7.3.2 – Bande de saturation d'un mélange immiscible de gaz parfaits. La zone de mélange est donnée par la formule (7.36). Les valeurs positives de $H(e, (\max(p_1, p_2))^*)$ définissent la zone de saturation.

Mélange binaire immiscible avec $c_{V,1} \neq c_{V,2} \neq 1$

On suppose maintenant que les chaleurs spécifiques de chaque phase sont différentes de 1. Pour que les deux lois de gaz parfaits puissent décrire les deux phases du mélange, il faut tenir compte de conditions sur les paramètres des lois d'état. On reprend ici les conclusions de Faccanoni [Fac08] à ce sujet ([Fac08], chapitre 5, p.129). À saturation, il faut que $\tau_{liq} < \tau_{vap}$ et $e_{liq} < e_{vap}$, ce qui se traduit par :

$$\begin{aligned} (\gamma_1 - 1)c_{V,1} &< (\gamma_2 - 1)c_{V,2}, \\ c_{V,1} &< c_{V,2}. \end{aligned}$$

D'autre part, la vitesse du son dans le "liquide" doit être supérieure à la vitesse du son dans sa vapeur :

$$\gamma_1(\gamma_1 - 1)c_{V,1} > \gamma_2(\gamma_2 - 1)c_{V,2}.$$

Sous ces conditions, on a :

$$\frac{\gamma_1 c_{V,1} - \gamma_2 c_{V,2}}{(\gamma_1 - 1)c_{V,1} - (\gamma_2 - 1)c_{V,2}} > 0.$$

Alors la courbe de coexistence, dont l'équation es donnée en (7.32), n'est plus une droite dans la plan (T, p) . De la même manière, la bande de saturation n'est plus verticale mais courbée. En effet, les valeurs τ_1 et τ_2 , définies par les relations (7.31) et (7.30), ne sont plus constantes et dépendent de la température T , car

$$c_{V,2} - c_{V,1} > 0.$$

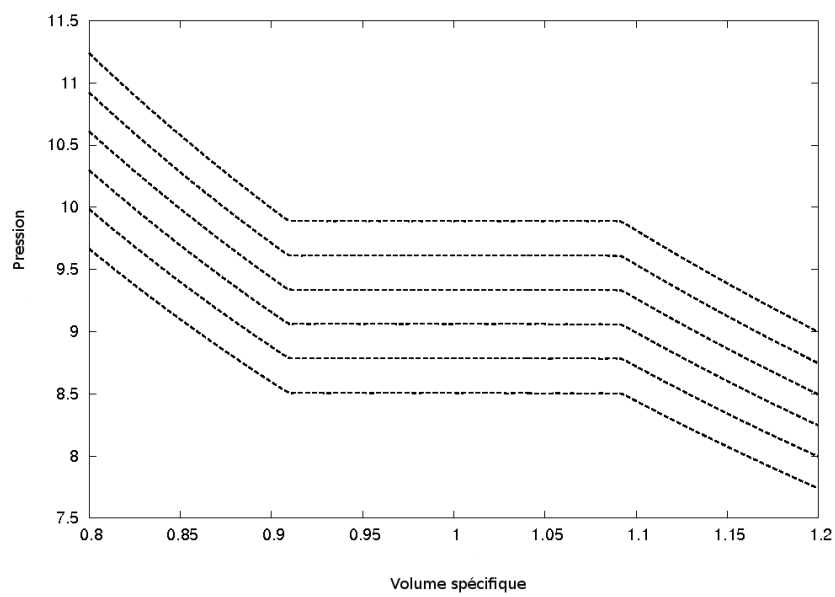


FIG. 7.3.3 – Courbes isothermes pour un mélange immiscible de gaz parfaits. La transition de phase s'effectue à pression et température constante. Les courbes isothermes présentent un saut de pente aux frontières de la zone de saturation. De part et d'autre de la zone de mélange les courbes isothermes sont hyperboliques. Elles correspondent aux phases pures décrites par les énergies de gaz parfaits e_1 et e_2 .

Liquide	Vapeur
$\gamma_1 = 1.9$ $c_{V,1} = 1040 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ $s_{0,1} = 0 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ $Q_1 = 0 \text{ J.Kg}^{-1}$ $\pi_1 = 0 \text{ Pa}$	$\gamma_2 = 1.6$ $c_{V,2} = 1816.2 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ $s_{0,2} = 0 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ $Q_2 = 0 \text{ J.Kg}^{-1}$ $\pi_2 = 0 \text{ Pa}$

TAB. 7.3 – Paramètres des gaz parfaits pour le mélange immiscible tel que $c_{V,1} \neq c_{V,2} \neq 1$.

À titre illustratif, on considère l'exemple proposé par Faccanoni dans sa thèse [Fac08]. Les paramètres des lois d'état figurent dans la table 7.3.2. De la même manière que précédemment, on construit les courbes isothermes au voisinage de la zone de saturation. Le domaine de calcul est $(\mu, T) \in [-1, 2] \times [2 \times 10^{-4}, 2 \times 10^{-3}]$. La grille de calcul contient 1000×1000 points de discrétisation. Puisque la pression vérifie :

$$\frac{\partial p}{\partial \mu} = \rho,$$

il suffit de calculer les pentes de la pression tabulée dans la direction μ par différences finies pour en déduire les courbes isothermes. La figure 7.3.4 présente les courbes isothermes de ce mélange. On observe que la zone de saturation est courbe. Les volumes spécifiques τ_1 et τ_2 sont fonction de la température et de la pression. Les isothermes admettent une discontinuité de pente à la traversée de la bande de saturation. Le modèle ne présente pas de point critique. En se plaçant dans la zone de mélange, on peut construire la courbe de coexistence dans le plan (T, p) . La figure 7.3.5 présente la courbe de coexistence du mélange de gaz parfaits lorsque $c_{V,1} \neq c_{V,2}$. L'évolution de la pression en fonction de la température est en accord avec l'équation de la courbe de coexistence (7.32).

7.3.3 Mélange miscible de deux gaz parfaits

On considère maintenant un mélange miscible de deux gaz parfaits, numérotés (1) et (2). D'après la proposition 7.1.6, le mélange à l'équilibre est décrit par sa pression $p(\mu, T)$, telle que :

$$p(\mu, T) = (p_1 + p_2)(\mu, T).$$

Dans un mélange miscible avec réaction chimique, quand la température change, la fraction de masse n'est pas constante car il y a un transfert de masse entre les deux constituants. De manière à tester numériquement notre construction, on considère un mélange miscible de deux gaz parfaits. On souhaite caractériser les courbes isothermes et l'évolution de la fraction de masse en fonction de la température et de la pression. D'un point de vue numérique, la pression tabulée du mélange est obtenue en sommant les pressions tabulées de chaque constituant. On rappelle que :

$$\frac{\partial p}{\partial \mu} = \rho = 1/\tau.$$

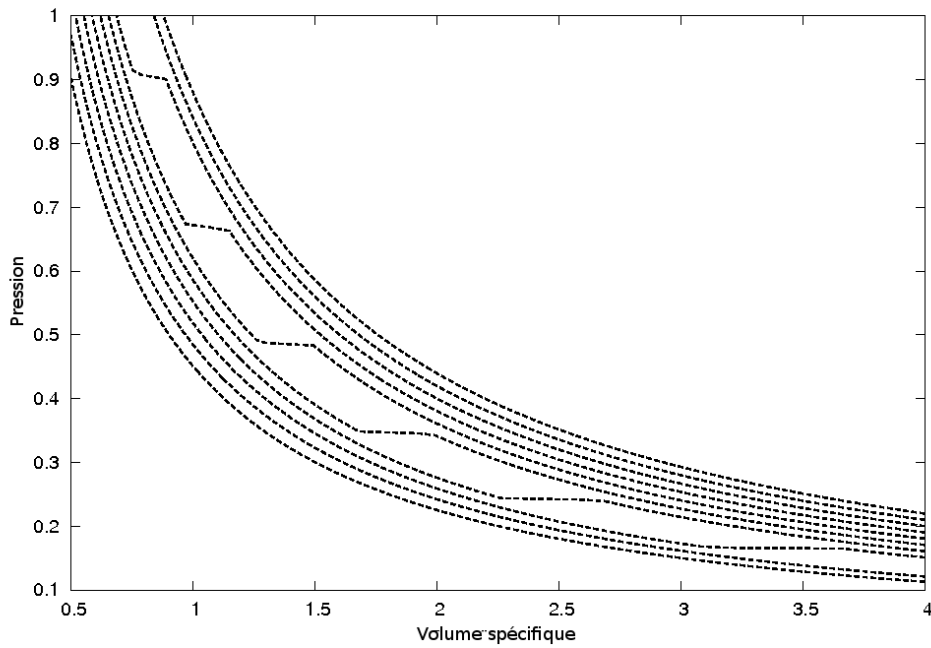


FIG. 7.3.4 – Courbes isothermes du mélange immiscible de deux gaz parfaits avec $c_{V,1} \neq c_{V,2}$. Les courbes présentent une discontinuité de pentes à la traversée de la zone de saturation. Bien que la zone de mélange soit courbe, elle ne présente pas de point critique.

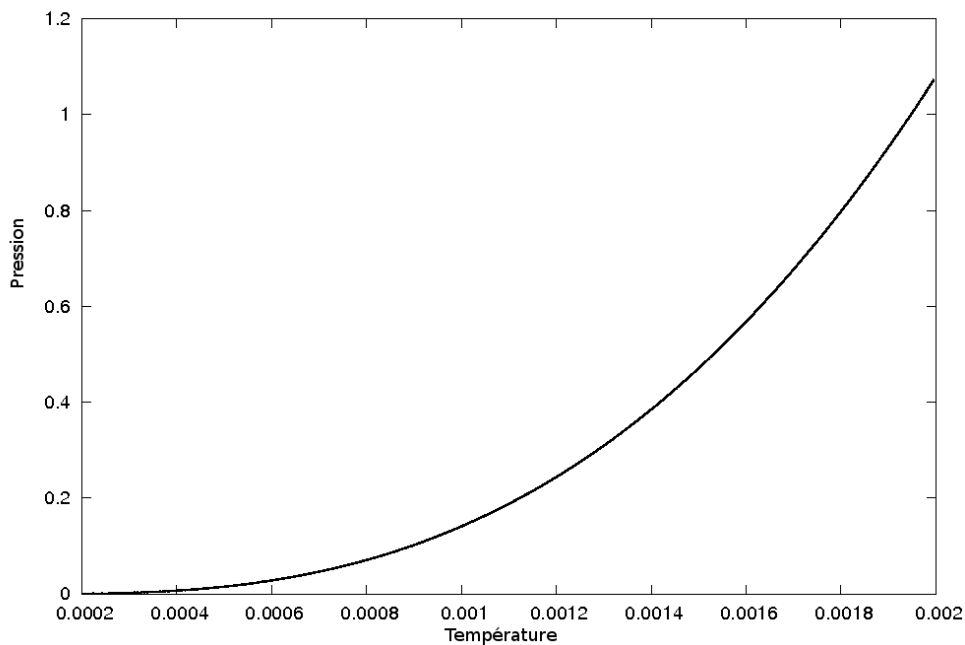


FIG. 7.3.5 – Courbe de coexistence du mélange immiscible de deux gaz parfaits avec $c_{V,1} \neq c_{V,2}$. En se plaçant dans la zone de mélange, on trace la pression en fonction de la température.

Pour construire les courbes isothermes, on calcule les pentes de la pression dans la direction μ par différences finies, puis on trace la pression p en fonction de τ .

La figure 7.3.6 présente les courbes isothermes dans le plan (τ, p) avec $\mu \in [-10, -5]$ et $T \in [2, 20]$. Les exposants polytropiques sont $\gamma_1 = 1.4$ et $\gamma_2 = 1.8$. Les courbes isothermes sont convexes et sont très similaires à celles d'un gaz parfait. Cependant la loi de mélange n'est pas un celle d'un gaz parfait puisque la fraction de masse du gaz (1) varie en fonction de la pression et de la température. On propose un calcul simple de la fraction de masse utilisant notre algorithme de transformée de Legendre. La fraction de masse est définie par

$$\varphi = \frac{M_1}{M} = \frac{M_1 V}{V_1 M} = \frac{\rho_1}{\rho}, \quad (7.37)$$

puisque $V_1 = V$ dans ce cas. D'autre part, la masse volumique du mélange vérifie la contrainte :

$$M = M_1 + M_2,$$

soit en divisant par $V \neq 0$:

$$\rho = \rho_1 + \rho_2.$$

Ainsi, la fraction de masse satisfait

$$\begin{aligned} 0 \leq \varphi = \frac{\rho_1}{\rho} &= \frac{\rho_1}{\rho_1 + \rho_2} \\ &= \frac{\frac{\partial p_1}{\partial \mu_1}}{\frac{\partial p_1}{\partial \mu_1} + \frac{\partial p_2}{\partial \mu_2}} \leq 1. \end{aligned}$$

Le ratio (7.37) est facilement calculé sur la grille (μ, T) par différences finies sur les pressions tabulées p_1 et p dans la direction μ . Le profil de fraction de masse est donné en figure 7.3.7. La quantité φ augmente avec la pression. Numériquement on vérifie également que $0 \leq \varphi \leq 1$. On voit aussi que si $\gamma_1 = \gamma_2$ alors la fraction φ est constante égale à $1/2$.

7.3.4 Mélanges de deux gaz raides

Les constructions précédentes sont étendues au cas des gaz raides. Rappelons que cette équation d'état modélise de façon simple et satisfaisante les effets d'attraction et de répulsion entre les atomes des gaz et des liquides. On s'intéresse donc naturellement au mélange de deux gaz raides. On choisit de décrire les deux phases par leurs énergies volumiques ε_i , $i = 1, 2$. De cette façon, en s'appuyant sur la proposition 7.1.1 page 164, cela revient à appliquer les opérations \max et $+$ aux pressions $p_i(\mu, T)$, $i = 1, 2$, dans l'espace de Legendre.

Mélange immiscible de deux gaz raides

Le mélange immiscible de deux gaz raides a été étudié par Faccanoni au chapitre 6 de sa thèse [Fac08]. L'équation de la courbe de coexistence $T \rightarrow P(T)$ se

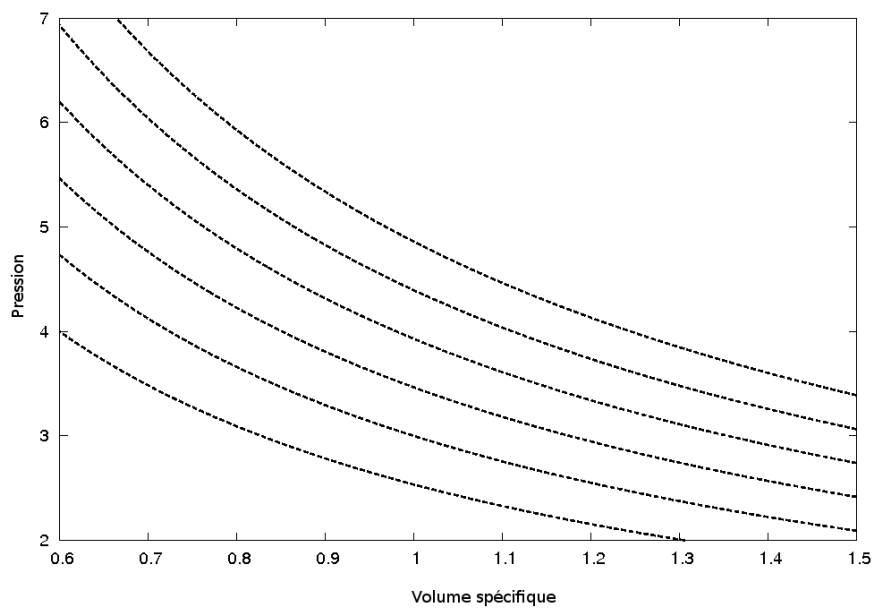


FIG. 7.3.6 – Mélange miscible de deux gaz parfaits : courbes isothermes. Les isothermes sont des branches d'hyperbole. Le mélange n'est cependant pas un gaz parfait.

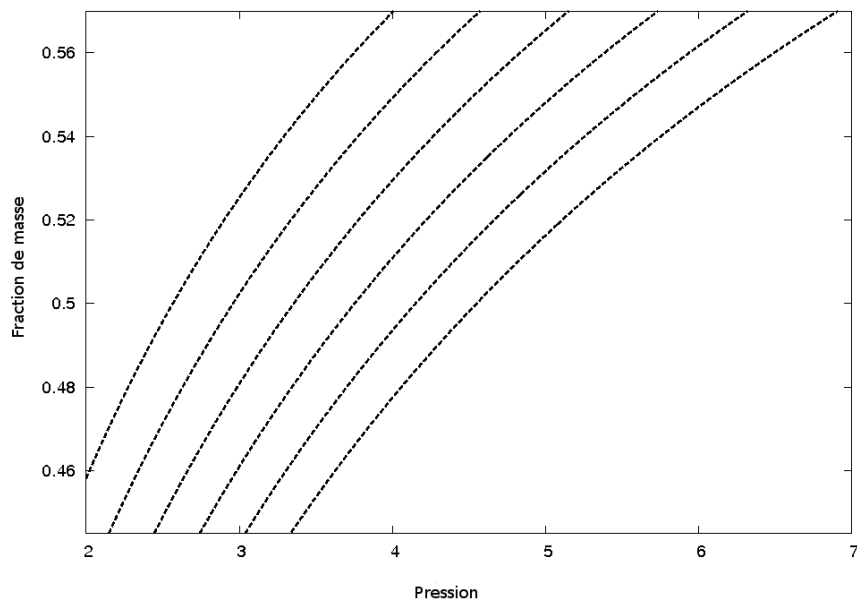


FIG. 7.3.7 – Mélange miscible de deux gaz parfaits : évolution de la fraction de masse du gaz (1) en fonction de la pression, à température fixée. La fraction de masse n'étant pas constante, il y a bien transfert de masse entre les deux phases. Le mélange n'est donc pas décrit par une loi de gaz parfait.

Liquide	Vapeur
$\gamma_1 = 3.3$	$\gamma_2 = 2.33$
$c_{V,1} = 0.11 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$c_{V,2} = 1 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$s_{0,1} = 1. \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$s_{0,2} = 0 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$Q_1 = 3. \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$Q_2 = 0 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$\pi_1 = 4. \text{ Pa}$	$\pi_2 = 0 \text{ Pa}$

TAB. 7.4 – Paramètres des gaz raides pour les mélanges immiscible et miscible.

déduit de l'égalité des potentiels de Gibbs des deux phases :

$$\begin{aligned}
c_{V,1}T \left(\gamma_1 - \ln \left((c_{V,1}T)^{\gamma_1} \left(\frac{\gamma_1 - 1}{p + \pi_1} \right)^{\gamma_1 - 1} \right) \right) - Ts_{0,1} - Q_1 = \\
c_{V,2}T \left(\gamma_2 - \ln \left((c_{V,2}T)^{\gamma_2} \left(\frac{\gamma_2 - 1}{p + \pi_2} \right)^{\gamma_2 - 1} \right) \right) - Ts_{0,2} - Q_2. \quad (7.38)
\end{aligned}$$

Si $Q_i \neq 0$, $i = 1, 2$, il n'est plus possible d'obtenir une expression explicite de la courbe de coexistence. L'auteur propose d'approximer la relation $T \rightarrow P(T)$ par une série de Laurent. Pour plus de détails, on renvoie le lecteur au papier de Faccanoni *et al.* [FKA10]. L'avantage de notre approche est qu'elle ne nécessite pas de connaître l'équation explicite de la loi de mélange. Seules les lois tabulées des deux phases sont nécessaires pour en déduire la loi de pression tabulée du mélange.

À titre illustratif, on considère un mélange de deux fluides virtuels, l'un décrit par une loi de gaz parfait, l'autre par une loi de gaz raide. Les paramètres de chaque loi figurent en table 7.3.4.

De la même manière que dans le cas des gaz parfaits, on construit la loi de pression du mélange immiscible selon la proposition 7.1.1 :

$$p(\mu, T) = \max(p_1, p_2)(\mu, T).$$

Le domaine de calcul est $(\mu, T) \in [-15, 0] \times [2, 25]$. La grille contient 1000 points de discrétisation dans les deux directions. Les courbes isothermes sont présentées en figure 7.3.8. On constate que la zone de saturation est courbe. Elle ne se termine cependant pas par un point critique comme le laisse supposer la figure.

Mélange miscible de deux gaz raides

Par souci d'exhaustivité, on traite également le mélange miscible, qui revient à établir la loi de Dalton, selon la proposition 7.1.6. Le domaine de calcul et la discrétisation sont identiques à ceux choisis dans le cas du mélange immiscible de deux gaz raides. Les courbes isothermes sont présentées en figure 7.3.9. On constate qu'elles sont similaires à celles d'un mélange miscible de gaz parfaits et ne présentent pas de comportement critique.

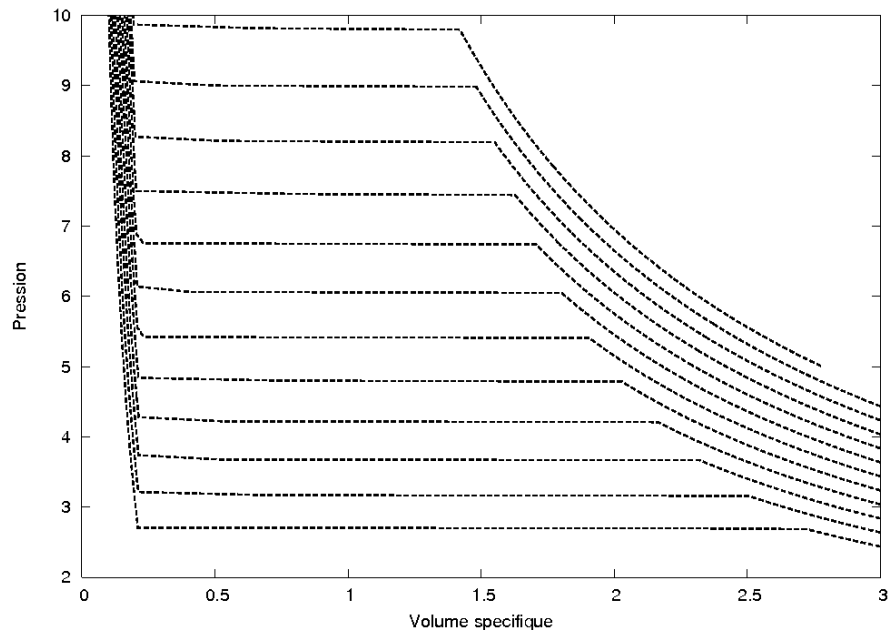


FIG. 7.3.8 – Mélange immiscible d'un gaz parfait et d'un gaz raide : courbes isothermes. Les paramètres sont donnés en table 7.3.4. Contrairement à ce que laisse penser le graphique, la zone de saturation ne se termine pas par un point critique.

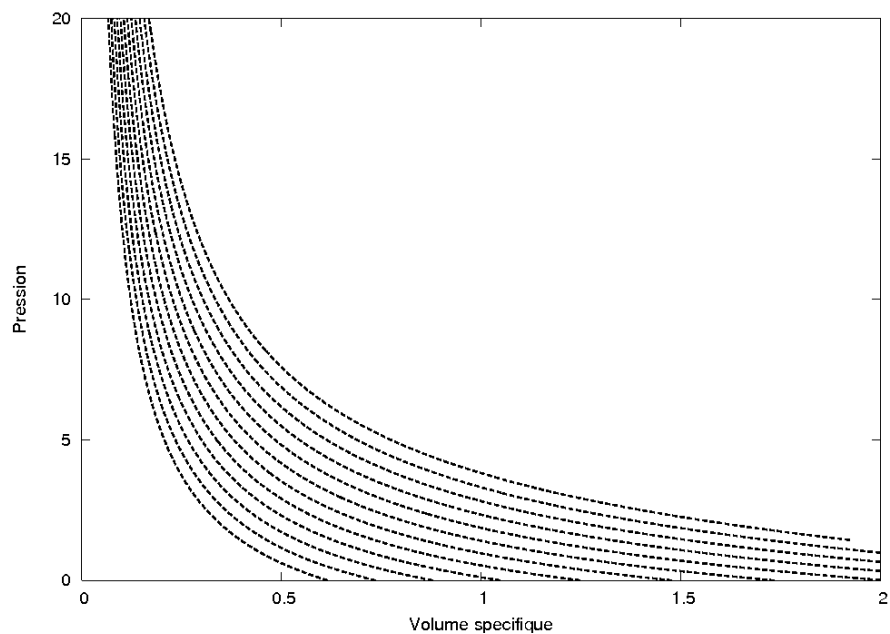


FIG. 7.3.9 – Mélange miscible d'un gaz parfait et d'un gaz raide : courbes isothermes. Les paramètres sont donnés en table 7.3.4. Comme dans le cas des gaz parfaits, le mélange ne présente pas de comportement critique.

7.4 Conclusion

Au chapitre 5, on a vu que les opérations d'inf-convolution \square et de convexification \uplus jouent un rôle fondamental dans la caractérisation des mélanges immiscibles et miscibles binaires. En s'appuyant sur les propriétés d'analyse convexe énoncées au chapitre 6, on a montré que la transformée de Legendre transforme ces deux opérations en $+$ et \max respectivement. Il s'ensuit que l'algèbre $(\max, +)$ est une structure naturelle pour construire les lois d'état de mélanges binaires. Ce chapitre illustre l'application de cette structure algébrique dans le contexte thermodynamique.

Puisqu'il est nécessaire de se placer dans le domaine de Legendre pour utiliser les opérations \max et $+$, on exprime dans un premier temps les conjuguées des énergies et entropies volumiques et massiques. La transformée de Legendre de l'énergie volumique s'avère être la pression du fluide, exprimée comme une fonction de la température et du potentiel chimique. En se plaçant dans le domaine de Legendre, la pression de mélange se traduit par :

- le maximum des pressions de chaque constituant, si le mélange est immiscible :

$$p(\mu, T) = \max(p_1, p_2)(\mu, T).$$

Dans ce cas la courbe de coexistence est définie par :

$$p(\mu, T) = p_1(\mu, T) = p_2(\mu, T).$$

- la somme des pressions de chaque phase, si le mélange est miscible :

$$p(\mu, T) = (p_1 + p_2)(\mu, T).$$

Il s'agit de la loi de Dalton.

La transformée de Legendre nous permet également de définir des changements de variables utiles. En particulier, on a présenté diverses méthodes pour construire les courbes isothermes dans le plan (τ, p) :

- dans le domaine « réel », si le mélange est décrit par son énergie massique $e(\tau, s)$, on construit la fonction d'énergie libre de Helmholtz. Il s'agit de la transformée de Legendre partielle de e par rapport à s :

$$F(\tau, T) = Ts - e(\tau, s).$$

Puisque la pression est définie comme la dérivée de F par rapport à τ , il suffit de calculer les pentes de l'énergie libre de Helmholtz tabulée selon τ par différences finies pour exprimer la pression tabulée. Enfin, en fixant la température, on trace l'évolution de la pression selon τ .

- dans le domaine de Legendre, supposons le mélange décrit par sa pression $p(\mu, T)$. Le tracé des isothermes repose sur l'expression du volume spécifique $\tau = 1/\rho$. Or la dérivée de la pression par rapport à μ est la masse volumique ρ . On obtient donc facilement les courbes isothermes sans même faire appel à notre algorithme de transformée de Legendre rapide.

On a proposé plusieurs applications numériques de notre algorithme à la construction de lois d'état admissibles. Le premier exemple consiste à construire la loi des aires égales pour l'équation d'état de van der Waals en utilisant notre

algorithme de TLR détaillé au chapitre 6. En s'appuyant sur les propriétés de la transformée de Legendre et l'énergie libre de Helmholtz, on a utilisé le fait que la construction de Maxwell est équivalente à la construction de l'enveloppe convexe de l'énergie de van der Waals. Les résultats numériques illustrent l'efficacité de la méthode : en appliquant deux transformées de Legendre rapides successivement, on construit l'enveloppe convexe de l'énergie, de sorte que les isothermes recouvrent un comportement physiquement admissible dans la zone spinodale.

La fin du chapitre est consacrée à la construction de lois d'état admissibles pour des mélanges diphasiques. Chaque phase est décrite par une loi de gaz parfait. En supposant le mélange immiscible, l'algorithme de TLR nous permet de retrouver les courbes isothermes et la zone de saturation précédemment décrites par Jaouen [Jao01], Faccanoni [Fac08], Helluy et Seguin [HS06] entre autres. Ce test de validation est ensuite enrichi en supposant que les chaleurs spécifiques à volume constant sont différentes de 1. Les résultats numériques sont corroborés par les calculs donnés initialement par Faccanoni [Fac08]. Bien que la zone de saturation soit courbée, elle ne présente pas de point critique. Un mélange immiscible de gaz raides donne des résultats similaires. L'algorithme est également appliqué à la modélisation d'un mélange miscible. Nous vérifions numériquement que la fraction de masse de gaz n'est pas constante et dépend de la pression et de la température.

De manière générale cette méthode de construction peut être appliquée à des lois d'état plus complexes : mélanges constitués d'un nombre arbitraire de phases, différentes miscibilités entre les phases, lois d'état non classiques (tabulées et/ou non convexes par exemple), *etc...*

Quelques difficultés demeurent :

- Le calcul de l'énergie du mélange s'effectue sur un domaine borné de \mathbb{R}^2 . Dans certains cas, l'enveloppe convexe, construite à partir de l'algorithme de TLR, peut s'appuyer sur les bords du domaine. En changeant la boîte de calcul, la loi d'état du mélange peut donc être fortement modifiée. Le choix du domaine de calcul doit donc être réalisé soigneusement.
- La pression du mélange ainsi construite est une loi tabulée. L'utilisation de lois tabulées dans des codes de CFD est assez délicate, en particulier si la table est grande, c'est-à-dire si l'intervalle de pression nécessaire est large. Il faudrait donc envisager d'interpoler la surface de pression tabulée pour faciliter les calculs. Le choix de l'interpolation a alors une grande importance. Il faut veiller à ce que l'interpolation ne dégrade pas la convexité de l'énergie du mélange. Dans le cas contraire, des défauts d'hyperbolicité pourraient venir perturber les calculs.

Pour pallier ces soucis, il est envisagé d'interpoler les surfaces d'énergies (ou de pression, d'entropie, selon les besoins numériques) de manière à préserver la convexité. Un moyen pourrait consister à étendre à l'ordre deux l'algorithme de TLR, selon un nouvel algorithme proposé par Lucet [LBT09]. Enfin un intérêt tout particulier est porté à la modélisation de comportements critiques. Il s'agit de mettre au point un modèle plus riche que celui de van der Waals, capable de modéliser des fluides au voisinage du point critique.

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

Nous avons étudié dans ce mémoire quelques aspects théoriques et numériques des écoulements compressibles de fluides complexes. Nous nous sommes particulièrement intéressés aux écoulements multiphasiques liquide-gaz, mais aussi au modèle de la magnétohydrodynamique. Nous avons mis l'accent sur deux aspects de ces modèles :

- le développement de diverses techniques numériques permettant de prendre en compte certaines caractéristiques de ces écoulements ;
- le développement d'une méthode générale de construction de lois d'état admissibles pour le changement de phase.

Dans le premier chapitre, nous considérons un modèle compressible pour simuler la dynamique d'une bulle de gaz immergée dans un liquide. Le modèle est constitué des équations d'Euler en coordonnées sphériques, auxquelles on adjoint une équation de transport permettant le suivi de l'interface liquide-gaz.

Nous nous sommes attachés à construire des schémas non dissipatifs, de sorte que l'interface soit parfaitement résolue. Un compromis entre méthode eulérienne (qui entraîne des oscillations de pression à l'interface) et lagrangienne (difficile à mettre en œuvre en géométrie axisymétrique) nous a conduit à considérer une méthode *Arbitrary Lagrangian Eulerian* couplée à une étape de projection. Le schéma que nous proposons est assez complexe : il faut tenir compte du terme de géométrie sphérique, de la déformation lagrangienne des mailles d'interface. Un ingrédient essentiel consiste aussi, à intervalles réguliers, à adapter le pas de temps tout en supprimant ou découpant des cellules de part et d'autre de l'interface. Ce schéma a l'avantage d'être complètement conservatif et de n'introduire aucune diffusion sur la fonction de couleur. Il est théoriquement généralisable aux dimensions supérieures, même si la mise en œuvre serait sans doute délicate. L'extension à l'ordre deux en temps semble problématique. Les résultats numériques dans le cas d'une bulle faiblement comprimée sont satisfaisants. Cependant on peut observer un mauvais comportement de la pression à l'interface liquide-gaz, qui peut être dû

au traitement du terme source.

Nous nous intéressons donc au traitement des termes source dans le second chapitre. Pour cela, nous avons introduit un second schéma du type équilibre, en considérant que le système était équivalent à un modèle d'écoulement en tuyère. Pour simplifier, nous nous plaçons dans le cadre d'un écoulement monophasique. De façon classique, une inconnue artificielle, la section, est ajoutée au système. Le système modifié n'a plus de terme source mais contient des produits non-conservatifs. Les invariants de Riemann associés à l'onde supplémentaire stationnaire permettent de définir naturellement des relations de saut. La construction du schéma équilibre repose sur le solveur de Riemann approché VFRoe-ncv. Nous avons choisi de linéariser le système en utilisant les invariants de Riemann de l'onde stationnaire. Ainsi le schéma proposé préserve parfaitement les états stationnaires.

Dans le but d'améliorer la précision et de passer aux dimensions supérieures, nous avons aussi développé un schéma Galerkin discontinu. Notre apport dans ce domaine a consisté à intégrer en temps le système par une technique d'Adams-Bashforth. Cette méthode a l'avantage de faciliter l'utilisation de pas de temps locaux. Le gain en terme de temps de calcul est significatif par rapport à une méthode de Runge-Kutta, dans la mesure où l'ordre de la méthode d'Adams ne dépasse pas 3. L'inconvénient de la méthode est qu'elle provoque l'apparition d'oscillations non physiques dans les chocs lorsque l'approximation en espace est d'ordre élevé. Le limiteur de pente proposé est efficace en 1D mais s'avère trop restrictif dans le cas bidimensionnel.

Si ce schéma est peu approprié à la simulation d'écoulements cavitants, il donne d'excellents résultats dans le cadre de la magnétohydrodynamique. Ce système hyperbolique est non strictement hyperbolique dans la mesure où certaines valeurs propres de la matrice jacobienne du flux peuvent coïncider dans le cas de conditions initiales coplanaires sur le champ magnétique. Nous avons étudié la non-unicité de la solution du problème de Riemann dans le cas d'un modèle simplifié.

D'un point de vue numérique, les perspectives sont encore nombreuses. Notre objectif reste la simulation de la dynamique d'une bulle de gaz immergée dans le liquide pour des dimensions plus grandes que un. Le cas tridimensionnel semble pour l'instant hors de portée mais nous travaillons à l'extension du schéma Lagrange-projection au cas bidimensionnel axisymétrique. Pour cela, il est préférable de simplifier l'étape de projection, quitte à perdre une partie des propriétés de conservation. Nous développons actuellement un schéma lagrangien couplé à une projection de type Glimm introduite par Chalons et Goatin [CG08]. Ce type de schéma assure la bonne résolution des contacts et est conservatif en moyenne. De plus la formulation volumes finis est bien adaptée à la programmation sur carte graphique, et nous permettrait d'optimiser les temps de calcul.

Une difficulté de la modélisation des écoulements diphasiques avec transition de phase réside dans la description thermodynamique du phénomène. En particulier se pose la question de la loi d'état à utiliser pour décrire la changement de phase (liquide-vapeur, dans notre cas). Dans la seconde partie du manuscrit, nous avons défini une structure mathématique rigoureuse pour l'élaboration de lois d'état de mélange. En distinguant les mélanges immiscibles des mélanges miscibles, nous

avons montré que l'énergie intensive du mélange est une inf-convolution ou l'enveloppe convexe du minimum des énergies intensives de chaque phase. Le lien entre ces deux opérations et la transformée de Legendre est étudié au chapitre 6. La transformée de Legendre permet de simplifier le calcul de l'énergie de mélange. Nous mettons en évidence que le cadre naturel pour étudier les lois de changement de phase est celui d'une algèbre $(\max, +)$ sur l'espace des fonctions convexes. Nous construisons ensuite un algorithme rapide pour le calcul numérique de la transformée de Legendre. L'application de cet algorithme dans le cadre thermodynamique nous permet de construire numériquement des lois de pression de mélange tabulées. Divers exemples illustrent la validité et la généralité de cette approche.

De nombreuses extensions et applications de notre méthode sont envisagées. Dans un premier temps, il s'agira de coupler ces lois d'état à des codes de CFD, pour éventuellement simuler la bulle oscillante en considérant qu'elle contient une phase de mélange pour prendre en compte des lois d'état complexes. Deux approches sont possibles :

- On génère une table de pression pour un intervalle de volume spécifique et d'énergie donnés. Afin de réduire la taille de la table il est indispensable d'introduire une technique d'interpolation, qui devra garantir les bonnes propriétés thermodynamiques (convexité, continue-dérivabilité). En particulier il faudra s'assurer que l'interpolation ne génère pas de défauts de convexité, qui pourrait conduire à des instabilités de la méthode. Une direction étudiée est la mise en œuvre d'un algorithme de transformée de Legendre rapide d'ordre deux introduit par Lucet [LBT09]. Un travail sur ce sujet est en cours avec S. Müller et M. Bachmann de l'université d'Aachen.
- Le calcul de la pression du mélange est intégré au code de CFD. À la manière de Barberon *et al.* [BH05], le problème d'optimisation est résolu à chaque pas de temps dans chaque maille. L'avantage de cette approche est de remplacer des accès à de vastes zones mémoire par des calculs locaux. Ces calculs, utilisant la transformée de Legendre, et les algorithmes correspondant restent cependant à développer.

Le modèle proposé suppose que la courbure de l'interface entre les deux phases, dans le cas immiscible, est négligeable. Il serait intéressant d'introduire les effets de tension de surface au modèle. Il serait aussi intéressant de réussir à décrire plus finement les fluides au voisinage du point critique dans le cadre du calcul $(\max, +)$. Un travail est en cours sur ces deux aspects.

Bibliographie

- [Abg96] R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi-conservative approach. *Journal of Computational Physics*, 125(1) :150–160, 1996.
- [ABG⁺09] C. Altmann, T. Belat, M. Gutnic, P. Helluy, H. Mathis, E. Sonnendrücker, W. Angulo, and J.-M. Hérard. A local time-stepping discontinuous Galerkin algorithm for the MHD system. *ESAIM, Proc.*, 28 :33–54, 2009.
- [AFK07] G. Allaire, G. Faccanoni, and S. Kokh. A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model. *C. R., Math., Acad. Sci. Paris*, 344(2) :135–140, 2007.
- [Alo04] F. Alouges. Matrice signe et systèmes hyperboliques, 2004.
- [AW04] N. Andrianov and G. Warnecke. On the solution to the Riemann problem for the compressible duct flow. *SIAM J. Appl. Math.*, 64(3) :878–901 (electronic), 2004.
- [Bar06] T. Barth. On the role of involutions in the discontinuous Galerkin discretization of Maxwell and magnetohydrodynamic systems. In *Compatible spatial discretizations*, volume 142 of *IMA Vol. Math. Appl.*, pages 69–88. Springer, New York, 2006.
- [BB80] J. Brackbill and D. Barnes. The effect of nonzero $\nabla \cdot \mathbf{B}$ on the numerical solution of the magnetohydrodynamic equations. *J. Comput. Phys.*, 35(3) :426–430, 1980.
- [Ber05] C. Berthon. Stability of the MUSCL schemes for the Euler equations. *Commun. Math. Sci.*, 3(2) :133–157, 2005.
- [BGH00] T. Buffard, T. Gallouët, and J.-M. Hérard. A sequel to a rough Godunov scheme : application to real gases. *Comput. & Fluids*, 29(7) :813–847, 2000.
- [BH05] T. Barberon and P. Helluy. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers and Fluids*, 34(7) :832–858, 2005.
- [BHR03] T. Barberon, P. Helluy, and S. Rouy. Practical computation of axisymmetrical multifluid flows. *International Journal of Finite Volumes*, 1(1) :1–34, 2003.
- [BLFH81] S. H. Brecht, J. Lyon, J. A. Fedder, and K. Hain. A simulation study of east-west imf effects on the magnetosphere. *Geophys. Res. Lett.*, 8(397), 1981.

- [Bou04] F. Bouchut. *Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws and well-balanced schemes for sources*. Frontiers in Mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel, 2004.
- [BR93] M. Brio and P. Rosenau. Stability of shock waves for 3×3 model MHD equations. In *Nonlinear hyperbolic problems : theoretical, applied, and computational aspects (Taormina, 1992)*, volume 43 of *Notes Numer. Fluid Mech.*, pages 77–85. Vieweg, Braunschweig, 1993.
- [Bre89] Y. Brenier. Un algorithme rapide pour le calcul de transformées de Legendre-Fenchel discrètes. *Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sciences. Série I. Mathématique*, 308(20) :587–589, 1989.
- [BS99] D. Balsara and D. Spicer. A staggered mesh algorithm using high order Godunov fluxes to ensure solenoidal magnetic fields in magneto-hydrodynamic simulations. *J. Comput. Phys.*, 149(2) :270–292, 1999.
- [BSB01] A. Burbeau, P. Sagaut, and Ch.-H. Bruneau. A problem-independent limiter for high-order Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods. *J. Comput. Phys.*, 169(1) :111–150, 2001.
- [Cal85] H. B. Callen. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, second edition*. Wiley and Sons, 1985.
- [CG08] C. Chalons and P. Goatin. Godunov scheme and sampling technique for computing phase transitions in traffic flow modeling. *Interfaces Free Bound.*, 10(2) :197–221, 2008.
- [CLS04] A. Chinnayya, A.-Y. LeRoux, and N. Seguin. A well-balanced scheme for the approximation of the shallow-water equations with topography : the resonance phenomenon. *International Journal of Finite Volumes*, 1(1) :1–27, 2004.
- [CM84] M. Crouzeix and A. L. Mignot. *Analyse numérique des équations différentielles*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master's Degree]. Masson, Paris, 1984.
- [Cro91] J.-P. Croisille. *Contribution à l'étude théorique et à l'approximation par éléments finis du système hyperbolique de la dynamique des gaz multidimensionnelle et multispèces*. PhD thesis, Université Paris VI, 1991.
- [CS91] B. Cockburn and C.-W. Shu. The Runge-Kutta local projection P^1 -discontinuous-Galerkin finite element method for scalar conservation laws. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 25(3) :337–361, 1991.
- [CS97] J.-P. Cocchi and R. Saurel. A Riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *Journal of Computational Physics*, 137(2) :265–298, 1997.
- [CS98] B. Cockburn and C.-W. Shu. The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws. V. Multidimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 141(2) :199–224, 1998.
- [CS01] B. Cockburn and C.-W. Shu. Runge-kutta discontinuous galerkin methods for convection-dominated problems. *Journal of Scientific Computing*, 16(3) :173–261, 2001.

- [DBTM08] M. Dumbser, D. Balsara, E. Toro, and C. Munz. A unified framework for the construction of one-step finite volume and discontinuous Galerkin schemes on unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 227(18) :8209–8253, 2008.
- [Del01] P. Dellar. A note on magnetic monopoles and the one-dimensional MHD Riemann problem. *J. Comput. Phys.*, 172(1) :392–398, 2001.
- [Des99] B. Despres. Entropy inequality for high order discontinuous Galerkin approximation of Euler equations. In *Hyperbolic problems : theory, numerics, applications, Vol. I (Zürich, 1998)*, volume 129 of *Internat. Ser. Numer. Math.*, pages 225–231. Birkhäuser, Basel, 1999.
- [DeV91] C. R. DeVore. Flux-corrected transport techniques for multidimensional compressible magnetohydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 92(1) :142–160, 1991.
- [DKK⁺02] A. Dedner, F. Kemm, D. Kröner, C.-D. Munz, T. Schnitzer, and M. Wesenberg. Hyperbolic divergence cleaning for the mhd equations. *J. Comput. Phys.*, 175(2) :645–673, 2002.
- [DL01] B. Després and F. Lagoutière. Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics. *Journal of Scientific Computing*, 16(4) :479–524 (2002), 2001.
- [DMV05] W. Dahmen, S. Müller, and A. Voß. Riemann problem for the Euler equation with non-convex equation of state including phase transitions. In *Analysis and numerics for conservation laws*, pages 137–162. Springer, Berlin, 2005.
- [DPRV99] P. Degond, P.-F. Peyrard, G. Russo, and P. Villedieu. Polynomial upwind schemes for hyperbolic systems. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 328(6) :479–483, 1999.
- [Ede87] H. Edelsbrunner. *Algorithms in combinatorial geometry*. EATCS Monographs on Theoretical Computer Science, Vol. 10. Berlin etc. : Springer-Verlag. XV, 423 p. ; DM 98.00 , 1987.
- [EGH00] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. Ciarlet, P. G. (ed.) et al., Handbook of numerical analysis. Vol. 7 : Solution of equations in \mathbb{R}^n (Part 3). Techniques of scientific computing (Part 3). Amsterdam : North-Holland/ Elsevier, 713-1020 (2000)., 2000.
- [F⁺95] J.-P. Franc et al. *La Cavitation : Mécanismes Physiques et Aspects Industriels*. Presses Universitaires de Grenoble, 1995.
- [Fac08] G. Faccanoni. *Etude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur*. PhD thesis, 'École Polytechnique', 2008.
- [FAMO99] R. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J. Comput. Phys.*, 152(2) :457–492, 1999.
- [FKA10] G. Faccanoni, S. Kokh, and G. Allaire. Approximation of liquid-vapor phase transition for compressible fluids with tabulated EOS. *C. R., Math., Acad. Sci. Paris*, 348(7-8) :473–478, 2010.

- [GH10a] L. Girault and J.-M. Hérard. Multidimensional computations of a two-fluid hyperbolic model in a porous medium. *International Journal of Finite Volumes*, 2010.
- [GH10b] L. Girault and J.-M. Hérard. A two-fluid hyperbolic model in a porous medium. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 2010.
- [GHHN08] T. Gallouët, P. Helluy, J.-M. Hérard, and J. Nussbaum. A two-fluid model for dense granular flows. In *Finite volumes for complex applications V*, pages 439–446. ISTE, London, 2008.
- [GHS02] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Some recent finite volume schemes to compute euler equations using real gas eos. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39(12) :1073–1138, 2002.
- [GHS03a] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. A hybrid scheme to compute contact discontinuities in one-dimensional euler systems. *M2AN. Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 36(6) :1133–1159, 2003.
- [GHS03b] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Some approximate Godunov schemes to compute shallow-water equations with topography. *Comput. Fluids*, 32(4) :479–513, 2003.
- [GKM⁺85] J. Glimm, C. Klingenberg, O. McBryan, B. Plohr, D. Sharp, and S. Yaniv. Front tracking and two-dimensional Riemann problems. *Adv. Appl. Math.*, 6 :259–290, 1985.
- [GL96] J. Greenberg and A. Leroux. A well balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(1) :1–16, 1996.
- [GLBN97] J. Greenberg, A. Leroux, R. Baraille, and A. Noussair. Analysis and approximation of conservation laws with source terms. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(5) :1980–2007, 1997.
- [GM96] T. Gallouët and J.-M. Masella. Un schéma de Godunov approché. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 323(1) :77–84, 1996.
- [GMM81] J. Glimm, D. Marchesin, and O. McBryan. A numerical method for two phase flow with an unstable interface. *J. Comput. Phys.*, 39(1) :179–200, 1981.
- [GMP84] J. Glimm, G. Marshall, and B. Plohr. A generalized Riemann problem for quasi-one-dimensional gas flows. *Adv. in Appl. Math.*, 5(1) :1–30, 1984.
- [God59] S. Godunov. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of equations of fluids mechanics. *Math Sbornik*, n 47 :271–306, 1959.
- [GR91] E. Godlewski and P.-A. Raviart. *Hyperbolic systems of conservation laws*, volume 3/4 of *Mathématiques & Applications (Paris) [Mathematics and Applications]*. Ellipses, Paris, 1991.
- [GR96] E. Godlewski and P.-A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, volume 118 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1996.

- [GZI⁺79] S. Godunov, A. Zabrodine, M. Ivanov, A. Kraïko, and G. Prokopov. *Résolution numérique des problèmes multidimensionnels de la dynamique des gaz*. “Mir”, Moscow, 1979. Translated from the Russian by Valéri Platonov.
- [HAC74] C. Hirt, A. Amsden, and J. Cook. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *J. Comput. Phys.*, 14 :227–253, 1974.
- [HAM⁺04] H. Hoteit, Ph. Ackerer, R. Mosé, J. Erhel, and B. Philippe. New two-dimensional slope limiters for discontinuous Galerkin methods on arbitrary meshes. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 61(14) :2566–2593, 2004.
- [HH83] A. Harten and J. Hyman. Self-adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 50(2) :235–269, 1983.
- [HHM10a] P. Helluy, J.-M. Hérard, and H. Mathis. A simple parameter-free entropy correction for approximate Riemann solvers. *C. R. Meca. Acad. Sci.*, 2010. disponible en ligne.
- [HHM10b] P. Helluy, J.-M. Hérard, and H. Mathis. A well-balanced approximate Riemann solver for compressible flows in variable cross-section ducts. soumis, 2010.
- [Hir73] C.W. Hirt. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing technique. *Cislennye Metody Meh. Zidk.*, 156-164 (1973)., 1973.
- [HLVL83] A. Harten, P. Lax, and B. Van Leer. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1) :35–61, 1983.
- [HS06] P. Helluy and N. Seguin. Relaxation models of phase transition flows. *ESAIM, Math. Model. Numer. Anal.*, 40(2) :331–352, 2006.
- [HUL01a] J.-B. Hiriart-Urruty and C. Lemaréchal. *Fundamentals of convex analysis*. Grundlehren Text Editions. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [HUL01b] J.-B. Hiriart-Urruty and C. Lemaréchal. *Fundamentals of convex analysis*. Grundlehren Text Editions. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [IMPT92] E. Isaacson, D. Marchesin, B. Plohr, and J. Temple. Multiphase flow models with singular Riemann problems. *Mat. Apl. Comput.*, 11(2) :147–166, 1992.
- [IT95] E. Isaacson and B. Temple. Convergence of the 2×2 Godunov method for a general resonant nonlinear balance law. *SIAM J. Appl. Math.*, 55(3) :625–640, 1995.
- [Jao01] S. Jaouen. *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. PhD thesis, Université Paris VI, November 2001.
- [Jun07] S. Jund. *Méthodes d’éléments finis d’ordre élevé pour la simulation numérique de la propagation d’ondes*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2007.

- [Kar96] S. Karni. Hybrid multifluid algorithms. *SIAM J. Sci. Comput.*, 17(5) :1019–1039, 1996.
- [KDW08] E. Kubatko, C. Dawson, and J. Westerink. Time step restrictions for Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods on triangular grids. *J. Comput. Phys.*, 227(23) :9697–9710, 2008.
- [KL10] S. Kokh and F. Lagoutière. An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of a five-equation model. *J. Comput. Phys.*, 229(8) :2773–2809, 2010.
- [KM80] B. Keller and M. Miksis. Bubble oscillations of large amplitude. *J. Acoust. Soc. Am.*, 68(2) :628–633, 1980.
- [KM97] V. Kolokoltsov and V. Maslov. *Idempotent analysis and its applications*, volume 401 of *Mathematics and its Applications*. Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht, 1997.
- [KT05] D. Kröner and M.-D. Thanh. Numerical solutions to compressible flows in a nozzle with variable cross-section. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(2) :796–824, 2005.
- [Lag00] F. Lagoutière. *Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes fluides compressibles à plusieurs constituants*. PhD thesis, Université Paris VI, Paris, 2000.
- [Lax73] P. Lax. *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, Pa., 1973. Conference Board of the Mathematical Sciences Regional Conference Series in Applied Mathematics, No. 11.
- [LBT09] Y. Lucet, H. H. Bauschke, and M. Trienis. The piecewise linear-quadratic model for computational convex analysis. *Comput. Optim. Appl.*, 43(1) :95–118, 2009.
- [LE94] L. Landau and Lifchitz E. *Physique statistique*. Physique théorique. Ellipses, Paris, 1994.
- [LeV92] R. J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Birkhäuser Verlag, Basel, second edition, 1992.
- [LG04] P. G. Lefloch and P. Goatin. The riemann problem for a class of resonant hyperbolic systems of balance laws. *Annales de l'Institut Henri Poincaré. Analyse Non Linéaire*, 21 :881–902, 2004.
- [Liu87] T.-P. Liu. Nonlinear resonance for quasilinear hyperbolic equation. *J. Math. Phys.*, 28(11) :2593–2602, 1987.
- [LS05] F. Li and C.-W. Shu. Locally divergence-free discontinuous Galerkin methods for MHD equations. *J. Sci. Comput.*, 22/23 :413–442, 2005.
- [Luc96] Y. Lucet. A fast computational algorithm for the Legendre-Fenchel transform. *Computational Optimization and Applications. An International Journal*, 6(1) :27–57, 1996.
- [Luc97] Y. Lucet. Faster than the fast Legendre transform, the linear-time Legendre transform. *Numerical Algorithms*, 16(2) :171–185 (1998), 1997.

- [Mas87] V. Maslov. *Méthodes opératorielles*. Éditions, 1987.
- [MBK⁺09] S. Müller, M. Bachmann, D. Kröninger, T. Kurz, and P. Helluy. Comparison and validation of compressible flow simulations of laser-induced cavitation bubbles. *Comput. Fluids*, 38(9) :1850–1862, 2009.
- [MFG99] J.-M. Masella, I. Faille, and T. Gallouët. On an approximate godunov scheme. *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, 12(2) :133–149, 1999.
- [MK05] T. Miyoshi and K. Kusano. A multi-state hll approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 208 :315–344, 2005.
- [Moc80] M. S. Mock. Systems of conservation laws of mixed type. *Journal of Differential Equations*, 37(1) :70–88, 1980.
- [MOS⁺00] C.-D. Munz, P. Omnes, R. Schneider, E. Sonnendrücker, and U. Voß. Divergence correction techniques for maxwell solvers based on a hyperbolic model. *J. Comput. Phys.*, 161(2) :484–511, 2000.
- [MP89] R. Menikoff and B. J. Plohr. The Riemann problem for fluid flow of real materials. *Reviews of Modern Physics*, 61(1) :75–130, 1989.
- [MS07] S. Müller and Y. Stiriba. Fully adaptive multiscale schemes for conservation laws employing locally varying time stepping. *J. Sci. Comput.*, 30(3) :493–531, 2007.
- [MV06] S. Müller and A. Voß. The Riemann problem for the Euler equations with nonconvex and nonsmooth equation of state : construction of wave curves. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(2) :651–681 (electronic), 2006.
- [Myo96] R. S. Myong. *Theoretical and computational investigations of nonlinear waves in magnetohydrodynamics*. PhD thesis, University of Michigan, 1996.
- [Ned86] J.C. Nedelec. Mixed finite element in 3D in $H(\text{div})$ and $H(\text{curl})$. Differential equations and their applications, Equadiff 6, Proc. 6th Int. Conf., Brno/Czech. 1985, Lect. Notes Math. 1192, 321-325 (1986)., 1986.
- [Ngu09] Q. L. Nguyeng. *Adaptation dynamique de maillage pour les écoulements diphasiques en conduite pétrolières*. PhD thesis, Université Paris VI, Paris, 2009.
- [Nus07] J. Nussbaum. *Modélisation et simulation numérique d'un écoulement diphasique de la balistique intérieure*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2007.
- [OS83] S. Osher and R. Sanders. Numerical approximations to nonlinear conservation laws with locally varying time and space grids. *Math. Comp.*, 41(164) :321–336, 1983.
- [Pip06] S. Piperno. Symplectic local time-stepping in non-dissipative DGTD methods applied to wave propagation problems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 40(5) :815–841 (2007), 2006.
- [Pow94] K. Powell. An approximate Riemann solver for magnetohydrodynamics (that works in more than one space dimension). Technical Report NASA/CR-194902 ICASE Report No. 94-24, ICASE-NASA Langley, ICASE, NASA Langley Research Center, April 1994.

- [PRL⁺99] K. Powell, P. Roe, T. Linde, T. Gombosi, and D. De Zeeuw. A solution-adaptive upwind scheme for ideal magnetohydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 154(2) :284–309, 1999.
- [PS85] F. Preparata and M. Shamos. *Computational geometry*. Texts and Monographs in Computer Science. Springer-Verlag, New York, 1985. An introduction.
- [RB96] P. L. Roe and D.S. Balsara. Notes on the eigensystem of magnetohydrodynamics. *SIAM J. Appl. Math.*, 56(1) :57–67, 1996.
- [Roc97] R. T. Rockafellar. *Convex analysis*. Princeton Landmarks in Mathematics. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1997. Reprint of the 1970 original, Princeton Paperbacks.
- [Roe81] P. L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43(2) :357–372, 1981.
- [Rou00] S. Rouy. *Modélisation mathématique et numérique d'écoulements diphasiques compressibles*. PhD thesis, Université de Toulon, 2000.
- [Rus61] V. Rusanov. The calculation of the interaction of non-stationary shock waves with barriers. *Ž. Vyčisl. Mat. i Mat. Fiz.*, 1 :267–279, 1961.
- [S⁺09] E. Sonnendrücker et al. Project-team Calvi : Scientific Computing and Visualization. Technical report, INRIA Grand-Est, 2009.
- [SA99a] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.
- [SA99b] R. Saurel and R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3) :1115–1145 (electronic), 1999.
- [Ser96] D. Serre. *Systèmes de lois de conservation I et II*. Diderot Editeur, 1996.
- [Tor99] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, 2nd edition*. Springer, 1999.
- [Tor03a] M. Torrilhon. Non-uniform convergence of finite volume schemes for Riemann problems of ideal magnetohydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 192(1) :73–94, 2003.
- [Tor03b] M. Torrilhon. Uniqueness conditions for Riemann problems of ideal magnetohydrodynamics. *J. Plasma Phys.*, 69(3) :253–276, 2003.
- [Tót00] G. Tóth. The $\nabla \cdot B = 0$ constraint in shock-capturing magnetohydrodynamics codes. *J. Comput. Phys.*, 161(2) :605–652, 2000.
- [TW06] H.-Z. Tang and G. Warnecke. High resolution schemes for conservation laws and convection-diffusion equations with varying time and space grids. *J. Comput. Math.*, 24(2) :121–140, 2006.
- [vL79] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. a second order sequel to the Godunov's method. *Journal of Computational Physics*, 32 :101–136, 1979.
- [Voß05] A. Voß. *Exact Riemann Solution for the Euler Equations with nonconvex and nonsmooth equation of state*. PhD thesis, Wuppertal, 2005.

- [Wes03] M. Wesenberg. *Efficient finite-volume schemes for magnetohydrodynamics simulations in solar physics*. PhD thesis, Universität Freiburg im Breisgau, mars 2003.
- [Yee66] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 14(3) :302–307, 1966.