



HAL
open science

**Modélisation et étude numérique d'écoulements
diphases : Modélisation d'un écoulement homogène
équilibré : Modélisation des collisions entre gouttelettes
à l'aide d'un modèle simplifié de type BGK**

Aude Champmartin

► **To cite this version:**

Aude Champmartin. Modélisation et étude numérique d'écoulements diphases : Modélisation d'un écoulement homogène équilibré : Modélisation des collisions entre gouttelettes à l'aide d'un modèle simplifié de type BGK. Mathématiques générales [math.GM]. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2011. Français. NNT : 2011DENS0007 . tel-00598571v2

HAL Id: tel-00598571

<https://theses.hal.science/tel-00598571v2>

Submitted on 23 May 2012

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.



energie atomique • énergies alternatives



CENTRE DE MATHÉMATIQUES ET DE LEURS APPLICATIONS

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN

ÉCOLE DOCTORALE DE SCIENCES PRATIQUES

THÈSE

présentée par

Aude CHAMPMARTIN

en vue d'obtenir le grade de Docteur en Sciences de l'École Normale Supérieure de Cachan

Sujet :

**MODÉLISATION et ÉTUDE NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS
DIPHASIQUES :**

1- Modélisation d'un écoulement homogène équilibré

**2- Modélisation des collisions entre gouttelettes
à l'aide d'un modèle simplifié de type BGK**

Thèse soutenue le 28 février 2011 devant le jury composé de :

M. Laurent DESVILLETES	Professeur, ENS Cachan	Directeur de thèse
Mme Maria GROPPi	Professeur, Università di Parma	Rapporteur
M. Frédéric LAGOUTIERE	Professeur, Université Paris-Sud 11	Examinateur
M. Julien MATHIAUD	Ingenieur Chercheur CEA	Co-directeur de thèse
M. Olivier POUJADE	Ingenieur Chercheur CEA	Examinateur
M. Rémi SENTIS	Directeur de Recherche CEA	Rapporteur

Table des matières

Introduction	9
0.1 Introduction à la première partie : le modèle de mélange homogène équilibré	17
0.1.1 Le modèle homogène équilibré avec drift (HEM) (chapitre 1)	17
0.1.2 Schéma numérique utilisé pour la discrétisation du modèle HEM dans le code d'étude (chapitre 2)	19
0.1.3 Analyse du modèle HEM (chapitre 3)	19
0.1.4 Simulations effectuées avec la composante BBC-HEM du code d'étude (chapitre 4)	20
0.2 Partie II	20
0.2.1 Modèle de type BGK pour les collisions inélastiques où les échanges d'énergie interne sont pris en compte	23
0.2.1.1 Résolution du système de sprays épais (45)-(55)	23
0.2.1.2 Description du noyau de collision	23
0.2.2 Description de l'article présenté au chapitre 5 de la seconde partie du manuscrit	25
0.2.2.1 Propriétés imposées au modèle simplifié	25
0.2.2.2 Détermination des paramètres c_i , $i = 1, \dots, 4$ et ν	26
0.2.2.3 Validation du modèle	28
I Le modèle de mélange homogène équilibré (HEM)	29
1 Modélisation HEM	30
1.1 Le modèle de mélange homogène équilibré	32
1.1.1 Modèle bifluide de départ	32
1.1.2 Estimations des temps d'équilibrage	34
1.1.2.1 Estimation du temps de transition d'un modèle de spray vers le modèle bifluide (1.9)-(1.14)	34
1.1.2.2 Temps de retour à l'équilibre entre les deux phases	35
1.1.2.2.a Diffusion thermique	35
1.1.2.2.b Force de traînée	36
1.1.3 Obtention du modèle de mélange homogène équilibré (HEM)	38
1.1.3.1 Dérivation de cinq équations d'évolution sur des grandeurs moyennes de mélange à partir du modèle bifluide (1.9)-(1.11)	39

1.1.3.1.a	Obtention des équations moyennées sur ρ , u , E ainsi que d'une équation sur c_r . . .	40
1.1.3.1.b	Obtention de l'équation vérifiée par la vitesse relative	42
1.1.4	Formulation du modèle en énergie interne	43
1.1.5	Le modèle de mélange homogène équilibré	50
1.2	Obtention de la formule (1.136) de vitesse relative	52
1.2.1	Philosophie des modèles de drift	52
1.2.2	Formalisation de l'obtention de la formule de vitesse relative via un développement de type Chapman-Enskog . . .	56
1.2.3	La vitesse relative vue comme un modèle de sous-mailles .	57
1.2.3.1	Formule asymptotique pour u_r vue dans le cadre d'un modèle de sous-mailles	59
1.2.4	Résolution de l'équation (1.185)	61
1.2.5	Modélisation de la traînée : symétrisation du système HEM	66
2	Schéma BBC pour le modèle HEM	69
2.1	Cycle de calcul HEM	69
2.1.1	A propos du schéma BBC	69
2.1.1.1	Bref aperçu des différents types de schémas numériques existants	71
2.1.1.2	Description du schéma BBC utilisé dans le code d'étude du CEA	73
2.1.2	Stratégie du schéma BBC-HEM	75
2.1.3	Description d'une itération d'un cycle de calcul BBC classique et BBC-HEM	76
2.1.3.1	Initialisation des grandeurs de mélange dans le domaine de calcul	76
2.1.3.2	Cycle de calcul du schéma BBC classique et du schéma BBC-HEM	76
2.1.3.2.a	Equations du mélange classique et du modèle HEM	77
2.1.3.2.b	Description du cycle de calcul	80
2.1.3.2.c	Cycle de calcul schéma BBC classique	84
2.1.3.2.d	Cycle de calcul schéma BBC-HEM	86
2.2	Ordre du schéma BBC classique	92
2.3	Schéma BBC modifié pour les équations HEM	118
2.4	Etude de l'ordre du schéma BBC modifié pour les équations HEM	123
2.4.1	L'équation de conservation de la masse reste d'ordre 2 . . .	124
2.4.2	Perte de l'ordre 2 dans l'équation sur la concentration relative pour le schéma BBC-HEM	142
2.4.3	Consistance (ordre 1) du schéma BBC-modifié	157
2.4.3.1	Consistance de l'équation en énergie	159
2.4.3.2	Consistance de l'équation d'impulsion	165
2.4.3.3	Consistance de l'équation de la masse	167

2.4.3.4	Consistance de l'équation de concentration relative c_r	167
3	Analyse mathématique du modèle HEM	171
3.1	Analyse du modèle HEM	171
3.1.1	Etude en 1D de l'hyperbolicité du système dans le cas simplifié où $u_r = \text{cste} = K$	171
3.1.2	Etude du modèle HEM lorsque la vitesse relative vérifie la relation simplifiée $u_r = \lambda \frac{\partial_x p}{((\partial_x p)^2 + \delta)^{1/4}}$	180
3.2	Comportement à la limite du modèle HEM	186
3.2.1	Grandeurs caractéristiques des équations HEM	187
3.2.2	Grandeurs adimensionnées du système HEM	188
4	Résultats obtenus avec le schéma BBC pour le modèle HEM	193
4.1	Simulations d'une instabilité de type Rayleigh-Taylor	194
4.2	Résultats des simulations eau/air barotropes	196
4.2.1	Comparaisons modèle HEM/ mélange classique pour des rayons de gouttelettes de plus en plus petits	197
4.2.2	Cas de gouttelettes d'eau soumises à un vent latéral et à la gravité	200
II	Un modèle simplifié de l'équation de Boltzmann homogène	209
5	Le modèle de type BGK pour la résolution de l'équation de Boltzmann homogène	210
6	Précisions supplémentaires sur le modèle de type BGK	239
6.1	Brève description de la méthode de Monte-Carlo utilisée pour l'équation de Boltzmann	239
6.2	Schéma numérique mis en place pour le modèle simplifié	240
6.3	Conclusion	243
A	Ordre du schéma BBC classique	246
A.1	Ordre de l'équation de conservation de la masse	246
A.2	Ordre de l'équation de conservation de l'énergie	267
	Annexe	246
	Bibliographie	276
	Bibliographie	276

Remerciements

Ce manuscrit est le résultat de trois ans de travail, cela peut paraître long mais c'est aussi très court.

Je tiens en premier lieu à remercier mes deux directeurs de thèse, Laurent Desvilletes et Julien Mathiaud, qui m'ont épaulée tout au long de cette thèse. Ils m'ont permis de travailler sur deux sujets totalement différents, appliqués à la mécanique des fluides. Le fait de pouvoir passer d'un sujet à un autre était très appréciable lorsque je bloquais sur un point et j'ai pu ainsi aussi découvrir divers problèmes et méthodes numériques. Avoir deux encadrants permet de varier les points de vue, je remercie Laurent pour ses conseils toujours très utiles et pour avoir eu le courage de relire ces horribles calculs d'ordre, Julien pour les heures passées à mes côtés à débbugger le code (même si faire le trajet pour partir en conférence avec lui peut s'avérer très chaotique...). De plus, leurs relectures très attentives du manuscrit ont permis d'améliorer grandement la clarté de celui-ci.

Un grand merci à Rémi Sentis et Maria Groppi d'avoir accepté de rapporter ma thèse et d'avoir pris le temps de relire avec attention ce manuscrit, d'autant plus que Maria Groppi a fait l'effort de lire le manuscrit écrit presque intégralement en français. Je tiens à remercier Frédéric Lagoutière, mon président de jury malgré la rivalité Nancy-Metz (et non pas Metz-Nancy...) et Olivier Poujade pour sa présence dans mon jury ainsi que pour toutes les discussions autour de la physique du problème et des cas tests à faire passer pendant la thèse.

Durant ces trois années, j'ai eu la chance de travailler au sein de deux laboratoires, le Centre de Mathématiques et de Leurs Applications (CMLA) de l'ENS Cachan, ainsi qu'au laboratoire LSI du CEA-DAM-DIF, ce qui démultiplie les personnes à remercier (ainsi que les risques d'oublis). Je remercie Renaud Motte et Frédéric Pascal de m'avoir accueillie dans leurs laboratoires respectifs.

Je passe maintenant aux habitants du "couloir" du CEA : d'abord Francky puis Daniel mes deux co-bureaux qui ont supporté le léger désordre caractéristique de mon bureau, puis Gauthier, Cédric, Laurent, les deux Xavier avec qui j'ai passé de très bonnes pauses thés/Kfé en salle T le vendredi après-midi. Merci aussi aux thésards de l'autre département : Sara, Zhora, Micka, Xavier, Déborah, Yohann qui étaient mes compagnons de déjeuner. Je n'oublie pas non plus les ex-thésards upgradés au rang de grand badge bleu : Francky mon juke-box préféré, Mathieu et les séances de course à pied et incantation du soleil, Christophe pour ses remarques toujours pertinentes à la suite d'exposés, Julien C. pour les séances course à pied (toujours). Mes remerciements vont bien sûr à Émeric qui a su me booster lorsque c'était nécessaire et me faire profiter de son expertise physique (et prendre le temps d'éclairer une novice) et ce même

s'il m'empêchait de dormir le matin dans le bus avant Arpajon, quel tortionnaire ! Je remercie les membres de l'équipe du laboratoire LSI, notamment ceux avec lesquels j'ai eu l'occasion de tisser des liens : d'abord Laurent S. et Pascal R., grands chambouleurs de code mais toujours prêts à prendre de leur temps pour m'expliquer les subtilités de celui-ci. Il faut bien souffler aussi pendant une thèse, merci à l'équipe badminton du laboratoire : Corinne, Jean-Philippe, Julien, Francky, Christophe et j'en oublie, pour les moments de détente entre midi et deux. Enfin, mes lundis soirs ont été fort bien occupés avec l'équipe squash du centre, notamment Rachel, Anne-So, les 2 Fred... Un merci particulier à Claire notre secrétaire et "maman" du couloir : elle ne nous oublie jamais et prend le temps de faire un détour tous les matins pour venir nous voir et discuter avec nous, c'est une perle ! Nos grandes discussions vont me manquer.

Je passe maintenant à mes compagnons que j'ai côtoyés de manière intensive durant la rédaction de ce manuscrit. Tout d'abord Julie, Adina, Eric, mes trois co-bureaux et compagnons de galère de rédaction, qui ont rendu cette période peu agréable plus facile grâce à leur soutien et aux moments de détente que l'on s'accordait souvent autour d'un thé et de petits gâteaux. Et enfin toute l'équipe "junior" du CMLA : Bruno, Julien, Zhongwey, Anne (ma prof d'anglais), Rafa (éternellement là), Romain (et ses bonbons bizarres) ainsi que les plus fraîchement arrivés : Morgan, Ives, Yohann, Saad, Nicolas, Mauricio. Nos déjeuners à l'extérieur et nos petits restos de temps à autre étaient fort sympatiques.

Je n'oublie pas non plus les ex-thésards, Fred, Ayman et Gaël, mes trois prédécesseurs ; Neus, à la fois poisson hors-bord et chef cuistot hors pair : je me souviendrai de tes macarons et autres friandises ainsi que nos repas tupperware à la cuisine.

Je remercie également Florian de Vuyst pour sa gentillesse et les discussions autour des schémas numériques ainsi que Jean Michel Ghidaglia avec qui j'ai eu la chance de travailler pendant la période pré-soutenance. Sandra pour sa bonne humeur et son efficacité à trouver un article ou un livre, même avec des références incomplètes. Virginie, Véronique et Micheline pour leur gentillesse et efficacité : à peine demandé, déjà fait.

Une thèse ne se fait pas uniquement grâce aux collègues, je tiens à remercier tout particulièrement mes amis Émeric, Flo, Seb, Alice pour leur soutien tout au long de cette thèse et nos soirées mémorables du samedi soir au dimanche matin ainsi que mes parents sur lesquels j'ai pu toujours compter et qui m'ont toujours encouragée.

Enfin, et j'ai gardé le meilleur pour la fin, merci à Alain pour m'avoir supportée au quotidien durant cette thèse et cette période de rédaction commune d'un manuscrit et qui est toujours là pour moi depuis dix ans déjà.

Une thèse se terminant toujours par une petite collation, je n'oublie pas non plus l'équipe "préparation du pot" qui m'a beaucoup aidée à tenir les délais : Alain, Mamouchka et Papou ainsi que mes beaux-parents Annette et Guy qui ont mis à contribution leurs talents culinaires pour nourrir tous ces affamés !

Introduction

Introduction générale

Un problème classique dans le milieu industriel est celui de l'évolution dynamique de gouttelettes dans un fluide et de l'interaction entre ce dernier et les gouttelettes. Par exemple, ce type de problème intéresse Ariane espace : la fusée Ariane 5 est propulsée lors de sa phase de décollage par du carburant enrichi en alumine afin d'accélérer sa combustion. Certaines de ces gouttelettes viennent s'agglomérer sur les propulseurs et diminuent ainsi leurs fonctionnalités (on pourra consulter par exemple la thèse de Lavergne [Lav04] pour plus de détails). Le contexte du CEA est commun avec celui d'Ariane espace : on considère des écoulements de gouttelettes métalliques évoluant dans du gaz, e.g. des gouttes d'étain dans l'air (cf. les études réalisées dans deux thèses antérieures [Bar04b, Mat06]). Ces gouttelettes d'étain sont émises avec une vitesse plus grande que celle de l'air, puis elles sont progressivement ralenties par les effets de la traînée. Le début de l'éjection nécessite de suivre l'évolution des gouttelettes de manière fine via des modèles de types sprays (dits aussi "gaz-particules") [Bar04b, Mat06] qui impliquent un coût de calcul important. Ensuite, au fur et à mesure que les gouttelettes sont freinées sous l'effet de la traînée et s'équilibrent en vitesse avec le gaz, on voudrait utiliser des modèles beaucoup moins coûteux numériquement tout en conservant l'information sur le différentiel de vitesse (non négligeable) entre l'air et les gouttelettes d'étain. C'est ce contexte qui prédominera dans cette thèse.

On s'intéressera également dans une seconde partie aux modèles de sprays, et plus précisément à une modélisation simplifiée des collisions entre les gouttelettes toujours dans un souci de réduction des coûts de calcul. On présentera une méthode collisionnelle de type BGK pour réduire le coût de simulation des collisions entre gouttelettes.

Modélisation des systèmes diphasiques

Dans un cadre plus général, réussir à décrire les modèles physiques composés de plusieurs phases¹ en prenant en compte à la fois leur comportement propre mais aussi les interactions dues à la présence d'un autre fluide, présente un intérêt considérable pour les milieux industriels. Ce type de systèmes est en effet présent dans de nombreux domaines : extraction pétrolière, industrie chimique, sûreté des réacteurs nucléaires, aérosols dans les poumons, moteur diesel...

1. on se restreindra aux systèmes à deux phases dans le cadre de cette thèse

Les écoulements diphasiques (i.e. composés de deux phases) sont régis par les échanges qui se produisent entre les phases, provoqués par les écarts éventuels de température, de vitesse et de pression entre celles-ci. L'enjeu de simuler des phénomènes diphasiques est de trouver un compromis entre la modélisation des phénomènes physiques complexes et l'utilisation d'un modèle compatible avec les moyens numériques dont on dispose.

Les modèles disponibles pour décrire ces systèmes sont nombreux et dépendent du degré de complexité que l'on souhaite conserver. Grâce aux échanges (*e.g.* vitesse, énergie...) se produisant entre les phases, des équilibres apparaissent pour les grandeurs concernées et la complexité des modèles à considérer s'amoin-drit : l'emploi de tel ou tel modèle est intimement lié à l'état d'équilibrage ther-modynamique entre les phases.

Il existe de nombreux ouvrages sur ce sujet : on peut citer notamment les travaux de Ishii [Ish75], Steward-Wendroff [SW84] ainsi que celui de Drew-Passman [DP99]. On peut classer les modèles par le nombre d'équations prises en compte : plus le modèle considéré est compliqué, plus le nombre d'équations du modèle sera important et moins on aura eu besoin de faire d'hypothèses simplificatrices. Ces hypothèses permettent : soit de négliger des termes dans les équations, soit de remplacer certaines équations d'évolution par des formules de fermeture. Le cadre qui va nous intéresser est celui des écoulements dispersés, i.e. des gouttelettes évoluant dans un gaz ou un liquide porteur. On se restreint ici à la description des modèles dans lesquels les deux phases vérifient une équation de la mécanique des fluides ; le cas où l'on suit l'évolution de la densité de gouttelettes dans l'espace des phases sera brièvement décrit dans la section suivante (section 0.2). En effet, pour des systèmes diphasiques pour lesquels les gouttelettes possèdent un spectre de vitesses, rayons et températures complexe, les modèles qui suivent sont inadaptés et il est nécessaire d'utiliser des modèles de type sprays.

1. Une description assez fine des écoulements peut se faire au moyen de modèles bifluïdes [Ish75, DL79, DA76] dans lesquels on décrit chacune des phases séparément : ces systèmes sont constitués d'au moins six équations : chaque fluide est décrit par une équation de conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie totale et dans chacune des équations d'impulsion et d'énergie viennent s'ajouter des termes de transfert entre les phases. Dans ses travaux, Ishii [Ish75] voit les systèmes diphasiques comme la superposition de deux systèmes à une phase auxquels s'ajoutent des termes d'échange de quantités via des termes de traînée et d'échanges d'énergie. Le modèle bifluïde permet de prendre en compte les déséquilibres thermiques et mécaniques entre les phases : chaque phase possède sa propre vitesse et sa propre température. A ces équations, on ajoute soit l'hypothèse que les deux phases sont à l'équilibre en pression (modèle bifluïde isobare (cf. [IM84, Lah92, Tou96, SFW⁺05, Bes90]...)), soit l'hypothèse que chaque fluide conserve sa propre pression mais il faut alors ajouter une équation pour fermer le système (équation sur la fraction volumique du mélange) ([BN86, RH84, RT04, SA99]...). L'article de Enwald [EPA96] ré-

capitule l'obtention des modèles bifluïdes via des processus de moyennes spatiales et temporelles.

Ces modèles bifluïdes sont précis ; néanmoins, ils nécessitent une modélisation soignée des termes de transfert à l'interface et engendrent des difficultés numériques dues à la présence de termes sources. De plus, les modèles bifluïdes à une seule pression ont pour la plupart l'inconvénient de ne pas être hyperboliques à fort taux de vide [RH84], ce qui peut engendrer des instabilités que l'on contourne parfois en ajoutant un terme de pression à l'interface [SI01, DCL79, Bes90, Tou96]. Par ailleurs, les termes de transfert à l'interface doivent être évalués par l'expérience ou par des moyens empiriques. L'emploi de modèles bifluïdes est justifié lorsque les deux phases ne sont pas en équilibre ou que le problème nécessite une résolution très précise. Dans l'industrie, ce type de modèles est utilisé notamment dans le domaine nucléaire avec le code CATHARE [Bes90]) et pour les problèmes d'extraction pétrolière avec le code OLAG [BMMN91].

2. Si les phases ont commencé à s'équilibrer, on va pouvoir utiliser une autre classe de modèles. Les modèles de mélange avec drift sont des modèles pour lesquels on suit à la fois une équation de conservation moyenne de la masse ainsi qu'une équation sur la concentration d'une des phases. Par contre, on ne garde seulement qu'une équation de vitesse moyenne et une équation d'énergie moyenne. Ainsi, par rapport au modèle bifluïde, il manque une équation en vitesse et une en énergie que l'on remplace par deux relations. Dans un modèle de mélange avec drift, on suppose que la vitesse des deux fluïdes peut être suivie par le biais d'une vitesse moyenne u de mélange complétée par une relation permettant de prédire la vitesse relative u_r entre les deux phases². L'équation sur l'énergie manquante est remplacée par l'hypothèse que les deux fluïdes sont à l'équilibre en température. Il s'agit donc de modèles à quatre équations aux dérivées partielles et une relation algébrique.
3. Enfin le modèle le plus simple est le modèle de mélange qui suppose l'équilibre total entre les deux phases à la fois en pression, en température et en vitesse (cas particulier des modèles avec drift précédents dans lequel la relation donnant la vitesse relative est nulle). Ce modèle de mélange est aussi composé de quatre équations d'évolutions de conservation de la masse moyenne de mélange, de concentration d'une des composantes, de la quantité de mouvement moyenne ainsi que d'énergie moyenne du mélange. A ceci s'ajoute quatre relations de fermeture indiquant que les vitesses, pressions et températures entre les phases sont communes [Cle00]. De tels modèles sont très faciles d'emploi mais requièrent l'équilibre thermodynamique total entre les phases.

2. on verra que la connaissance de u et u_r , associée à la concentration d'une des phases permet aussi de reconstruire les vitesses de chacune des phases (1.45)

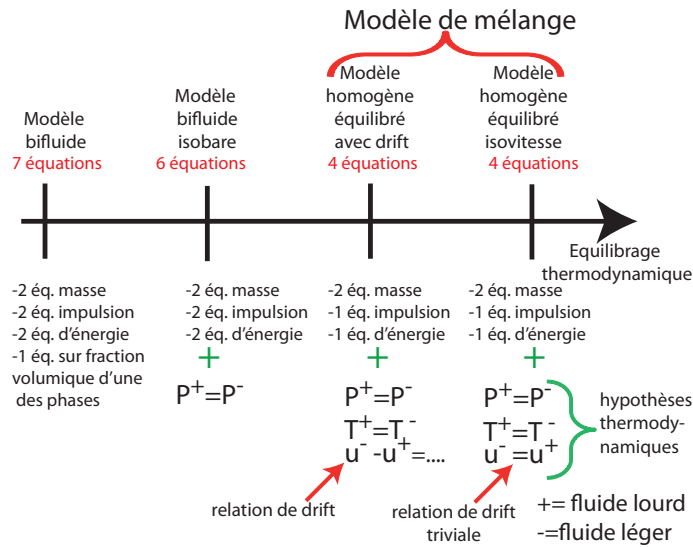


FIGURE 1 – Différents modèles pour suivre des systèmes diphasiques : au fur et à mesure que l'équilibrage entre les phases se produit, on peut utiliser des modèles avec de moins en moins d'équations. Plus le nombre d'équations est important, plus le modèle est précis.

Dans la figure (Fig. 1), on récapitule les modèles existants pour les systèmes diphasiques. L'objectif de la première partie de cette thèse était d'être capable de suivre des gouttelettes émises à un stade où les forces de traînée ont déjà fait effet et où les vitesses entre les deux phases (air/étain) étaient fortement couplées. Ce sont finalement les modèles de type homogène avec vitesse de drift qui vont nous intéresser : ils constituent un bon compromis entre simplicité et précision.

On va donc détailler un peu plus l'origine des modèles de drift : un modèle de drift est un modèle dans lequel on "prédit" à l'aide d'une relation la vitesse relative entre les phases. Ce type de relation peut être utilisé dans les modèles bifluides pour obtenir une corrélation sur les forces de traînée à l'interface [Ish75, Bes90] ou (ce qui va nous intéresser) pour les modèles homogènes avec drift, pour remplacer l'équation manquante en vitesse. Zuber et Findlay [ZF65] sont à l'origine des premiers modèles de drift, puis ce concept a été explicité de manière plus détaillée dans les papiers d'Ishii [Ish77, IZ79]. Dans leurs articles, Zuber [Zub67] puis Wallis [Wal69] remplacent les deux équations d'impulsion du modèle bifluide par une équation sur la vitesse moyenne du mélange et une relation de fermeture sur la vitesse relative.

Du fait de la simplicité de ces modèles, ils ont été beaucoup utilisés dans le monde industriel pour des applications très variées : dans le contexte de l'extraction pétrolière [FH99, FK02, BBC⁺05, HPDSL97], pour l'industrie chimique [PB09, SM95], dans l'industrie nucléaire [CTR⁺84, GM05, Ray87, MTFP98, Gal09] ou encore en médecine pour les problèmes de dépôt des gouttelettes provenant d'aérosols dans les voies respiratoires [LO08].

Dans tous ces modèles, la difficulté réside dans l'obtention d'une formule sur la vitesse relative, représentative du mouvement relatif entre les deux phases. L'obtention de cette formule est faite : soit par l'expérience comme par exemple dans les articles qui suivent : [ZF65, Wal69, Ben84, FJ92, HI02, HI03]³, soit en négligeant les effets des termes dus à l'accélération dans les équations en vitesse des deux phases (cf. [IZ79, MTFP98]...), soit par la résolution d'une équation simplifiée sur la différence de vitesse entre les deux phases provenant d'un modèle bifluide initial (cf. [GP06, GD07, ACC⁺08]...). Toutes les relations obtenues dépendent du problème physique considéré et la limitation des modèles de drift provient des hypothèses utilisées pour obtenir cette formule sur la vitesse relative. On pourra trouver dans le papier de Schlegel [SHI10] un récapitulatif des différentes formules de fermeture utilisées pour la vitesse relative suivant le type d'écoulement considéré. La particularité du modèle que l'on va utiliser [GP06] est que la seconde équation que l'on suit sur la masse n'est pas celle du fluide léger, c'est par exemple ce qui est fait pour le code TACITE [Ray87], mais une grandeur liée au différentiel de densité entre les deux phases.

En résumé, l'intérêt des modèles de drift est de se séparer des termes de transfert entre phases présents dans les équations du modèle bifluide et de suivre moins d'équations. Leur inconvénient est d'obtenir une relation sur la vitesse relative entre les deux phases qui n'est pas justifiée pour tous les écoulements.

Ainsi, les modèles de drift constituent un intermédiaire entre les modèles bifluides très précis mais très coûteux numériquement, et les modèles de mélange isobare, isotherme et isovitesse, trop simples pour certains types d'écoulements. Par contre, on ne peut les employer que dans un cadre où les vitesses entre les deux phases sont suffisamment couplées et chaque fermeture sur la vitesse relative est spécifique à un type d'écoulement. Dans l'industrie, il est très important de concilier précision, rapidité et maniabilité des codes : les modèles de drift étant un bon compromis, ils y sont utilisés depuis longtemps. Le monde académique (e.g. [ACC⁺08]) a commencé plus récemment à les étudier en utilisant des formules de fermeture pour la vitesse relative non plus issues de l'expérience, mais basées sur des développements asymptotiques des modèles bifluides.

Présentation des modèles intervenant dans la première partie de cette thèse :

Le modèle homogène équilibré avec drift (HEM) de Ghidaglia-Poujade [GP06] est le point de départ de la partie I de cette thèse. Il est lui-même dérivé du modèle bifluide compressible décrit dans la thèse de Mathiaud [Mat06]. Ce modèle suppose que toutes les gouttelettes ont le même rayon (r_{moy}) et qu'elles se sont suffisamment équilibrées pour décrire le fluide de gouttelettes avec une seule vitesse v et une seule énergie E_p . Le modèle bifluide de Mathiaud [Mat06] est constitué de six équations :

3. la plupart sont des modèles 1D

Conservation de la masse :

$$\partial_t(\alpha\rho_g) + \nabla_x \cdot (\alpha\rho_g u_g) = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t((1-\alpha)\rho) + \nabla_x \cdot ((1-\alpha)\rho v) = 0, \quad (2)$$

Conservation de l'impulsion :

$$\partial_t(\alpha\rho_g u_g) + \nabla_x \cdot (\alpha\rho_g u_g \otimes u_g) + \alpha \nabla_x p = - \underbrace{\frac{1}{2m_p}(1-\alpha)\rho_g \rho \pi r^2 C_d |v - u_g| (u_g - v)}_{\text{terme de traînée}}, \quad (3)$$

$$\partial_t((1-\alpha)\rho v) + \nabla_x \cdot ((1-\alpha)\rho v \otimes v) + (1-\alpha)\nabla_x p = \underbrace{\frac{1}{2m_p}(1-\alpha)\rho_g \rho \pi r^2 C_d |v - u_g| (u_g - v)}_{\text{terme de traînée}}. \quad (4)$$

Conservation de l'énergie totale :

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha\rho_g E_g) + \nabla_x \cdot \left(\alpha\rho_g \left(E_g + \frac{p}{\rho_g} \right) u_g \right) + p\partial_t\alpha = \\ - \frac{1}{2m_p}(1-\alpha)\rho_g \rho \pi r^2 C_d |v - u_g| (u_g - v) \cdot v - 4\pi r \lambda Nu (T_g - T_p) \frac{(1-\alpha)\rho}{m_p}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \partial_t((1-\alpha)\rho E_p) + \nabla_x \cdot \left((1-\alpha)\rho \left(E_p + \frac{p}{\rho} \right) v \right) + p\partial_t(1-\alpha) = \\ \frac{1}{2m_p}(1-\alpha)\rho_g \rho \pi r^2 C_d |v - u_g| (u_g - v) \cdot v + 4\pi r \lambda Nu (T_g - T_p) \frac{(1-\alpha)\rho}{m_p}. \end{aligned} \quad (6)$$

Équations d'état

$$p = P_1(\rho_g, e_g) = P_2(\rho, e), \quad (7)$$

$$T_g = T_1(\rho_g, e_g), \quad (8)$$

$$T_p = T_2(\rho, e), \quad (9)$$

$$e_g = E_g - \frac{1}{2}|u_g|^2, \quad (10)$$

$$e = E_p - \frac{1}{2}|v|^2. \quad (11)$$

Dans ces équations, α représente la fraction volumique de gaz ($1 - \alpha$ celle de fluide de gouttelettes), ρ_g (resp. ρ) la densité de fluide de gaz (resp. du fluide de gouttelettes). u_g (resp. v) est la vitesse du gaz (resp. du fluide de gouttelettes), E_g (resp. E_p) est l'énergie totale de gaz (resp. du fluide de gouttelettes). T_g (resp. T_p) est la température du gaz (resp. du fluide de gouttelettes). Enfin des quantités spécifiques qui sont spécifiquement liées au fluide de gouttelettes : r est le rayon moyen des gouttelettes, m_p est la masse des gouttelettes. De plus, C_d est le coefficient de traînée qui mesure l'intensité des échanges d'impulsion entre les phases. A noter que le modèle bifluide se place à un temps où les gouttelettes se sont suffisamment équilibrées entre elles (en vitesse et énergie) pour qu'on puisse les décrire avec des quantités moyennes que sont leur densité moyenne $\rho(x, t)$ et leur vitesse moyenne $v(t, x)$. Ce système d'équations (1)-(11) constitue le modèle bifluide isobare qui sert à dériver le modèle homogène équilibré HEM.

C'est un modèle où l'on suit l'évolution de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie (totale ou interne) du gaz, ainsi que l'évolution des mêmes quantités pour le fluide de gouttelettes. Dans chacune des équations de conservation de l'impulsion (3)-(4) ou de l'énergie des deux fluides (5)-(6), on a des termes qui résultent de l'interaction entre le gaz et les gouttelettes : on prend en compte à la fois les effets de la vitesse relative entre les deux fluides via la force de traînée ainsi que des termes d'échange de chaleur (dans les équations d'énergie).

Le modèle de mélange homogène équilibré que l'on va décrire ci-dessous utilise le terme de traînée apparaissant dans les équations d'impulsion (3)-(4) exprimé de manière différente. Par définition de la densité d'une gouttelette ($\rho_p = \frac{m_p}{\frac{4}{3}\pi r^3}$), et comme l'hypothèse sous jacente au modèle bifluide (1)-(11) est que toutes les gouttelettes ont la même masse, cela implique que toutes les gouttelettes ont aussi le même rayon r et on a $\rho_p = \rho = \frac{m_p}{\frac{4}{3}\pi r^3}$. Ceci nous permet de réexprimer le terme de force de traînée des équations d'impulsion (3)-(4) comme :

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2m_p}(1 - \alpha)\rho_g\rho\pi r^2 C_d |u_g - v|(u_g - v) \\ & = -\frac{3}{8r}\rho_g(1 - \alpha)C_d |u_g - v|(u_g - v). \end{aligned} \tag{12}$$

Le modèle de mélange homogène équilibré de Ghidaglia-Poujade (dérivé de ce modèle bifluide avec le terme de traînée réécrit sous la forme (12)) est quant à lui constitué de deux équations de masse (une sur la densité moyenne ρ de mélange et une sur la concentration relative c_r), d'une équation sur la vitesse moyenne u , d'une équation sur l'énergie totale moyenne E ainsi que d'une relation prédisant la vitesse relative u_r entre les phases. A ces équations s'ajoutent des relations de

fermeture :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (13)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}(\rho(c_r u + \frac{1-c_r^2}{2} u_r)) = 0, \quad (14)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho(u \otimes u + \frac{1-c_r^2}{4} u_r \otimes u_r)) + \nabla p = \rho g, \quad (15)$$

$$\partial_t(\rho E) + \operatorname{div}(\rho H u + \rho(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r) \frac{1-c_r^2}{4} u_r) = \rho u \cdot g, \quad (16)$$

avec la relation permettant de prédire la vitesse relative :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r}} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}, \quad (17)$$

ainsi que :

$$c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}, \quad (18)$$

$$H = E + \frac{p}{\rho}, \quad (19)$$

$$e_r = e^-(\rho^-, T) - e^+(\rho^+, T), \quad (20)$$

$$\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}, \quad (21)$$

$$\frac{r^*}{C^*} = \frac{8}{3} \frac{r_{moy}}{C_d}, \quad (22)$$

$$\theta_\rho = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+}. \quad (23)$$

La pression p du mélange est connue de manière implicite via la résolution du système de quatre équations suivantes :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \quad (24)$$

$$p = P^+(\rho^+, T) = P^-(\rho^-, T), \quad (25)$$

$$e = c^+ e^+(\rho^+, T) + c^- e^-(\rho^-, T), \quad (26)$$

avec T la température unique du mélange et H l'enthalpie totale du mélange. Dans ce système apparaissent les quantités relatives à chaque phase de fluide lourd (+) et léger (-) composant le mélange : ρ^- (correspondant à ρ_g du système bifluide précédent) est la densité du fluide léger, ρ^+ (correspondant à ρ dans le système bifluide précédent) est celle du fluide lourd. c^\pm sont les concentrations massiques de chaque phase, r_{moy} est le rayon moyen des gouttelettes, C_d est toujours le coefficient de traînée des gouttelettes. De plus, $e^\pm(\rho^\pm, T)$ sont les deux fonctions définissant l'énergie de chaque fluide ($P^\pm(\rho^\pm, T)$ celles de la pression).

0.1 Introduction à la première partie : le modèle de mélange homogène équilibré

L'objectif principal de la première partie de thèse était d'implémenter au sein d'un code d'étude un modèle homogène équilibré avec relation de drift afin de pouvoir simuler des écoulements où les vitesses entre les deux phases ont déjà commencé le processus d'équilibrage (sans utiliser de modèles de sprays ou bifluides trop coûteux). Pour ce faire, on disposait du papier de Ghidaglia-Poujade [GP06] présenté à la section précédente qui décrivait un modèle homogène de drift (13)-(16) composé de deux équations portant sur la masse, une sur l'impulsion moyenne du mélange et une sur l'énergie totale moyenne du mélange, avec une formule de fermeture sur la vitesse relative u_r (17). Dans le code d'étude, il existait déjà un modèle de mélange isobare-isotherme sans drift (i.e. dans lequel on suppose que les deux fluides sont à la même vitesse) et le modèle à implémenter devait s'articuler autour du modèle préexistant.

0.1.1 Le modèle homogène équilibré avec drift (HEM) (chapitre 1)

La première partie du travail de ce chapitre a consisté à adapter la dérivation du modèle HEM de Ghidaglia-Poujade afin d'obtenir un système d'équations de type homogène équilibré avec drift qui inclut une équation sur l'énergie interne moyenne et non pas sur l'énergie totale moyenne ; ceci pour être en accord avec les exigences du code d'étude. En effet, ce code d'étude possède des boîtes d'équations d'état définies à partir de l'énergie interne et non totale du mélange. Le modèle que l'on a obtenu est le suivant :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (27)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}\left(\rho(c_r u + \frac{1 - c_r^2}{2} u_r)\right) = 0, \quad (28)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}\left(\rho(u \otimes u + \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \otimes u_r)\right) + \nabla p = \rho g, \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) = & -\operatorname{div}\left(\rho(e u + e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r)\right) - p(\operatorname{div} u + \operatorname{div}\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r\right)) \\ & + F_D \cdot u_r, \end{aligned} \quad (30)$$

composé d'une équation portant sur la densité moyenne ρ , une sur la concentration relative c_r , une sur la vitesse moyenne u ainsi qu'une sur l'énergie interne e du mélange. A ces quatre équations (27)-(30) vient s'ajouter la relation sur la vitesse relative entre les fluides u_r :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r}} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}, \quad (31)$$

qui est celle présentée dans l'article de [GP06]. Dans ce modèle à quatre équations, l'équation en vitesse manquante a été remplacée par l'équation (31) et

l'équation en énergie manquante est remplacée par l'hypothèse isotherme entre les deux fluides (on verra par la suite que cette hypothèse est justifiée dans le cadre où l'on veut employer ce modèle (sous-section 1.1.2)). On introduit la concentration de chaque fluide c^\pm à partir de la concentration relative c_r entre les phases :

$$c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}. \quad (32)$$

Dans le système (27)-(30), il apparaît les quantités relatives suivantes :

$$e_r = e^-(\rho^-, T) - e^+(\rho^+, T), \quad (33)$$

$$\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}, \quad (34)$$

et la force de traînée du problème est définie par :

$$F_D = \rho \theta_\rho \frac{3C_d}{8r_{moy}} \frac{1-c_r^2}{4} |u_r| u_r, \quad (35)$$

$$\text{avec } \theta_\rho = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+}, \quad (36)$$

r_{moy} est le rayon moyen (fixé une fois pour toute) des gouttelettes. C_d est le coefficient de traînée des gouttelettes (c'est une fonction dépendant du nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{2r_{moy}\rho^- |u_r|}{\eta},$$

où η est la viscosité dynamique (fixée elle aussi une fois pour toute) du gaz). A ces équations vient s'ajouter la résolution d'un système qui permet, à partir de la connaissance de c_r , ρ et e , d'obtenir la pression p du mélange ainsi que les quantités spécifiques à chaque fluide : ρ^\pm , ainsi que e^\pm . La pression est connue de manière implicite via la résolution du système de quatre équations suivantes :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \quad (37)$$

$$p = P^+(\rho^+, T) = P^-(\rho^-, T), \quad (38)$$

$$e = c^+ e^+(\rho^+, T) + c^- e^-(\rho^-, T). \quad (39)$$

La seconde moitié de ce chapitre (section 1.2) sera consacrée à la justification de l'emploi de la formule pour u_r (31) présente dans [GP06]. On commencera par donner les hypothèses physiques à l'origine d'une telle formule (sous-section 1.2.1). Puis, on expliquera l'obtention de la formule de u_r (31) comme dans les papiers de [GD07, Gal09] *via* un développement d'une équation vérifiée par u_r (1.179) en supposant les termes de traînée prépondérants. Enfin dans une dernière sous-section (sous-section 1.2.3), on va préciser l'obtention de u_r (31) présente dans le papier [GP06] à partir d'un modèle de sous-maille dans lequel on résout une équation en "zoomant" sur une maille de discrétisation. Dans ce chapitre, on verra que la formule obtenue pour u_r (31) est directement liée à la forme du terme de traînée présente dans le modèle bifluide initial (1)-(6).

0.1.2 Schéma numérique utilisé pour la discrétisation du modèle HEM dans le code d'étude (chapitre 2)

L'implémentation du modèle HEM avec une équation sur l'énergie interne moyenne devait aussi se faire en utilisant les outils numériques préexistants, à savoir l'emploi d'un schéma numérique de type Lagrange-projection de Woodward-Colella [WC84]. En effet dans le code d'étude, la discrétisation des équations de mélange homogène équilibré sans drift, i.e. avec une unique vitesse moyenne de mélange, était déjà présente. Ces équations s'écrivaient :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (40)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u \otimes u) + \nabla p = 0, \quad (41)$$

$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e u) + p(\operatorname{div} u) = 0, \quad (42)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}(\rho c_r u) = 0. \quad (43)$$

Ainsi, on peut voir le modèle HEM (27)-(30) comme une extension du modèle de mélange classique (40)-(43), dans laquelle on autorise la vitesse relative u_r à ne pas être nulle. L'idée a donc été de construire un schéma numérique autour de la discrétisation préexistante dans le code d'étude des équations de mélange à l'équilibre en vitesse (40)-(43) (que l'on note mélange classique par la suite).

Dans la sous-section 2.1.2, on décrit le schéma BBC que l'on a mis en place pour le modèle HEM (noté schéma BBC-HEM), en particulier les étapes supplémentaires nécessaires ainsi que l'ajout de termes supplémentaires dans les discrétisations déjà existantes en vitesse u et en énergie e . On se restreint dans la présentation à la description du cas $1D$ bien que dans le code d'étude la discrétisation ait bien été effectuée pour le cadre $2D$. Dans la section 2.2, on s'attache à vérifier que la partie lagrangienne du schéma BBC original (noté schéma BBC classique) de Woodward-Colella [WC84] était bien d'ordre 2 en espace et en temps (en $1D$) grâce à la fois à une double discrétisation temporelle des équations (40)-(43) et à l'utilisation d'un maillage décalé (les vitesses sont définies aux cloisons et toutes les autres quantités le sont au centre des mailles). On s'est concentré sur la phase lagrangienne du schéma et on a travaillé sous condition CFL, à savoir : $\Delta t = O(\Delta x)$. Le résultat obtenu est présenté sous la forme du Théorème 2.2.4.

Dans la dernière section (section 2.3), on a souhaité regarder si le schéma BBC-modifié pour les équations du modèle HEM (27)-(35) était encore d'ordre 2. Il s'est avéré que le schéma BBC-modifié n'était en fait pas d'ordre 2 pour l'équation de concentration relative c_r (Théorème 2.4.1), mais restait consistant (i.e. d'ordre 1) avec les équations du modèle (27)-(35)

0.1.3 Analyse du modèle HEM (chapitre 3)

Dans ce chapitre, on étudie les propriétés du modèle HEM obtenu au chapitre 1 (27)-(39). Dans la première section de ce chapitre (section 3.1), on considère un écoulement barotrope (i.e. la pression ne dépend que de la densité) qui permet de négliger dans (27)-(39) la dernière équation et de simplifier le problème.

On commence par supposer que la vitesse relative u_r est une constante. L'étude réalisée dans la sous-section 3.1.1 montre que le modèle HEM est hyperbolique sous les mêmes conditions que le modèle de mélange classique (i.e. sans vitesse relative). Cette section comprend ensuite une étude dans un cadre où u_r dépend d'une formule simplifiée faisant intervenir cette fois-ci le gradient de pression : le système présentant un caractère en partie parabolique, on ne s'intéresse plus à son hyperbolicité, mais on étudie son comportement en linéarisant autour d'un état constant. La seconde section (section 3.2) permet à partir d'un adimensionnement des équations (27)-(39) de montrer que lorsque l'on fait tendre r_{moy} vers 0 (et donc u_r vers 0 également), le système HEM dégénère vers le modèle de mélange classique (sans vitesse relative), propriété que l'on vérifiera numériquement au chapitre suivant (chapitre 4), lors de simulations effectuées avec le code BBC-HEM décrit au chapitre 2 et implémenté au sein du code d'étude.

0.1.4 Simulations effectuées avec la composante BBC-HEM du code d'étude (chapitre 4)

Ce chapitre va permettre de comparer les résultats obtenus avec le modèle HEM implémenté durant cette thèse au sein du code d'étude (code BBC-HEM) et deux autres codes d'études du CEA : un modèle de mélange (mêmes équations que le modèle HEM (27)-(39) mais avec la vitesse relative u_r mise à 0, équations (40)-(43)), ainsi qu'un modèle gaz-particules de type spray (ce modèle sera décrit brièvement à la section 0.2).

On y présente trois simulations réalisées avec de l'eau dans de l'air : la première expérience (section 4.1) permet de vérifier que le code réagit à une situation instable de type Rayleigh-Taylor dans laquelle on dispose un fluide lourd au dessus d'un fluide léger avec une frontière imparfaite. Le cas-test suivant permet de constater en faisant tendre u_r vers 0 (en agissant sur le rayon des gouttelettes) que le modèle HEM dégénère effectivement vers le modèle de mélange classique (section 3.2). Enfin dans la dernière partie, on fait évoluer des gouttelettes d'eau dans un environnement où elles sont soumises à l'action conjointe du vent qui les pousse latéralement et de la gravité. Les résultats obtenus sont comparés qualitativement à ceux obtenus avec le code du CEA simulant un modèle de type spray, pour lequel on considère une initialisation comparable.

0.2 Partie II : un modèle simplifié de type BGK pour résoudre les collisions entre les gouttelettes

La seconde partie de ce manuscrit a été développée pour répondre à un autre besoin du CEA. Contrairement à la première partie, on se place à un temps de simulation beaucoup plus court et pour lequel l'équilibre des gouttelettes conduisant à une vitesse moyenne et une énergie interne moyenne commune, n'est pas atteint. Il n'est alors plus question de considérer les gouttelettes comme un fluide, il faut les suivre à une échelle plus fine que celle obtenue avec un

modèle bifluide. Les modèles utilisés à cette échelle sont des modèles de type sprays [O'R81, Duk80, Mat06] pour lesquels les gouttelettes sont suivies à l'aide d'une équation d'évolution sur une fonction f appelée densité de probabilité des gouttelettes. Chaque gouttelette possède sa position x , sa propre vitesse v , sa propre énergie e et l'évolution en temps des gouttelettes se fait en écrivant une équation de type Vlasov-Boltzmann :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f\Gamma) + \nabla_e (f\Phi) = Q(f, f), \quad (44)$$

où $Q(f, f)$ est un terme qui modélise l'effet qu'ont les collisions sur les gouttelettes, le terme en ∇_x est un terme de transport (advection) des gouttelettes, le terme en ∇_v est lié à la force de traînée, et celui en ∇_e est un terme d'échange d'énergie interne.

Il existe plusieurs sortes de systèmes de sprays (cf. [O'R81, Mat06]), le modèle que l'on considère est de type sprays épais : la fraction volumique des gouttelettes $(1 - \alpha)$ joue aussi un rôle dans le comportement du système. Les sprays considérés dans toute la suite sont supposés monodispersés : toutes les gouttelettes ont le même rayon r et donc la même masse m . Les modèles de sprays sont des modèles qui couplent des équations hydrodynamiques pour le gaz (45-47)⁴ (Euler dans notre cas, i.e. on ne prend pas en compte les effets de la viscosité), à une équation de type Vlasov-Boltzmann pour suivre l'évolution des gouttelettes (48). Dans les équations du gaz, il apparaît des termes supplémentaires qui dépendent de moments de la fonction de répartition des gouttelettes f qui modélisent l'effet des gouttelettes sur le gaz environnant. On rappelle ici le jeu d'équations correspondant aux sprays épais [Mat06] :

$$\partial_t(\alpha\rho_g) + \nabla_x \cdot (\alpha\rho_g v_g) = 0, \quad (45)$$

$$\partial_t(\alpha\rho_g v_g) + \nabla_x \cdot (\alpha\rho_g v_g \otimes v_g) + \nabla_x p = - \iint_{v,e} m\Gamma f dvde, \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha\rho_g E_g) + \nabla_x \cdot \left(\alpha\rho_g \left(E_g + \frac{p}{\rho_g} \right) v_g \right) + p\partial_t \alpha = \\ \iint_{v,e} - \left(m\Gamma + \frac{m}{\rho_p} \nabla_x p \right) \cdot v f dvde - \iint_{v,e} m\phi f dvde, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f\Gamma) + \partial_e (f\phi) = Q(f, f), \quad (48)$$

4. ce sont des jeux de trois équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement ainsi que de l'énergie

$$\alpha = 1 - \frac{4}{3}\pi r^3 \iint_{v,e} f dvde, \quad (49)$$

$$m\Gamma = -\frac{m}{\rho_p} \nabla_x p - D_p(v - v_g), \quad (50)$$

$$m\phi = 4\pi r \lambda Nu(T_g - T_p), \quad (51)$$

$$e_g = E_g - \frac{1}{2}|v_g|^2, \quad (52)$$

$$T_g = T_1(\rho_g, e_g), \quad (53)$$

$$p = P_1(\rho_g, e_g), \quad (54)$$

$$T_p = T_2(e). \quad (55)$$

Les équations d'évolution (45-47) font intervenir $\alpha := \alpha(t, x)$, fraction de volume du gaz, $p := p(t, x)$ pression commune au gaz et à la phase dispersée, $\rho_g := \rho_g(t, x)$, densité du gaz, $v_g := v_g(t, x)$, vitesse du gaz, $e_g := e_g(t, x)$ énergie interne du gaz, $T_g := T_g(t, x)$ température du gaz, et $E_g := E_g(t, x)$, énergie totale du gaz. Les équations (50) et (51) représentent respectivement la force de traînée et les termes d'échange d'énergie. Ces deux termes font apparaître des quantités qu'il reste à définir : le nombre de Prandtl Pr , une quantité relative au gaz, supposée constante, et que l'on définit à l'aide de trois grandeurs :

$$\eta : \text{viscosité dynamique du gaz}, \quad (56)$$

$$\lambda : \text{chaleur spécifique du gaz à pression constante}, \quad (57)$$

$$C : \text{chaleur spécifique du gaz à pression constante}, \quad (58)$$

$$\text{et ainsi, on obtient : } Pr = \frac{\eta C}{\lambda} : \text{Nombre de Prandtl}. \quad (59)$$

Enfin, il reste à définir une quantité relative au couplage entre les deux systèmes :

$$Re = \frac{2r\rho_g|v-v_g|}{\eta} : \text{Nombre de Reynolds}, \quad (60)$$

où r est le rayon des gouttelettes (identique car on considère des sprays monodispersés) et v est la vitesse d'une gouttelette p . Pour la phase dispersée, on note aussi m la masse d'une gouttelette, e son énergie interne, ρ_p sa densité ($\rho_p = \frac{m}{\frac{4}{3}\pi r^3}$) ainsi que T_p sa température. Ensuite, on définit le nombre de Nusselt qui dépend du nombre de Prandtl et du nombre de Reynolds :

$$Nu = 1 + 0.3Re^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}}, \quad (61)$$

et le terme de force de traînée :

$$D_p = \frac{1}{2}\rho_g\pi r^2 C_d |v - v_g|, \quad (62)$$

où C_d est le coefficient de traînée. Lorsque le nombre de Reynolds n'est pas trop important, on peut donner une loi simplifiée pour la traînée (on verra par la suite (formule (2.78)) une loi plus réaliste pour le système HEM, [BDM03]) :

$$C_d = \frac{24}{Re}. \quad (63)$$

Pour plus d'informations sur les sprays, on pourra consulter par exemple la thèse de O'Rourke [O'R81] et [Duk80]. Enfin, le système est fermé par les équations d'état du gaz.

0.2.1 Modèle de type BGK pour les collisions inélastiques où les échanges d'énergie interne sont pris en compte

0.2.1.1 Résolution du système de sprays épais (45)-(55)

Au sein du code d'étude [Bar04b,Mat06], un splitting directionnel est utilisé pour résoudre ces équations : on effectue d'abord la résolution du système (45)-(55) en ne prenant en compte que les termes de transport dans l'équation (48) (grâce à une méthode particulière (cf. [Bir94], [LPS98])); ensuite, une seconde étape consiste à résoudre dans chaque maille du domaine de calcul le noyau de collision, i.e. l'équation de Boltzmann homogène :

$$\partial_t f = Q(f, f), \tag{64}$$

où f est la fonction de répartition qui ne dépend plus que du temps t , de la vitesse v et de l'énergie e d'une gouttelette. Résoudre cette étape est coûteux numériquement : en effet les simulations réalisées se placent dans un contexte fortement collisionnel : la distance moyenne parcourue par une gouttelette avant sa prochaine collision est faible devant la longueur caractéristique de l'écoulement (i.e. le nombre de Knudsen est faible) et il est nécessaire de limiter au maximum le temps de calcul passé à simuler les collisions dans chaque maille afin de rendre le code de spray plus efficace. L'objectif de cette partie était d'obtenir un modèle simplifié permettant de reproduire l'effet des collisions sur le système sans résoudre l'équation (64). La plupart des modèles simplifiés de cette équation existants (cf. [AS04, San03, GS99],...) ne prennent pas en compte les échanges d'énergie interne au cours des collisions.

0.2.1.2 Description du noyau de collision

Dans la suite, on s'intéresse uniquement à l'équation de Boltzmann homogène (64). Le noyau de collision $Q(f, f)$ modélise l'effet des collisions binaires : c'est un noyau quadratique. On considère des collisions inélastiques (i.e. les gouttelettes perdent de l'énergie cinétique au cours des collisions) et échangent aussi de l'énergie interne. L'importance de la perte d'énergie cinétique est modélisée par un paramètre dit paramètre d'inélasticité [Mat06] : γ ($0 \leq \gamma \leq 1$) (plus γ est petit, plus la perte d'énergie cinétique est grande) et les échanges d'énergie interne sont mesurés par le paramètre a ($0 \leq a \leq 1$).

On rappelle ici la forme du noyau de collision Q [Vil06] qui est composé d'un terme de gain et d'un terme de perte.

Le noyau de collision modélise l'effet des collisions sur les vitesses et énergies des gouttelettes : à partir des vitesses v, v^* , et des énergies e et e^* de deux

gouttelettes p et p^* après collision, on définit leurs vitesses avant collision :

$${}'v = \frac{v + v^*}{2} - \frac{1 - \gamma}{4\gamma}(v - v^*) + \frac{1 + \gamma}{4\gamma}|v - v^*|\sigma, \quad (65)$$

$${}'v^* = \frac{v + v^*}{2} + \frac{1 - \gamma}{4\gamma}(v - v^*) - \frac{1 + \gamma}{4\gamma}|v - v^*|\sigma, \quad (66)$$

où σ est un vecteur aléatoire : $\sigma \in \mathbb{S}^2$.

Les énergies avant collision s'écrivent comme une combinaison linéaire des énergies après collisions e et e^* dépendant du paramètre d'échange d'énergie a auquel on ajoute l'énergie cinétique perdue au cours de ces collisions.

$${}'e = \frac{2 - a}{2 - 2a}e - \frac{a}{2 - 2a}e^* + \frac{1}{2}\Delta'E_c, \quad (67)$$

$${}'e^* = -\frac{a}{2 - 2a}e + \frac{2 - a}{2 - 2a}e^* + \frac{1}{2}\Delta'E_c, \quad (68)$$

où

$$\Delta'E_c := \frac{1}{2}({}'v^2 + {}'v^{*2} - v^2 - v^{*2}) = \frac{1 - \gamma^2}{8\gamma^2}|v - v^*|^2 - \frac{1 - \gamma^2}{8\gamma^2}|v - v^*|(\sigma \cdot (v - v^*)). \quad (69)$$

Le noyau de collision (de type sphères dures) est une quantité intégrée sur toutes les vitesses et énergies possibles des gouttelettes avant et après collisions. Il fait intervenir le jacobien de la transformation $(v, v^*, e, e^*) \mapsto ({}'v, {}'v^*, {}'e, {}'e^*)$:

$$\begin{aligned} Q(f, f)(v, e) &= \\ &= \int_{v^*} \int_{e^*} \int_{\sigma} \left(J_{(v, v^*, e, e^*) \rightarrow ({}'v, {}'v^*, {}'e, {}'e^*)} \frac{|{}'v - {}'v^*|}{|v - v^*|} f({}'v^*, {}'e^*) f({}'v, {}'e) \right. \\ &\quad \left. - f(v^*, e^*) f(v, e) \right) r^2 |v - v^*| d\sigma dv^* de^* \\ &= \int_{v^*} \int_{e^*} \int_{\sigma} \left(\frac{1}{\gamma^2} \frac{1}{1 - a} f({}'v^*, {}'e^*) f({}'v, {}'e) - f(v^*, e^*) f(v, e) \right) r^2 \underbrace{|v - v^*|}_{:=S(|v - v^*|)} d\sigma dv^* de^*. \end{aligned} \quad (70)$$

Le jacobien de la transformation J est composé d'une partie $(\frac{1}{\gamma^2} \frac{|v - v^*|}{|{}'v - {}'v^*|})$ [Vil06] ainsi que d'une partie correspondant à la prise en compte des échanges d'énergie interne dans les collisions : $(\frac{1}{1 - a})$. La partie en $r^2 |v - v^*|$ correspond à l'hypothèse que les collisions sont de type sphères dures ; dans ce cadre, la probabilité de collisionner de deux gouttelettes est directement liée à leur différence de vitesse : plus les vitesses relatives sont importantes, plus la distance parcourue par les gouttelettes en un temps donné est importante et plus leur probabilité de collisions est grande.

0.2.2 Description de l'article présenté au chapitre 5 de la seconde partie du manuscrit

Cet article permet l'obtention d'un modèle simplifié de l'équation de Boltzmann homogène. A la place de résoudre l'équation :

$$\partial_t f = Q(f, f), \quad (71)$$

on résout une équation simplifiée :

$$\begin{aligned} \partial_t f + \nabla_v \cdot (c_1 f(v - v_{avr})) + \partial_e(c_2 f) + \partial_e(c_3(e - e_{avr})f) \\ + \partial_e(c_4 |v - v_{avr}|^4 \partial_e f) = -\nu(f - f_0), \end{aligned} \quad (72)$$

où v_{avr} est la vitesse moyenne des gouttelettes

$$v_{avr} = \frac{\int_v \int_e f(t, v, e) v dv de}{\int_v \int_e f(t, v, e) dv de}, \quad (73)$$

et e_{avr} est l'énergie interne moyenne des gouttelettes

$$e_{avr} = \frac{\int_v \int_e f(t, v, e) e dv de}{\int_v \int_e f(t, v, e) dv de}, \quad (74)$$

f_0 est une maxwellienne (en tant que fonction de la vitesse v) qui possède les mêmes paramètres que la fonction de distribution des gouttelettes f :

$$f_0(t, v, e) = \left(\frac{1}{2\pi T(t)} \right)^{3/2} e^{-\frac{|v - v_{avr}|^2}{2T(t)}} \int_w f(t, w, e) dw, \quad (75)$$

avec $T(t)$ la température d'agitation thermique des gouttelettes :

$$T(t) = \frac{1}{3} \frac{\int_v \int_e f(t, v, e) |v - v_{avr}|^2 dv de}{\int_v \int_e f(t, v, e) dv de}, \quad (76)$$

et où les c_i , $i = 1, \dots, 4$ et ν sont des paramètres à spécifier.

0.2.2.1 Propriétés imposées au modèle simplifié

On demande d'abord au modèle simplifié (72) de vérifier la conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie totale, à savoir :

$$\frac{d}{dt} \int_v \int_e f dv de = 0, \quad (77)$$

$$\frac{d}{dt} \int_v \int_e f v dv de = 0, \quad (78)$$

$$\frac{d}{dt} \int_v \int_e f \left(\frac{v^2}{2} + e \right) dv de = 0. \quad (79)$$

On va aussi lui demander de reproduire le comportement de moments relatifs à la densité de gouttelettes, moments que l'on choisit pour être représentatifs de l'effet des collisions sur les vitesses et énergies des gouttelettes. On va suivre le

comportement des températures d'agitations directionnelles T_{ij} (80) ainsi que le moment quadratique sur l'énergie $g(t)$ (81) définis par :

$$T_{ij}(t) = \frac{\int_v \int_e f(v_i - v_{iavr})(v_j - v_{javr}) dv de}{\int_v \int_e f dv de} \quad \text{pour } i, j = 1, 2, 3, \quad (80)$$

$$g(t) = \int_v \int_e f m (e - e_{avr})^2 dv de. \quad (81)$$

Les six moments T_{ij} permettent de reproduire la thermalisation en vitesse des gouttelettes ainsi que d'autoriser les échanges directionnels de vitesse, et g permet de suivre la thermalisation progressive en énergie des gouttelettes. Suivre la thermalisation en énergie ainsi que les échanges directionnels en vitesse sont primordiaux pour les applications envisagées au CEA.

Dans l'équation simplifiée (72), la forme des termes a été choisie pour permettre la simulation approchée de l'évolution des moments précédents. Elle est composée de :

- un terme de drift $\nabla_v \cdot (f(v - v_{avr}))$, qui autorise le modèle à perdre de l'énergie cinétique, et modéliser ainsi l'inélasticité des collisions. Pour préserver la conservation de l'énergie totale, on lui ajoute un terme de gain en énergie interne $(\partial_e f)$.
- un terme de relaxation de type BGK [BGK54] utilisant une distribution maxwellienne en terme de vitesse : $-\nu(f - f_0)$, qui prend en compte l'effet homogénéisant des collisions.
- un terme de drift autour d'une énergie interne moyenne, qui permet de prendre en compte les échanges d'énergie interne durant les collisions $\partial_e((e - e_{avr})f)$.
- enfin un terme de diffusion pour l'énergie de type Fokker-Planck $\partial_e(|v - v_{avr}|^4 \partial_e f)$, provenant des échanges d'énergies.

0.2.2.2 Détermination des paramètres c_i , $i = 1, \dots, 4$ et ν

On cherche tout d'abord à obtenir des conditions d'évolution sur les moments (80)-(81) (sous-section 2.2 de l'article). Le noyau de collision n'est en pratique pas utilisé sous sa forme forte (70) mais sous sa forme faible qui donne la valeur de l'intégrale de $Q(f, f)$ contre une fonction test. Ainsi, en intégrant l'équation de Boltzmann homogène (71) contre les fonctions $(v_i - v_{iavr})(v_j - v_{javr})$, $i, j = 1, 2, 3$ ainsi que contre $(e - e_{avr})^2$, on obtient (à l'aide de la forme faible du noyau de collision (Equ. (6) de l'article)) des équations différentielles approchées sur ces moments $T_{ij}(t)$, $i, j = 1, \dots, 3$ et $g(t)$ (Equ. (55)-(58) de l'article).

Dans l'article, deux types de collisions sont envisagées : les collisions de type molécules maxwelliennes pour lesquelles toutes les gouttelettes ont la même probabilité de collisionner ($S(|v - v^*|) = \text{cste}$), et le cadre (plus réaliste) qui nous intéresse réellement : les collisions de type sphères dures pour lesquelles la probabilité de collisionner de deux gouttelettes dépend de leur vitesse relative ($S(|v - v^*|) = |v - v^*|$). Dans le cadre des molécules maxwelliennes, les Equ. (55) à (58) de l'article, obtenues via des intégrations du noyau de collision, sont exactes pour les T_{ii} et approchées pour la quantité g , alors que dans le cadre

sphères dures, il est nécessaire d'approcher la section efficace S par des termes indépendants de v et v^* pour mener à bien les calculs et obtenir des équations approchées. Ceci est l'objectif de la sous-section 2.3 de l'article (qui conduit dans le cas le plus simple à une approximation de la section efficace $|v - v^*|$ par sa moyenne quadratique : $|v - v^*| \approx \sqrt{6T(t)}$).

Les coefficients du modèle simplifié c_1, c_2, c_3, c_4, ν sont choisis pour reproduire le comportement des moments de la solution de l'équation de Boltzmann. En intégrant le modèle simplifié (72) contre les fonctions $(v_i - v_{i_{avr}})(v_j - v_{j_{avr}})$, $i, j = 1, 2, 3$ ainsi que contre $(e - e_{avr})^2$, on obtient des équations différentielles pour les quantités T_{ij} , $i, j = 1, 2, 3$ et $g(t)$, qui dépendent des paramètres c_i , $i = 1, 2, 3$ et de ν . Dans la section 3 de l'article, on obtient les équations sur ces moments (Equ. (73) à (76) de l'article). En comparant aux équations obtenues avec l'équations de Boltzmann homogène (Equ. (55)-(58) de l'article), on obtient tous les coefficients du modèle simplifié :

$$c_1 = \frac{3S_1(t)}{8r} \left[-1 + \frac{\gamma}{2} + \gamma^2 \right] (1 - \alpha), \quad (82)$$

$$c_2 = -\frac{9S_1(t)}{8r} \left[-1 + \frac{\gamma}{2} + \gamma^2 \right] (1 - \alpha) T(t), \quad (83)$$

$$c_3 = -\frac{3S_2(t)}{4r} a(2 - a)(1 - \alpha), \quad (84)$$

$$c_4 = -\frac{S_3(t)}{32r} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha), \quad (85)$$

$$\nu = \frac{3S_1(t)}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha). \quad (86)$$

Les fonctions S_1, S_2, S_3 dépendent du type de collisions choisies.

- Dans le cadre des molécules maxwelliennes (i.e. lorsque $\tilde{S}(|v - v_*|) = S$ est une fonction constante), on prend : $S_1(t) = S_2(t) = S_3(t) = S$;
- Par contre, dans le cadre des sphères dures (i.e. lorsque $\tilde{S}(|v - v_*|) = |v - v_*|$), on prend :

$$S_1 = \sqrt{\frac{3(\tilde{T}_{11}^2 + \tilde{T}_{22}^2 + \tilde{T}_{33}^2) + 2(\tilde{T}_{11}\tilde{T}_{22} + \tilde{T}_{22}\tilde{T}_{33} + \tilde{T}_{11}\tilde{T}_{33})}{9T^2}} \sqrt{6T}, \quad (87)$$

$$S_2 = \frac{4\sqrt{T}}{\sqrt{\pi}}, \quad (88)$$

$$S_3 = \frac{32\sqrt{T}}{5\sqrt{\pi}}, \quad (89)$$

où les températures \tilde{T}_{ii} sont les valeurs propres de la matrice formée des T_{ij} . et $1 - \alpha$ est la fraction volumique de gouttelettes dans le spray :

$$1 - \alpha(t) = \int_v \int_e f(t, v, e) \frac{4}{3} \pi r^3 dvde. \quad (90)$$

0.2.2.3 Validation du modèle

L'objet de la dernière section de l'article (section 4) est de comparer les résultats obtenus grâce au modèle simplifié (72), avec ceux obtenus avec un modèle qui résout directement l'équation de Boltzmann homogène par une méthode particulière de type Monte-Carlo [Bar04b, Mat06] (cette méthode sera résumée brièvement dans le chapitre 6 de cette thèse). Les premiers tests se déroulent avec des coefficients γ et a constants. Avoir construit le modèle simplifié pour des collisions de type molécules maxwelliennes (section efficace constante) permet de valider d'abord notre modèle simplifié (et le code numérique qui lui est attaché) sans prendre en compte les approximations liées à la section efficace de collision. Ensuite, la section suivante (section 4.3) permet de comparer les deux codes avec collisions de type sphères dures et pour lesquelles des approximations sur la section efficace (87)-(88) sont utilisées dans le modèle simplifié. Dans ce cas, on ne dispose d'aucune solution explicite.

Les trois premières figures de l'article (Fig. 1 à 3) comparent (dans le cadre sphères dures) les courbes obtenues avec le modèle qui résout l'équation de Boltzmann homogène avec celles obtenues grâce à notre modèle simplifié pour différentes approximations de la section efficace.

On compare les résultats en suivant l'évolution des moments qui ont permis l'établissement du modèle simplifié, mais aussi d'autres moments. Les résultats que l'on obtient sont très satisfaisants dans le cadre des molécules maxwelliennes, et l'erreur commise (en remplaçant la section efficace de collisions par une formule approchée dans le cadre sphères dures) (Fig. 9 à 14) conduit encore à des résultats de bonne qualité.

Enfin, dans la sous-section 4.4 (Fig. 15 à 18), on considère le cadre plus réaliste dans lequel le paramètre d'inélasticité ainsi que celui lié aux échanges d'énergie dépendent de la vitesse relative (Equ. (99) et (100)). Les résultats liés à la comparaison du modèle simplifié et du modèle collisionnel restent convaincants.

Enfin, cet article est suivi du chapitre 6 qui présente les schémas numériques utilisés dans cette étude.

Première partie

Le modèle de mélange
homogène équilibré (HEM)

Modélisation HEM

Le modèle HEM est un modèle intermédiaire (en degrés de complexité du nombre d'équations à traiter) pour étudier des systèmes à deux phases. Il se situe entre les modèles bifluides isobares à 6 équations et les modèles de mélange homogène à 4 équations qui ne considèrent qu'une seule vitesse et qu'une seule température de mélange. Ce modèle permet de prendre en compte des petites fluctuations de vitesses entre les deux phases via le suivi de la vitesse moyenne de mélange d'une part et d'une solution approchée sur le différentiel de vitesse entre les deux phases d'autre part.

Dans ce chapitre, on s'attache à décrire le modèle de mélange homogène équilibré utilisé dans toute cette première partie. Une grande part de ce chapitre consiste à détailler le modèle établi dans [GP06]. Le modèle devant être implémenté dans le code d'étude, il a été nécessaire de l'adapter à nos besoins avant de l'utiliser. En effet, ce modèle HEM contenait une équation pour l'énergie totale mais le code d'étude utilise quant à lui des équations d'état nécessitant une équation sur l'énergie interne. Dans [GP06], on part d'un système bifluide isobare décrit dans [Mat06] contenant 6 équations portant sur la masse, la vitesse et l'énergie totale de chaque fluide (1.9)-(1.11). De ce modèle, on obtient (par des manipulations algébriques en définissant de nouvelles grandeurs moyennées et relatives sur les fluides (1.29)-(1.40)) cinq nouvelles équations sur ces nouvelles quantités dont une sur l'énergie totale moyenne du mélange. Notre travail a consisté à repartir de ces cinq équations et d'en déduire par d'autres manipulations algébriques une équation sur l'énergie interne moyenne qui est en adéquation avec les besoins du code. Ensuite, on va employer les mêmes hypothèses simplificatrices que [GP06] pour obtenir un modèle HEM contenant une équation pour l'énergie interne (sous-section 1.1.5). En particulier, on supposera que les deux fluides sont à la même température et que leur vitesse relative suit une relation simplifiée (1.123).

Dans la suite de ce chapitre, on va d'abord préciser le modèle bifluide qui sert à dériver les équations HEM (sous-section 1.1.1), ensuite, dans la sous-section suivante 1.1.2, on va motiver l'intérêt pour le CEA de pouvoir utiliser un modèle qui ne soit pas trop complexe en termes de nombres d'équations mais qui garde quand même suffisamment de précision pour tenir compte des déséquilibres en vitesse existants entre les phases. La sous-section suivante 1.1.4 est consacrée à l'obtention de l'équation sur l'énergie interne moyenne et l'écriture du système final HEM (contenant l'équation pour l'énergie interne) via l'utilisation de deux approximations (sous-section 1.1.5). Enfin, dans la dernière section, on va justi-

fier dans quel cadre l'emploi de la solution approchée utilisée dans la sous-section 1.1.3 est justifié (section 1.2). On répertorie ici toutes les grandeurs dont on aura besoin dans ce chapitre :

Symbole notation spray	Symbole notation bifluide	Grandeur physique associée
ρ_p	ρ^+	densité du fluide lourd +
ρ_g	ρ^-	densité du fluide léger -
α_p	α^+	fraction volumique du fluide lourd +
α_g	α^-	fraction volumique du fluide léger -
u_p	u^+	vitesse du fluide lourd +
u_g	u^-	vitesse du fluide léger -
E_p	E^+	énergie totale du fluide lourd +
E_g	E^-	énergie totale du fluide léger -
e_p	e^+	énergie interne massique du fluide lourd +
e_g	e^-	énergie interne massique du fluide léger -
$p = P_p = P_g$	$p = P^+ = P^-$	pression unique des deux fluides
	$H^+ := E^+ + \frac{P}{\rho^+}$	enthalpie totale du fluide lourd +
	$H^- := E^- + \frac{P}{\rho^-}$	enthalpie totale du fluide léger -
c_p	$c^+ = \frac{\alpha^+ \rho^+}{\alpha^+ \rho^+ + \alpha^- \rho^-}$	titre massique de fluide lourd +
c_g	$c^- = \frac{\alpha^- \rho^-}{\alpha^+ \rho^+ + \alpha^- \rho^-}$	titre massique de fluide léger -
	$\theta_\rho = \frac{\alpha^+}{\alpha^-} + \frac{\rho^+}{\rho^-} = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+}$	grandeur sans dimension
T_p	T^+	température du fluide lourd +
T_g	T^-	température du fluide léger -
H_p	H^+	enthalpie du fluide lourd +
H_g	H^-	enthalpie du fluide léger -

A partir de ces grandeurs spécifiques aux deux fluides, des grandeurs moyennes et relatives sont définies :

Grandeurs moyennes ou relatives	Définition	Nom
ρ	$:= \alpha^+ \rho^+ + \alpha^- \rho^-$	densité moyenne du mélange
u	$:= c^+ u^+ + c^- u^-$	vitesse moyenne du mélange
E	$:= c^+ E^+ + c^- E^-$	énergie moyenne du mélange
e	$:= c^+ e^+ + c^- e^-$	énergie interne moyenne du mélange
H	$:= c^+ H^+ + c^- H^-$	enthalpie moyenne du mélange
c_r	$:= c^- - c^+$	concentration relative entre les deux fluides
u_r	$:= u^- - u^+$	vitesse relative entre les deux fluides
e_r	$:= e^- - e^+$	énergie interne relative entre les deux fluides
$\frac{1}{\rho_r}$	$:= \frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}$	différence des inverses de densité
T	$T = T^+ = T^-$	température du mélange

On aura aussi besoin de quantités apparaissant dans les termes liés aux échanges entre les phases dans le modèle bifluide initial (1.9)-(1.14) :

Grandeurs moyennes ou relatives	Nom
λ	conductivité thermique du gaz
η	viscosité dynamique du gaz
r_{moy}	rayon moyen des gouttelettes
$Re = \frac{2r_{moy}\rho^- u^- - u^+ }{\eta}$	nombre de Reynolds
$Nu = 1 + 0.3Re^{1/2}Pr^{1/3}$	nombre de Nusselt

FIGURE 1.1 – grandeurs physiques

1.1 Le modèle de mélange homogène équilibré

1.1.1 Modèle bifluide de départ

On part du système bifluide obtenu par Mathiaud [Mat06] comme limite d'un système de sprays constitué de gouttelettes compressibles avec collisions inélastiques. On a rappelé le jeu d'équations de ce modèle dans l'introduction (1)-(6). Ce système est écrit dans [Mat06] en fonction des grandeurs du gaz et des gouttelettes et correspond aux notations des systèmes de sprays. On va dorénavant utiliser les notations courantes des modèles bifluides : on utilisera un $+$ en exposant pour désigner une grandeur correspondant au fluide lourd (de gouttelettes) et un $-$ lorsque la valeur est attachée au fluide léger. Par exemple pour la densité de fluide lourd (gouttelettes) et de fluide léger (gaz), on passe des notations ρ_g, ρ_p de [Mat06] à ρ^- et ρ^+ .

Remarque 1.1.1 *La force de traînée prise en compte dans le modèle bifluide rend ce modèle utilisable uniquement pour des fractions volumiques de gouttelettes pas trop grandes (typiquement n'excédant pas 0.1). En effet ce modèle bifluide est dérivé d'un modèle de sprays [Bar04b, Mat06] dont la traînée a été obtenue sous cette même hypothèse.*

Le système bifluide (réécrit avec les notations ρ^+, ρ^- etc.) est un système à 6 équations (2 équations de conservation de la masse, 2 de conservation de la quantité de mouvement et 2 de conservation de l'énergie totale) (1)-(6) (auxquelles on ajoute les effets de la gravité dans les équations d'impulsions et d'énergies) :

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm) + \text{div}(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm) &= 0, \\ \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm) + \text{div}(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm \otimes u^\pm) + \alpha^\pm \nabla p &= \pm \theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{\alpha^+ \alpha^- \rho^+ \rho^-}{\rho} |u^- - u^+| (u^- - u^+) \\ &\quad + \alpha^\pm \rho^\pm g, \\ \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm E^\pm) + \text{div}(\alpha^\pm \rho^\pm H^\pm u^\pm) + p \partial_t \alpha^\pm &= \pm Q_E + \alpha^\pm \rho^\pm g \cdot u^\pm, \end{aligned}$$

où on rappelle que l'on a noté les grandeurs relatives au fluide de gouttelettes (lourd) avec un $+$ en exposant et celles relatives au gaz (fluide léger) avec un $-$. Le modèle bifluide a donc 7 inconnues :

- ρ^\pm : Densité du fluide \pm ,
- u^\pm : Vitesse du fluide \pm ,

- E^\pm : Energie totale du fluide \pm ,
- α^\pm : Fraction volumique de fluide \pm (en fait une seule inconnue grâce à la relation $\alpha^+ + \alpha^- = 1$).

Comme on dispose de 6 équations pour 7 inconnues, il est nécessaire de rajouter une relation de fermeture pour fermer le système ; ce qui est fait via l'hypothèse isobare :

$$p = P^+ = P^-, \quad (1.1)$$

et aux lois d'état précisées dans la suite. On définit maintenant à l'aide de ces inconnues les grandeurs qui apparaissent dans les équations du système bifluide :

$$\theta_\rho := \frac{\alpha^+}{\alpha^-} + \frac{\rho^-}{\rho^+}, \quad (1.2)$$

$$H^\pm := E^\pm + \frac{p}{\rho^\pm}, \quad (1.3)$$

où θ_ρ est un nombre sans dimension, H^\pm est l'enthalpie totale spécifique du fluide \pm . Le rapport $\frac{C^*}{r^*}$ est proportionnel au rapport entre C_d et r_{moy} :

$$\frac{C^*}{r^*} = \frac{3}{8} \frac{C_d}{r_{moy}}, \quad (1.4)$$

où C_d est le coefficient de traînée et r_{moy} est le rayon moyen des gouttelettes. Dans la suite, le rayon moyen des gouttelettes r_{moy} est supposé constant, par contre le coefficient de traînée dépend de la vitesse relative entre les deux fluides via sa dépendance au nombre de Reynolds et sera défini précisément ultérieurement (2.78). La quantité Q_E est le terme source qui représente les échanges d'énergie entre les deux phases et qui dépend de la température T^\pm de chacun des 2 fluides (5)-(6) (pour plus de détails, cf. [Mat06]) :

$$Q_E = \frac{3}{r^2} \alpha^+ \lambda Nu (T^- - T^+), \quad (1.5)$$

où les quantités physiques λ (constant) et Nu (dépendant de la vitesse relative) sont rappelées dans la figure 1.1. Au système précédant, on rajoute les équations d'état suivantes :

$$p = P^\pm(\rho^\pm, e^\pm), \quad (1.6)$$

$$T^\pm = T^\pm(\rho^\pm, e^\pm), \quad (1.7)$$

qui dépendent de l'énergie interne spécifique e^\pm de chacun des 2 fluides. On complète le système par la relation liant e^\pm à l'énergie totale E^\pm :

$$e^\pm = E^\pm - \frac{1}{2} |u^\pm|^2. \quad (1.8)$$

Notre système de départ est donc un système bifluide isobare constitué des 6 équations de conservation ainsi que de 4 équations d'état, que l'on écrit en

totalité ci-dessous :

$$\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm) + \text{div}(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm) = 0, \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm) + \text{div}(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm \otimes u^\pm) + \alpha^\pm \nabla p &= \alpha^\pm \rho^\pm g \\ \pm \theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{\alpha^+ \alpha^- \rho^+ \rho^-}{\rho} |u^- - u^+| (u^- - u^+), \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm E^\pm) + \text{div}(\alpha^\pm \rho^\pm H^\pm u^\pm) + p \partial_t \alpha^\pm = \pm Q_E + \alpha^\pm \rho^\pm g \cdot u^\pm, \quad (1.11)$$

$$p = P^\pm(\rho^\pm, e^\pm), \quad (1.12)$$

$$T^\pm = T^\pm(\rho^\pm, e^\pm), \quad (1.13)$$

$$e^\pm = E^\pm - \frac{1}{2} |u^\pm|^2, \quad (1.14)$$

et que l'on complète par les définitions des grandeurs intervenant dans les équations : (1.2), (1.3), (1.4), (1.5).

1.1.2 Estimations des temps d'équilibrage

On va s'efforcer ici de donner un ordre de grandeur des temps typiques pour lesquels on peut utiliser les différents modèles pour décrire des systèmes de gouttelettes évoluant dans un gaz. Différents équilibres vont se produire dans un tel système : d'abord une homogénéisation des vitesses et énergies des gouttelettes, qui va nous autoriser à utiliser le modèle bifluide (1.9)-(1.14) puis une homogénéisation en vitesse et énergie entre les deux phases (gouttelettes et gaz) qui conduit à l'utilisation d'un modèle de type "mélange" dans lequel on ne distingue plus précisément les deux phases (on a alors une seule vitesse, une seule température et une seule énergie comme inconnues).

1.1.2.1 Estimation du temps de transition d'un modèle de spray vers le modèle bifluide (1.9)-(1.14)

Durant les collisions entre gouttelettes se produisent des échanges de chaleur par conduction thermique, et des pertes d'énergie cinétique dues à des frottements visqueux. D'après [Mat06], l'effet des collisions sur les gouttelettes est une homogénéisation des vitesses et énergies des gouttelettes qui se rapprochent de leur vitesse moyenne v_{moy} et de leur énergie moyenne e_{moy} . Pour obtenir (à partir du modèle de sprays) le modèle bifluide, l'hypothèse qui a été utilisée est donc que la densité de gouttelettes relaxe vers une distribution qui est une masse de Dirac en vitesse et énergie. Le modèle bifluide de Mathiaud [Mat06] est ainsi valide lorsque l'équilibrage en vitesse et en énergie des gouttelettes entre elles a déjà eu lieu. Une fois cet équilibre atteint, les gouttelettes se comportent comme un fluide qui a pour vitesse moyenne v_{moy} et pour énergie moyenne e_{moy} . Pour les simulations que l'on considère (simulations air/étain), ces temps d'équilibrage en vitesse et énergie sont très courts [Mat07] : au temps $t = 2, 5 \cdot 10^{-6}$ s, les gouttelettes et le gaz se comportent tous deux comme un fluide (décrit par (1.9)-(1.14)).

1.1.2.2 Temps de retour à l'équilibre entre les deux phases

Dans les systèmes physiques, les deux phases de fluides lourd et léger échangent de l'impulsion et de l'énergie. Dans les modèles bifluïdes, ces échanges sont modélisés via la présence de termes d'échanges dans le membre de droite des équations : dans les deux équations pour la vitesse (1.10), les termes de traînée auront tendance à uniformiser la vitesse entre les deux fluides. Dans les deux équations pour l'énergie (1.11), ce sont les termes d'échange d'énergie Q_E qui entraînent un équilibre progressif en température entre les deux phases. L'objectif ici est d'obtenir un ordre de grandeur du temps nécessaire pour obtenir ce retour à l'équilibre. On va voir que l'équilibre en température est atteint bien plus rapidement que celui en vitesse. On donne l'exemple des expériences de type air-étain (gouttelettes d'étain dans de l'air), les valeurs caractéristiques pour les gouttelettes d'étain étant les suivantes (cf. [Mat06]) :

nombre de gouttelettes : 2.10^{10}	densité (étain) : 7310 kg.m^{-3}
rayon : 10^{-6} m	vitesse : 200 m.s^{-1}
température : 600 K	chaleur spécifique : $200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
viscosité dynamique : 8.10^{-3} Pa.s	conductivité thermique : $60 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

Tous les ordres de grandeurs que l'on va obtenir le seront pour ces simulations air-étain.

1.1.2.2.a Diffusion thermique

Les effets de la diffusion thermique sont pris en compte dans les équations pour l'énergie totale (1.11) via les termes : $\pm Q_E = \pm \frac{3}{r^2} \alpha^+ \lambda N u (T^- - T^+)$ qui font apparaître le différentiel de température entre les deux phases. On détaille ici l'obtention du temps d'équilibre (1.24) de [Mat07]. En reprenant les équations de conservation de l'énergie totale du modèle bifluïde (1.11) (et grâce à (1.9)), et en considérant que les effets de la conduction thermique prédominent, on obtient :

$$\partial_t E^+ \approx \frac{3}{r^2} \alpha^+ \lambda N u (T^- - T^+) \frac{1}{\alpha^+ \rho^+}, \quad (1.15)$$

$$\partial_t E^- \approx -\frac{3}{r^2} \alpha^+ \lambda N u (T^- - T^+) \frac{1}{\alpha^- \rho^-}. \quad (1.16)$$

On suppose que les quantités :

$$B^+ = \frac{3}{r^2} \alpha^+ \frac{\lambda N u}{\alpha^+ \rho^+}, \quad (1.17)$$

$$B^- = \frac{3}{r^2} \alpha^+ \frac{\lambda N u}{\alpha^- \rho^-}, \quad (1.18)$$

restent constantes. On se place dans un cadre gaz parfaits dans lequel la capacité spécifique à volume constant de chaque fluide (C_v^+ pour les gouttelettes et C_v^- pour le gaz) lie la température et l'énergie totale de chacun de ces fluides :

$$\partial_t E^+ = C_v^+ \partial_t T^+, \quad (1.19)$$

$$\partial_t E^- = C_v^- \partial_t T^-. \quad (1.20)$$

En utilisant (1.19) et (1.20) et en faisant la différence entre (1.15) et (1.16), il vient :

$$(B^+ + B^-)(T^- - T^+) = C_v^+ \partial_t T^+ - C_v^- \partial_t T^-. \quad (1.21)$$

Par conservation de l'énergie totale du système, on a (grâce à (1.19)-(1.20)) :

$$m^- C_v^- \partial_t T^- + m^+ C_v^+ \partial_t T^+ = 0, \quad (1.22)$$

avec m^- et m^+ les masses de fluide léger (resp. de fluide lourd) : $m^\pm = \alpha^\pm \rho^\pm$. En revenant à (1.21), on obtient une équation différentielle pour la température des gouttelettes :

$$C_v^+ \left[1 + \frac{m^+}{m^-} \right] \frac{\partial_t T^+}{\partial t} = (B^+ + B^-) \left[1 + \frac{m^+ C_v^+}{m^- C_v^-} \right] T^+ - (B^+ + B^-) \left[\frac{m^+ C_v^+}{m^- C_v^-} T^+(0) + T^-(0) \right], \quad (1.23)$$

ce qui donne comme temps caractéristique (on a $m^+ = \rho^+ \frac{4}{3} \pi r^3$) :

$$\tau_T = \frac{C_v^+ \rho^+ r^2}{3 \lambda N u \left(1 + \frac{\alpha^+ \rho^+ C_v^+}{\alpha^- \rho^- C_v^-} \right)}. \quad (1.24)$$

Si on se place du point de vue du fluide léger (gaz), on obtient une équation différentielle similaire pour la température du gaz T^- qui conduit au même temps caractéristique.

Avec les valeurs pour l'air à 600 K, ($C_v^- = 1000 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et $\eta^- = 2,5.10^{-5} \text{ Pa.s}$, $\rho^- = 0,616 \text{ kg.m}^{-3}$, $\lambda^- = 4,5.10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, $|u_r| \approx 200 \text{ m.s}^{-1}$) et une fraction volumique de gouttelettes $\alpha^+ = 0.1$, on obtient le temps suivant ($Nu \approx 1,2816$) :

$$\tau_{T_{air/etain}} = 3,2.10^{-8} \text{ s.}$$

L'équilibre thermique se produit donc très vite entre les deux phases pour le cas air/étain (en réalité plus rapidement que l'équilibrage de la vitesse des gouttelettes entre elles).

1.1.2.2.b Force de traînée

Les équations de la quantité de mouvement (1.10) conduisent à la force de traînée suivante :

$$F_{\text{Train}} := \pm \frac{3}{8 r_{\text{moy}}} C_d \rho^- \alpha^+ |u_r| u_r, \quad (1.25)$$

où $u_r = u^- - u^+$ est la vitesse relative entre les phases. Afin d'obtenir des ordres de grandeur des effets de la traînée, on considère que les gouttelettes impactent un gaz au repos si bien que $u_r = u^- - u^+ \approx -u^+$. On suppose que la traînée est prédominante (par rapport aux effets de la pression) lors de cette

phase d'équilibrage, et en utilisant les équations (1.9)-(1.10) du fluide lourd, on obtient :

$$\partial_t u_r \approx -\partial_t u^+ = -\frac{3}{8r_{moy}} C_d \frac{\rho^-}{\rho^+} |u_r| u_r. \quad (1.26)$$

Avec les simulations air/étain, le nombre de Reynolds correspondant à une vitesse relative de 200 vaut : $Re_{air/étain} = 9,85$, on se situe donc dans un cas où $C_d \approx \frac{24}{Re} \approx 2,44$ d'après [BDM03] si bien que (1.26) devient en remplaçant C_d par $\frac{24}{Re} = \frac{12\eta}{r_{moy}\rho^-|u_r|}$ (tableau 1.1) :

$$\partial_t u_r \approx -\frac{9\eta}{2\rho^+ r_{moy}^2} u_r. \quad (1.27)$$

On obtient donc comme temps caractéristique de retour à l'équilibre de la traînée τ_v :

$$\tau_{v_{air/étain}} = \frac{2\rho^+ r_{moy}^2}{9\eta} = 6,5 \cdot 10^{-5} s. \quad (1.28)$$

Dans la figure 1.2, on récapitule les différents temps d'équilibrage relatifs au modèle bifluide pour les expériences de type air/étain : l'équilibre thermique dû aux échanges d'énergie entre les deux phases est très vite atteint ($3 \cdot 10^{-8} s$), l'équilibrage en vitesse est lui beaucoup plus lent ($6 \cdot 10^{-5} s$).

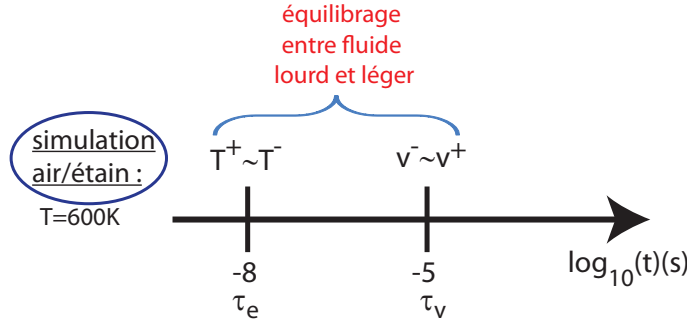


FIGURE 1.2 – Temps de retour à l'équilibre dans le cas de simulations air/étain (en échelle de temps logarithmique).

Ce sont les valeurs des expériences de type air/étain qui ont motivé le besoin d'utiliser un modèle intermédiaire entre ceux de sprays et les modèles de mélange (possédant une unique température et une unique vitesse de mélange). Comme le temps caractéristique de retour vers l'équilibre en vitesse est de l'ordre de 10^{-5} entre les deux phases, il n'est pas possible de le négliger et d'utiliser immédiatement un modèle de mélange isovitesse (il y a un facteur 1000 entre le temps de convergence pour les températures et les vitesses) : le modèle HEM va répondre aux exigences des simulations, à savoir de conserver un différentiel de vitesse.

1.1.3 Obtention du modèle de mélange homogène équilibré (HEM)

Le modèle existant dans le code d'étude est un modèle de mélange qui suppose que les deux fluides sont à la même pression, à la même température mais aussi à la même vitesse. Dans les expériences de type air/étain, on vient de voir que cette hypothèse est trop forte car lorsque l'on veut transiter d'un modèle de sprays vers un modèle de mélange, les effets de la traînée ne se sont pas encore dissipés. C'est pourquoi on introduit un modèle de mélange avec un terme de dérive (drift) qui prend en compte la vitesse relative entre les deux phases en plus de la vitesse moyenne du mélange. Un tel modèle consiste à suivre (en plus des équations sur les grandeurs moyennes de masse/impulsion/énergie), une équation sur la concentration (en général d'une des deux phases), et à introduire dans les équations de l'impulsion moyenne et de l'énergie moyenne des termes où interviennent la vitesse relative entre les deux fluides.

Les modèles de drift ont pour objectif de prédire cette vitesse relative entre les deux phases : celle-ci peut être obtenue par l'expérience comme dans l'article précurseur de [Ish77], ou bien obtenue via une solution approchée de l'équation sur la vitesse relative qui découle du système bifluide. Notre modèle HEM se place dans ce dernier cadre. La relation de fermeture sur la vitesse relative dépend du type d'écoulements considéré, un modèle de drift n'est donc pas universel mais dépend de la physique sous-jacente : l'utilisation d'un modèle de mélange de type drift à la place d'un modèle bifluide fait perdre de la généralité à la modélisation (du fait des hypothèses faites pour négliger des termes).

Notre modèle HEM est dérivé d'un modèle bifluide isobare (contrairement à [GD07] ou [Gal09]). Il suppose donc que les deux fluides sont à la même pression. On suit la même démarche que dans [GP06], mais au lieu d'obtenir un modèle formulé en énergie totale, on va obtenir une formulation en énergie interne pour les besoins du code d'étude. On va ici rappeler la dérivation des équations du modèle HEM obtenue par [GP06] (cf. §1.1.3.1). La méthode utilisée consiste à définir des grandeurs moyennes de mélange. A partir des équations du modèle bifluide, on obtient des équations sur ces grandeurs en considérant des combinaisons linéaires de couples d'équations lourd/léger (u vitesse moyenne, ρ densité moyenne et E énergie totale moyenne). Une équation supplémentaire sur la concentration massique relative c_r entre les deux fluides est aussi obtenue en faisant la différence des deux équations pour la densité (1.9). Enfin, la combinaison des deux équations de conservation de la masse avec celles de la conservation des impulsions conduit à l'obtention de l'équation sur la vitesse relative (1.64). L'équation sur la vitesse relative n'est pas utilisée telle quelle mais elle permet, après approximation, d'obtenir une formule pour la vitesse relative en fonction des autres variables (1.123). Une contrainte du code d'étude est l'obtention d'une équation non pas sur l'énergie totale mais sur l'énergie interne. Dans la sous-section suivante (1.1.4), on obtient une telle équation sur l'énergie interne à partir des cinq équations d'évolutions précédentes sur les quantités moyennes et relatives de mélange. Comme le modèle HEM n'utilise pas l'équation sur la vitesse relative mais une solution approchée sous certaines conditions,

l'objectif de la section suivante (1.2) sera de décrire les hypothèses utilisées, la technique de modélisation de [GP06], ainsi que de présenter une seconde méthode pour l'obtention de u_r . Du fait de l'emploi d'une solution approchée pour u_r , le modèle formulé en énergie interne moyenne que l'on va utiliser dans toute la suite ne sera pas équivalent au modèle initial de [GP06].

1.1.3.1 Dérivation de cinq équations d'évolution sur des grandeurs moyennes de mélange à partir du modèle bifluide (1.9)-(1.11)

A partir des équations du modèle bifluide (1.9)-(1.11), on va, par des manipulations sur ce jeu de six équations, obtenir des équations sur de nouvelles grandeurs que l'on va maintenant définir. Dans un modèle de mélange homogène, les grandeurs suivies sont des quantités moyennes définies comme combinaisons linéaires entre la quantité relative au fluide lourd pondérée par son titre massique c^+ (1.30), et la quantité du fluide léger, elle aussi pondérée par son titre massique c^- (1.31). Notons qu'en définissant la densité moyenne du mélange comme étant :

$$\rho = \alpha^+ \rho^+ + \alpha^- \rho^-, \text{ densité moyenne du mélange,} \quad (1.29)$$

et les titres massiques des deux fluides :

$$c^+ = \frac{\alpha^+ \rho^+}{\rho}, \quad (1.30)$$

$$c^- = \frac{\alpha^- \rho^-}{\rho}, \quad (1.31)$$

il vient immédiatement : $c^+ + c^- = 1$. Toutes les quantités moyennes sont définies sur le même modèle :

$$u := c^+ u^+ + c^- u^- \text{ vitesse moyenne,} \quad (1.32)$$

$$E := c^+ E^+ + c^- E^- \text{ énergie totale moyenne,} \quad (1.33)$$

$$H := c^+ H^+ + c^- H^- \text{ enthalpie totale moyenne,} \quad (1.34)$$

$$e := c^+ e^+ + c^- e^- \text{ énergie interne moyenne.} \quad (1.35)$$

On peut aussi réécrire la définition de la densité moyenne (1.29) à l'aide des titres massiques (1.30) et (1.31) comme pour les autres grandeurs moyennes :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}. \quad (1.36)$$

Le modèle que l'on souhaite obtenir doit prendre aussi en compte des déséquilibres existants entre les phases (de vitesse par exemple) de fluide lourd et léger. On introduit en plus des grandeurs moyennes (1.32)-(1.36), des grandeurs relatives que sont :

$$c_r := c^- - c^+ \text{ concentration relative entre les deux fluides,} \quad (1.37)$$

$$u_r := u^- - u^+ \text{ vitesse relative entre les deux fluides,} \quad (1.38)$$

$$e_r := e^- - e^+ \text{ énergie interne relative,} \quad (1.39)$$

$$\frac{1}{\rho_r} := \frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}, \text{ densité différentielle} \quad (1.40)$$

toujours définies comme la grandeur du fluide léger – à laquelle on soustrait la grandeur du fluide lourd +.

Remarque 1.1.2 *Toutes ces grandeurs relatives n'ont pas de signification physique propre, elles permettent simplement de ne privilégier aucun des deux fluides.*

Comme on a vu que les titres massiques sont compris entre 0 et 1, on a immédiatement l'encadrement suivant :

$$-1 \leq c_r \leq 1. \quad (1.41)$$

De plus, on remarque que l'on a une relation entre c_r et la concentration de chaque fluide c^\pm : comme $c^- + c^+ = 1$, on a

$$c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}. \quad (1.42)$$

1.1.3.1.a Obtention des équations moyennées sur ρ , u , E ainsi que d'une équation sur c_r

Toutes les grandeurs du modèle HEM sont maintenant définies, il reste à obtenir des équations pour ces grandeurs. On va les obtenir à partir des équations du système bifluide (1.9)-(1.14) en les sommant et en les combinant (même méthode que celle employée par Gallié [Gal09] pour un système bifluide à deux pressions, mais avec en plus l'obtention d'une équation sur l'énergie totale). On commence par les équations sur les quantités moyennes ρ , u et E . On va se servir de la relation suivante :

Proposition 1.1.3 *Soient G^+ et G^- deux fonctions génériques, on définit $G := c^+G^+ + c^-G^-$ et $G_r := G^- - G^+$, alors on a la relation :*

$$\alpha^+ \rho^+ G^+ u^+ + \alpha^- \rho^- G^- u^- = \rho G u + \rho G_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r.$$

Cette relation est immédiate en remarquant que : $\frac{1 - c_r^2}{4} = c^- c^+$ d'après (1.42).

Afin d'appliquer cette proposition à la variable $G = H$ (pour obtenir l'équation en énergie totale), on veut calculer la quantité relative H_r . On a par définition de l'énergie totale de chaque fluide : $E^\pm = e^\pm + \frac{1}{2}|u^\pm|^2$, si bien que (1.3) devient :

$$H^\pm = e^\pm + \frac{p}{\rho^\pm} + \frac{1}{2}|u^\pm|^2, \quad (1.43)$$

et

$$H_r = e_r + \frac{p}{\rho_r} + \frac{1}{2}(|u^-|^2 - |u^+|^2). \quad (1.44)$$

En revenant aux définitions de u (1.32) et u_r (1.38), on obtient que

$$u^+ = u - c^- u_r, \quad (1.45)$$

$$u^- = u_r + u^+. \quad (1.46)$$

Donc :

$$u^- + u^+ = \underbrace{(1 - 2c^-)}_{=-c_r \text{ par (1.37) et car } c^- + c^+ = 1} u_r + 2u = 2u - c_r u_r.$$

Finalement :

$$|u^-|^2 - |u^+|^2 = u_r \cdot (2u - c_r u_r). \quad (1.47)$$

En retournant à (1.44), on a finalement,

$$H_r = e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r. \quad (1.48)$$

En appliquant la Proposition 1.1.3 successivement à $G = H$ (et en utilisant (1.48)) puis aux différentes composantes de la vitesse, on obtient les relations suivantes :

$$\alpha^+ \rho^+ H^+ u^+ + \alpha^- \rho^- H^- u^- = \rho H u + \rho \left(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r \right) \frac{1 - c_r^2}{4} u_r, \quad (1.49)$$

$$\alpha^+ \rho^+ u^+ \otimes u^+ + \alpha^- \rho^- u^- \otimes u^- = \rho \left(u \otimes u + \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \otimes u_r \right). \quad (1.50)$$

Afin d'obtenir l'équation sur la concentration relative de mélange, on a besoin d'exprimer la quantité $c^- u^- - c^+ u^+$ en fonction des quantités moyennes et relatives du mélange.

Proposition 1.1.4 *Soient u vérifiant (1.32), u_r (1.38) et c_r (1.37), on a alors la relation suivante :*

$$c^- u^- - c^+ u^+ = c_r u + \frac{1 - c_r^2}{2} u_r. \quad (1.51)$$

Pour obtenir cette identité, on se sert des relations (1.42) ainsi que (1.45) et de l'équation similaire sur u^- : $u^- = u + c^+ u_r$, et l'équation (1.51) vient immédiatement.

On dispose maintenant de tous les calculs pour obtenir le jeu d'équations sur les grandeurs moyennes et relatives : en sommant les deux équations pour la densité du modèle bifluide (1.9), on obtient (1.52) ; puis en en faisant la différence, et en utilisant (1.51), on obtient (1.53). Enfin en sommant les deux équations de conservation de la quantité de mouvement ainsi que celles d'énergie totale (1.10) et (1.11), et en utilisant (1.49) et (1.50), on obtient les équations (1.54) et (1.55) du système (non fermé) qui suit :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (1.52)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}\left(\rho \left(c_r u + \frac{1 - c_r^2}{2} u_r \right)\right) = 0, \quad (1.53)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}\left(\rho \left(u \otimes u + \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \otimes u_r \right)\right) + \nabla p = \rho g, \quad (1.54)$$

$$\partial_t(\rho E) + \operatorname{div}\left(\rho H u + \rho \left(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r \right) \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right) = \rho u \cdot g. \quad (1.55)$$

Toujours à partir du système bifluide (1.9)-(1.11), on va maintenant obtenir une équation sur la vitesse relative entre les deux phases.

1.1.3.1.b Obtention de l'équation vérifiée par la vitesse relative

Il s'agit d'une relation dans laquelle apparaissent encore les quantités relatives à chaque phase (comme u^- ou u^+), et dont on cherchera une solution approchée (sous-section 1.1.5). On va se servir des deux équations de conservation de la masse et de l'impulsion du système bifluide (1.9) et (1.10). Comme :

$$\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm) = \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm)u^\pm + \alpha^\pm \rho^\pm \partial_t(u^\pm),$$

et

$$\operatorname{div}(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm \otimes u^\pm) = \operatorname{div}(\alpha^\pm \rho^\pm u^\pm)u^\pm + \alpha^\pm \rho^\pm u^\pm \cdot \nabla u^\pm,$$

en injectant l'équation de conservation de la masse dans l'équation de conservation de quantité de mouvement de chacun des deux fluides du modèle bifluide et en simplifiant par $\alpha^\pm \rho^\pm$, on obtient :

$$\partial_t u^\pm + (u^\pm \cdot \nabla)u^\pm + \frac{1}{\rho^\pm} \nabla p = g \pm \frac{C^*}{r^*} \theta_\rho \frac{\alpha^\mp \rho^\mp}{\rho} |u_r| u_r. \quad (1.56)$$

En faisant la différence des 2 équations, on a :

$$\partial_t u_r + (u^- \cdot \nabla)u^- - (u^+ \cdot \nabla)u^+ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r. \quad (1.57)$$

Proposition 1.1.5 *Soit u un vecteur de \mathbb{R}^N , avec $N = 2$ ou 3 , on a la relation suivante :*

$$\nabla \frac{|u|^2}{2} - (u \cdot \nabla)u = u \wedge (\operatorname{rot} u), \quad (1.58)$$

En effet, en développant les termes de cette équation selon les composantes de u , la relation (1.58) vient immédiatement.

Ainsi, on obtient finalement l'équation suivante vérifiée par la vitesse relative :

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-) + u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) \\ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r, \end{aligned} \quad (1.59)$$

qui inclut des termes en rotationnel non pris en compte dans [GP06]. On peut réécrire la quantité θ_ρ (1.2) en fonction du titre massique c^\pm (1.30)-(1.31) de chacun des deux fluides :

$$\theta_\rho = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+}. \quad (1.60)$$

A partir des six équations d'évolution du système bifluide initial (1.9)-(1.11), on a obtenu un jeu de cinq équations portant sur les grandeurs moyennes ρ (1.52), u (1.54) et E (1.55) ainsi que sur les grandeurs relatives c_r (1.53) et u_r (1.59) :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (1.61)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}(\rho(c_r u + \frac{1-c_r^2}{2} u_r)) = 0, \quad (1.62)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho(u \otimes u + \frac{1-c_r^2}{4} u_r \otimes u_r)) + \nabla p = \rho g, \quad (1.63)$$

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-) + u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) \\ + (\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}) \nabla p = -\frac{C_r^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r, \end{aligned} \quad (1.64)$$

$$\partial_t(\rho E) + \operatorname{div}(\rho H u + \rho(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r) \frac{1-c_r^2}{4} u_r) = \rho u \cdot g. \quad (1.65)$$

1.1.4 Formulation du modèle en énergie interne

L'équation (1.65) donne l'évolution de l'énergie totale, mais on souhaite avoir une équation pour l'énergie interne pour les besoins du code. L'objectif de cette sous-section est donc l'obtention, (à partir des cinq équations (1.61)-(1.65) précédentes), d'une équation d'évolution sur l'énergie interne. Le point de départ est l'équation en énergie totale précédente (1.65) dans laquelle on introduit la relation entre l'énergie totale et l'énergie interne du mélange (1.67) suivante. Ensuite, l'utilisation des autres équations continues du système permet de simplifier l'équation obtenue. On va réécrire l'enthalpie moyenne H en fonction de l'énergie moyenne E du mélange, de la pression et de la densité moyenne ρ :

Proposition 1.1.6 *On a les relations suivantes :*

$$H = E + \frac{p}{\rho}, \quad (1.66)$$

$$E = e + \frac{1}{2} |u|^2 + \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2. \quad (1.67)$$

– De (1.36), de la définition de E , et de la définition de H^\pm (1.3), il vient :

$$H = E + \frac{p}{\rho}. \quad (1.68)$$

– Enfin, pour obtenir une relation entre énergie totale moyenne (1.33) et énergie interne moyenne (1.35), comme $E^\pm = e^\pm + \frac{1}{2} |u^\pm|^2$, on a :

$$E = e + \frac{1}{2} c^+ |u^+|^2 + \frac{1}{2} c^- |u^-|^2. \quad (1.69)$$

Ensuite, grâce à (1.42) et aux relations entre vitesse d'une phase et vitesse moyenne et relative (1.45) :

$$u^+ = u - \frac{1+c_r}{2} u_r, \quad (1.70)$$

$$u^- = u + \frac{1-c_r}{2} u_r, \quad (1.71)$$

on a ainsi

$$\frac{1}{2}c^+|u^+|^2 + \frac{1}{2}c^-|u^-|^2 = \frac{1}{2}|u|^2 + \frac{1}{2}\frac{1-c_r^2}{4}u_r^2, \quad (1.72)$$

et on obtient (1.67).

Proposition 1.1.7 *A partir du système bifluide (1.61)-(1.65) ainsi que des relations (1.66) et (1.67), on obtient l'équation suivante vérifiée par l'énergie interne moyenne e :*

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) = & -\operatorname{div}(\rho(eu + e_r \frac{1-c_r^2}{4}u_r)) - p(\operatorname{div}u + \operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4}u_r)) \\ & + F_D \cdot u_r, \end{aligned} \quad (1.73)$$

où F_D représente la force de traînée du problème et s'écrit :

$$F_D = \rho\theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{1-c_r^2}{4}|u_r|u_r, \quad (1.74)$$

avec θ_ρ défini par (1.60) et on rappelle que (1.4) :

$$\frac{C^*}{r^*} = \frac{3}{8} \frac{C_d}{r_{\text{moy}}}, \quad (1.75)$$

$$(1.76)$$

où C_d est le coefficient de traînée du problème, et r_{moy} le rayon moyen des gouttelettes.

D'après (1.67),

$$e = E - \frac{1}{2}|u|^2 - \frac{1}{2}\frac{1-c_r^2}{4}u_r^2. \quad (1.77)$$

Afin d'obtenir (à partir de l'équation pour l'énergie totale), l'équation pour l'énergie interne, il faut préalablement calculer les dérivées temporelles de $\frac{1}{2}|u|^2$ et de $\frac{1}{2}\frac{1-c_r^2}{4}u_r^2$. Pour la première, on a :

$$\frac{d}{dt}(\rho \frac{1}{2}|u|^2) = \frac{u}{2} \cdot \partial_t(\rho u) + \frac{\rho}{2} \partial_t u \cdot u.$$

Or les équations (1.61) et (1.63) donnent :

$$\rho \partial_t u + \rho[u \cdot \nabla]u + \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{4}u_r \otimes u_r) + \nabla p = \rho g,$$

ce qui conduit à :

$$\partial_t(\rho u) = \rho \partial_t u + u \partial_t \rho = -\rho[u \cdot \nabla]u - \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{4}u_r \otimes u_r) - \nabla p - \operatorname{div}(\rho u) + \rho g.$$

Donc :

$$\frac{d}{dt}(\rho \frac{1}{2} |u|^2) = -\rho([u \cdot \nabla]u) \cdot u - u \cdot \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \otimes u_r) - u \cdot \nabla p - \frac{\operatorname{div}(\rho u)}{2} u \cdot u + \rho g \cdot u. \quad (1.78)$$

Pour ce qui est de la deuxième dérivée temporelle :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\rho \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) &= \frac{1}{8} \partial_t(\rho u_r^2) - \frac{1}{8} \partial_t(\rho c_r^2 u_r^2) \\ &= \frac{1}{8} u_r^2 \partial_t \rho + \frac{1}{4} \rho u_r \cdot \partial_t u_r - \frac{1}{4} \rho c_r^2 u_r \cdot \partial_t u_r - \frac{1}{8} u_r^2 \partial_t(\rho c_r^2) \\ &= \frac{1}{8} u_r^2 \partial_t \rho + \frac{1}{4} \rho u_r \cdot \partial_t u_r - \frac{1}{4} \rho c_r^2 u_r \cdot \partial_t u_r - \frac{1}{4} u_r^2 \rho c_r \partial_t c_r - \frac{1}{8} u_r^2 c_r^2 \partial_t \rho. \end{aligned} \quad (1.79)$$

Or d'après l'équation relative à la conservation de la concentration relative (1.62), on a :

$$\rho \partial_t c_r + \rho u \cdot \nabla(c_r) + \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) = 0,$$

ce qui donne :

$$\frac{d}{dt}(\rho \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) = \frac{1-c_r^2}{8} u_r^2 \partial_t \rho + \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot \partial_t u_r + \frac{1}{4} u_r^2 c_r (\rho u \cdot \nabla(c_r) + \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r)). \quad (1.80)$$

La relation (1.77) permet de relier toutes ces dérivées temporelles :

$$\partial_t(\rho e) = \partial_t(\rho E) - \partial_t(\rho \frac{1}{2} |u|^2) - \partial_t(\rho \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2). \quad (1.81)$$

En utilisant (1.65) et les dérivées temporelles calculées précédemment (1.78) et (1.80), on a (les termes de gravité se simplifient) :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) &= \partial_t(\rho E) - \partial_t(\rho \frac{1}{2} |u|^2) - \partial_t(\rho \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) \\ &= -\operatorname{div}(\rho H u) - \operatorname{div}(\rho(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r) \frac{1-c_r^2}{4} u_r) \\ &\quad - \partial_t(\rho \frac{1}{2} |u|^2) - \partial_t(\rho \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2). \end{aligned} \quad (1.82)$$

On va maintenant remplacer l'enthalpie totale H par son expression (1.66)-(1.67) en fonction de l'énergie interne :

$$\partial_t(\rho e) = -\operatorname{div}(\rho e u) - \operatorname{div}(\rho \frac{1}{2} |u|^2 u) - \operatorname{div}(\rho \frac{1}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 u) - \operatorname{div}(p u) \quad (1.83)$$

$$-\operatorname{div}(\rho(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2} |u_r|^2 + u \cdot u_r) \frac{1-c_r^2}{4} u_r) + \rho([u \cdot \nabla]u) \cdot u \quad (1.84)$$

$$+ u \cdot \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \otimes u_r) + u \cdot \nabla p + \frac{\operatorname{div}(\rho u)}{2} u \cdot u \quad (1.85)$$

$$- \frac{1-c_r^2}{8} u_r^2 \partial_t \rho - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot \partial_t u_r - \frac{1}{4} u_r^2 c_r (\rho u \cdot \nabla(c_r) + \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r)). \quad (1.86)$$

Or

$$\operatorname{div}(\rho \frac{1}{2} |u|^2 u) = \frac{u^2}{2} \operatorname{div}(\rho u) + \rho([u \cdot \nabla]u) \cdot u,$$

et

$$\operatorname{div}(pu) = p\operatorname{div}(u) + u \cdot \nabla p.$$

On obtient finalement,

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e u) &= -\operatorname{div}\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 u\right) - p\operatorname{div}(u) \\ &\quad - \operatorname{div}\left(\rho\left(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2}|u_r|^2 + u \cdot u_r\right) \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right) \\ &\quad + u \cdot \operatorname{div}\left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \otimes u_r\right) - \frac{1-c_r^2}{8} u_r^2 \partial_t \rho \\ &\quad - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot \partial_t u_r - \frac{1}{4} u_r^2 c_r (\rho u \cdot \nabla(c_r) + \operatorname{div}\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)). \end{aligned} \quad (1.87)$$

On va maintenant simplifier toutes les dérivées temporelles apparaissant dans cette expression. En utilisant l'équation vérifiée par la vitesse relative (1.64) et la relation (1.47), l'équation vérifiée par la vitesse relative se réécrit sous cette forme :

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla(u_r \cdot u) - \frac{\nabla(c_r |u_r|^2)}{2} - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-) + u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) \\ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C_r^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r, \end{aligned} \quad (1.88)$$

et on obtient :

•

$$\begin{aligned} -\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot \partial_t u_r &= -\rho \frac{1-c_r^2}{4} \frac{c_r}{2} u_r \cdot \nabla |u_r|^2 - \rho \frac{1-c_r^2}{4} \frac{|u_r|^2}{2} u_r \cdot \nabla c_r \\ &\quad + \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot (\nabla(u_r \cdot u)) \\ &\quad + \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot (u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-)) \\ &\quad - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot \left(-\frac{C_r^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r - \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p\right). \end{aligned} \quad (1.89)$$

Ensuite, à partir de (1.61), il vient :

•

$$-\frac{1-c_r^2}{8} u_r^2 \partial_t \rho = \frac{1-c_r^2}{8} u_r^2 \rho \operatorname{div} u + \frac{1-c_r^2}{8} u_r^2 u \cdot \nabla \rho. \quad (1.90)$$

Enfin, on développe les termes suivants apparaissant dans (1.87) :

•

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4} u_r^2 c_r (\rho u \cdot \nabla(c_r) + \operatorname{div}\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)) &= -\frac{1}{4} u_r^2 c_r \rho u \cdot \nabla c_r - \frac{1}{4} u_r^2 c_r \rho \frac{1-c_r^2}{2} \operatorname{div} u_r \\ &\quad - \frac{1}{4} \frac{1-c_r^2}{2} u_r^2 c_r u_r \cdot \nabla \rho + \frac{1}{4} \rho u_r^2 c_r^2 u_r \cdot \nabla c_r, \end{aligned} \quad (1.91)$$

- $$\begin{aligned}
-\operatorname{div}\left(\rho\frac{1-c_r^2}{2}\frac{1-c_r^2}{4}u_r^2u\right) &= -\frac{\rho}{2}\frac{1-c_r^2}{4}u_r^2\operatorname{div}u - \frac{1-c_r^2}{8}u_r^2u \cdot \nabla\rho \\
&+ \frac{\rho c_r}{4}u_r^2u \cdot \nabla c_r - \frac{\rho(1-c_r^2)}{8}u \cdot \nabla[u_r^2],
\end{aligned} \tag{1.92}$$

et

- $$\begin{aligned}
-\operatorname{div}\left(\rho\left(e_r + \frac{p}{\rho_r} - \frac{c_r}{2}u_r^2 + u \cdot u_r\right)\frac{1-c_r^2}{4}u_r\right) &= -\operatorname{div}\left(\rho\left(e_r + \frac{p}{\rho_r}\right)\frac{1-c_r^2}{4}u_r\right) + \rho\frac{c_r}{2}u_r^2\frac{1-c_r^2}{4}\operatorname{div}u_r \\
&+ \left(\frac{c_r}{2}u_r^2\frac{1-c_r^2}{4}\right)u_r \cdot \nabla\rho + \rho\frac{c_r}{2}\frac{1-c_r^2}{4}u_r \cdot \nabla[u_r^2] \\
&+ \frac{\rho}{8}u_r^2u_r \cdot \nabla(c_r - c_r^3) - \rho u \cdot u_r\frac{1-c_r^2}{4}\operatorname{div}u_r \\
&+ \frac{\rho}{2}(u \cdot u_r)c_ru_r \cdot \nabla c_r - \rho\frac{1-c_r^2}{4}u_r \cdot \nabla(u \cdot u_r) \\
&- u \cdot u_r\frac{1-c_r^2}{4}u_r \cdot \nabla\rho.
\end{aligned} \tag{1.93}$$

Le dernier terme à développer est celui faisant intervenir le produit tensoriel de u_r : à partir de

$$\begin{aligned}
\operatorname{div}\left(\rho\frac{1-c_r^2}{4}u_r \otimes u_r\right) &= \rho\frac{1-c_r^2}{4}[\operatorname{div}u_r]u_r + \rho\frac{1-c_r^2}{4}(u_r \cdot \nabla)u_r \\
&+ \{(u_r \cdot \nabla)\left[\rho\frac{1-c_r^2}{4}\right]\}u_r,
\end{aligned} \tag{1.94}$$

on obtient :

- $$\begin{aligned}
u \cdot \operatorname{div}\left(\rho\frac{1-c_r^2}{4}u_r \otimes u_r\right) &= \rho\frac{1-c_r^2}{4}(u_r \cdot u)\operatorname{div}u_r + \rho\frac{1-c_r^2}{4}u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r] \\
&+ \frac{1-c_r^2}{4}(u_r \cdot \nabla\rho)(u \cdot u_r) - \frac{\rho c_r}{2}(u_r \cdot \nabla c_r)(u \cdot u_r).
\end{aligned} \tag{1.95}$$

En remplaçant tous ces calculs dans l'équation (1.87), et en simplifiant, il vient :

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho e) &= -\operatorname{div}(\rho e u) - p\operatorname{div}u - \operatorname{div}\left(\rho\left(e_r + \frac{p}{\rho_r}\right)\frac{1-c_r^2}{4}u_r\right) \\
&+ \frac{\rho(1-c_r^2)}{8}(c_ru_r - u) \cdot \nabla[u_r^2] + \rho\frac{1-c_r^2}{4}u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r] \\
&- \rho\frac{1-c_r^2}{4}\frac{c_r}{2}u_r \cdot \nabla[u_r^2] + \rho\frac{1-c_r^2}{4}u_r \cdot (u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-)) \\
&- \rho\frac{1-c_r^2}{4}u_r \cdot \left(-\frac{C^*}{r^*}\theta_\rho|u_r|u_r - \left(\frac{1}{\rho_r}\right)\nabla p\right),
\end{aligned} \tag{1.96}$$

i.e.

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho e) &= -\operatorname{div}(\rho e u) - p \operatorname{div} u - \operatorname{div}(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r) - \underbrace{\operatorname{div}(\rho \frac{p}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r)}_A \\
&\quad - \frac{\rho(1-c_r^2)}{8} u \cdot \nabla[u_r^2] + \rho \frac{1-c_r^2}{4} u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r] \\
&\quad + \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot (u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-)) \\
&\quad - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot (-\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r - \frac{1}{\rho_r} \nabla p).
\end{aligned} \tag{1.97}$$

En écrivant le terme A comme $p \operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r) + \frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot \nabla p$, on obtient :

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho e) &= -\operatorname{div}(\rho(e u + e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r)) - p(\operatorname{div} u + \operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r)) \\
&\quad - \rho \frac{1-c_r^2}{4} (\frac{u_r}{\rho_r} \cdot \nabla p + \underbrace{\frac{u}{2} \cdot \nabla[u_r^2] - u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r]}_B) \\
&\quad + \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot (u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-)) \\
&\quad - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r \cdot (-\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r - \frac{1}{\rho_r} \nabla p).
\end{aligned} \tag{1.98}$$

En développant le terme B , on a :

$$\frac{u}{2} \cdot \nabla[u_r^2] - u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r] = \operatorname{rot}(u_r) \cdot (u \wedge u_r), \tag{1.99}$$

en effet, en développant avec les composantes de chaque vecteur, on a :

•

$$\begin{aligned}
\frac{u}{2} \cdot \nabla[u_r^2] &= u_1 u_{r1} \partial_1 u_{r1} + u_1 u_{r2} \partial_1 u_{r2} + u_1 u_{r3} \partial_1 u_{r3} \\
&\quad + u_2 u_{r1} \partial_2 u_{r1} + u_2 u_{r2} \partial_2 u_{r2} + u_2 u_{r3} \partial_2 u_{r3} \\
&\quad + u_3 u_{r1} \partial_3 u_{r1} + u_3 u_{r2} \partial_3 u_{r2} + u_3 u_{r3} \partial_3 u_{r3},
\end{aligned} \tag{1.100}$$

et

•

$$\begin{aligned}
u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r] &= u_1 u_{r1} \partial_1 u_{r1} + u_1 u_{r2} \partial_2 u_{r1} + u_1 u_{r3} \partial_3 u_{r1} \\
&\quad + u_2 u_{r1} \partial_1 u_{r2} + u_2 u_{r2} \partial_2 u_{r2} + u_2 u_{r3} \partial_3 u_{r2} \\
&\quad + u_3 u_{r1} \partial_1 u_{r3} + u_3 u_{r2} \partial_2 u_{r3} + u_3 u_{r3} \partial_3 u_{r3},
\end{aligned} \tag{1.101}$$

d'où :

$$\begin{aligned}
\frac{u}{2} \cdot \nabla[u_r^2] - u \cdot [(u_r \cdot \nabla)u_r] &= (\operatorname{rot} u_r)_3 (u_1 u_{r2} - u_2 u_{r1}) + (\operatorname{rot} u_r)_2 (u_3 u_{r1} - u_1 u_{r3}) \\
&\quad + (\operatorname{rot} u_r)_1 (u_2 u_{r3} - u_3 u_{r2}),
\end{aligned} \tag{1.102}$$

et on obtient (1.99). On définit la force de traînée du problème par :

$$F_D = \rho \theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{1 - c_r^2}{4} |u_r| u_r. \quad (1.103)$$

L'équation en énergie interne devient :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) &= -\operatorname{div}(\rho(eu + e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r)) - p(\operatorname{div}u + \operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r)) \\ &+ F_D \cdot u_r \\ &- \rho \frac{1 - c_r^2}{4} [(\operatorname{rot}u_r) \cdot (u \wedge u_r) - u_r \cdot (u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-))]. \end{aligned} \quad (1.104)$$

Tous les termes en rotationnel dans l'expression précédente vont en fait se simplifier, en effet : en utilisant les relations (1.70) et (1.71) et la relation $c^+ + c^- = 1$, on obtient :

$$\begin{aligned} u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-) &= -u \wedge \operatorname{rot}(u_r) - u_r \wedge \operatorname{rot}(u) + c_r u_r \wedge (\operatorname{rot}(u_r)) \\ &- u_r \wedge \begin{pmatrix} u_{r_3} \partial_2 c^+ - u_{r_2} \partial_3 c^+ \\ u_{r_1} \partial_3 c^+ - u_{r_3} \partial_1 c^+ \\ u_{r_2} \partial_1 c^+ - u_{r_1} \partial_2 c^+ \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.105)$$

Or le produit scalaire de 2 vecteurs orthogonaux étant nul, on a :

$$u_r \cdot [-u_r \wedge \operatorname{rot}(u) + c_r u_r \wedge (\operatorname{rot}(u_r)) - u_r \wedge \begin{pmatrix} u_{r_3} \partial_2 c^+ - u_{r_2} \partial_3 c^+ \\ u_{r_1} \partial_3 c^+ - u_{r_3} \partial_1 c^+ \\ u_{r_2} \partial_1 c^+ - u_{r_1} \partial_2 c^+ \end{pmatrix}] = 0, \quad (1.106)$$

et ainsi :

$$u_r \cdot [u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-)] = -u_r \cdot [u \wedge \operatorname{rot}u_r]. \quad (1.107)$$

Enfin la relation suivante :

$$(\operatorname{rot}u_r) \cdot (u \wedge u_r) = -u_r \cdot (u \wedge \operatorname{rot}(u_r)), \quad (1.108)$$

permet de simplifier tous les termes en rotationnel. Finalement, l'équation en énergie interne est la suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) &= -\operatorname{div}(\rho(eu + e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r)) - p(\operatorname{div}u + \operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r)) \\ &+ F_D \cdot u_r, \end{aligned} \quad (1.109)$$

qui correspond à la Proposition 1.1.7.

On obtient ainsi un nouveau jeu d'équations formulé cette fois-ci en énergie interne en remplaçant juste dans le système (1.61)-(1.65), l'équation en énergie totale (1.65) par l'équation en énergie interne que l'on vient d'obtenir (1.109) :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (1.110)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}(\rho(c_r u + \frac{1-c_r^2}{2} u_r)) = 0, \quad (1.111)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho(u \otimes u + \frac{1-c_r^2}{4} u_r \otimes u_r)) + \nabla p = \rho g, \quad (1.112)$$

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} - u^- \wedge \operatorname{rot}(u^-) + u^+ \wedge \operatorname{rot}(u^+) + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p \\ = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r, \end{aligned} \quad (1.113)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho(e u + e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r)) + p(\operatorname{div} u + \operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r)) \\ = F_D \cdot u_r. \end{aligned} \quad (1.114)$$

Remarque 1.1.8 Si on introduit la fonction de flux $\Phi(c_r) = (1 - c_r^2)u_r$, on voit lorsqu'il n'y a qu'un seul des deux fluides en présence (i.e. $c_r = \pm 1$) ou lorsque u_r est nulle, que la fonction Φ s'annule ainsi que la force de traînée F_D (1.103). Le système (1.110)-(1.114) redevient alors identique aux équations d'Euler classiques :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (1.115)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho(u \otimes u)) + \nabla p = \rho g, \quad (1.116)$$

$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e u) + p(\operatorname{div} u) = 0. \quad (1.117)$$

1.1.5 Le modèle de mélange homogène équilibré

A partir des équations du modèle biffuide isobare (1.9)-(1.11), on a obtenu cinq équations : deux concernant la masse (1.110) et (1.111), deux la vitesse (1.112) et (1.113) mais seulement une seule sur l'énergie (1.114). Comme on a vu (sous-section 1.1.2 et [Mat07]) que dans les simulations considérées, l'équilibre en température entre les deux phases se faisait rapidement, au lieu de considérer une équation supplémentaire sur l'énergie, on fait une première approximation qui consiste à supposer que les deux fluides sont à la même température : $T^+ = T^- = T$. On remplace ensuite la véritable équation vérifiée par u_r (1.113) par la solution approchée obtenue par [GP06] :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}}, \quad (1.118)$$

ce qui constitue la seconde approximation. On obtient ainsi le nouveau système "HEM formulé en énergie interne" :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (1.119)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}\left(\rho(c_r u + \frac{1 - c_r^2}{2} u_r)\right) = 0, \quad (1.120)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}\left(\rho(u \otimes u + \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \otimes u_r)\right) + \nabla p = \rho g, \quad (1.121)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) = & -\operatorname{div}\left(\rho(e u + e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r)\right) - p(\operatorname{div} u + \operatorname{div}\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r\right)) \\ & + F_D \cdot u_r, \end{aligned} \quad (1.122)$$

avec les relations de fermeture suivantes :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}}, \quad (1.123)$$

$$c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}, \quad (1.124)$$

$$e_r = e^- - e^+, \quad (1.125)$$

$$\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}, \quad (1.126)$$

$$F_D = \rho \theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{1 - c_r^2}{4} |u_r| u_r, \quad (1.127)$$

$$\frac{r^*}{C^*} = \frac{8}{3} \frac{r_{moy}}{C_d}, \quad (1.128)$$

$$\theta_\rho = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+}. \quad (1.129)$$

La pression n'est pas connue de manière explicite mais de manière implicite via la résolution du système de quatre équations suivantes :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \quad (1.130)$$

$$p = P^+(\rho^+, T) = P^-(\rho^-, T), \quad (1.131)$$

$$e = c^+ e^+(\rho^+, T) + c^- e^-(\rho^-, T), \quad (1.132)$$

qui permet, à partir de la connaissance de c^\pm et ρ , d'obtenir les densités de chacun des deux fluides ρ^\pm , la température de mélange T . Enfin, on peut en déduire ensuite la pression p du système, ainsi que les énergies de chaque fluide que l'on note pour simplifier e^\pm au lieu de $e^\pm(\rho^\pm, T)$ dans (1.125).

Remarque 1.1.9 *Le modèle HEM original présenté dans [GP06] est constitué des mêmes équations (1.119), (1.120), (1.121), (1.123), mais l'équation en énergie interne (1.122) y est remplacée par l'équation en énergie totale (1.65). Les deux systèmes ne sont pas équivalents (ils le seraient si on avait conservé l'équation aux dérivées partielles (EDP) pour u_r (1.113) mais ce n'est plus le cas après l'approximation (1.123)).*

En effectuant le passage en coordonnées de masse pour les équations (1.119)-(1.122), on obtient le nouveau système HEM écrit en énergie interne sous la forme lagrangienne suivante : ($\text{div}_M = \frac{1}{\rho}\text{div}$, $\nabla_M = \frac{1}{\rho}\nabla$, $D_t := \partial_t + u \cdot \nabla$)

$$D_t \frac{1}{\rho} = \text{div}_M u, \quad (1.133)$$

$$D_t c_r = -\text{div}_M \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r \right), \quad (1.134)$$

$$D_t u = -\nabla_M p - \text{div}_M \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \otimes u_r \right) + g, \quad (1.135)$$

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}}, \quad (1.136)$$

$$D_t e = -\text{div}_M \left(\rho e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right) - p \left(\text{div}_M u + \text{div}_M \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right) \right) + \frac{F_D}{\rho} \cdot u_r. \quad (1.137)$$

1.2 Obtention de la formule (1.136) de vitesse relative

Dans cette partie, on va motiver et expliquer quelles hypothèses physiques permettent (à partir de l'équation d'évolution de la vitesse relative u_r (1.64)) d'obtenir la solution approchée correspondant à la formule (1.123). La formule approchée sur la vitesse relative (1.123) peut être obtenue en négligeant tous les opérateurs de dérivées spatiales et temporelles comme dans les papiers précurseurs de [IZ79] (ce que l'on peut formaliser en se basant sur un développement de type Chapman-Enskog de l'équation de la vitesse relative [Gal09, ACC⁺08, GDLP07, Pan06]) ou via l'expérience comme par exemple [ZF65, Ish77] pour les premiers travaux). L'originalité du travail de [GP06] est de travailler directement sur l'équation (1.113) pour en obtenir une solution approchée.

1.2.1 Philosophie des modèles de drift

Les modèles de drift (i.e. modèles où l'on utilise une équation simplifiée pour suivre la vitesse relative) sont des modèles où l'on se place dans un cadre où les vitesses entre les deux phases ont déjà commencé à s'équilibrer (la traînée a déjà commencé à agir) : ces types de modèle sont utilisés lorsque les deux fluides ont des mouvements proches mais qu'il existe encore de petites fluctuations qui peuvent entraîner un gros changement de comportement dans le système. Si on retourne aux deux équations de conservation de l'impulsion des deux fluides

(1.56) :

$$\partial_t u^- + (u^- \cdot \nabla) u^- + \frac{1}{\rho^-} \nabla p = -\frac{3}{8r} C_d \frac{\alpha^+}{\alpha^-} |u^- - u^+| (u^- - u^+) + g, \quad (1.138)$$

ainsi que

$$\partial_t u^+ + (u^+ \cdot \nabla) u^+ + \frac{1}{\rho^+} \nabla p = \frac{3}{8r} C_d \frac{\rho^-}{\rho^+} |u^- - u^+| (u^- - u^+) + g, \quad (1.139)$$

on voit que la formule utilisée sur la vitesse relative u_r (1.186) revient a posteriori à négliger dans les deux équations d'impulsion les termes :

$$\partial_t u^- + u^- \cdot \nabla u^-, \quad (1.140)$$

$$\partial_t u^+ + u^+ \cdot \nabla u^+, \quad (1.141)$$

ce qui donne en faisant la différence entre (1.138)-(1.139) avec ces hypothèses :

$$\frac{1}{\rho_r} \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r, \quad (1.142)$$

et qui conduit bien à l'équation (1.136). Dans l'article de Ishii et Zuber [IZ79], de Massella *et al.* [MTFP98] et celui de Sokolichin *et al.* [SEL04], c'est la démarche qui est suivie pour obtenir une formule sur la vitesse relative. Ces hypothèses consistant à négliger les termes (1.140), (1.141) sont typiquement valides si la masse des gouttelettes est très faible ou bien si le rayon r des gouttelettes est très petit, ce qui rend les effets de la traînée dominants sur les effets de l'accélération.

On propose une analyse dimensionnelle (du même type que celle faite dans [GD07]) des quatre équations portant sur la masse et la vitesse des deux fluides (1.9)-(1.10) (les équations en énergie n'interviennent pas dans l'obtention de l'équation sur la vitesse relative). On définit par un $\tilde{\cdot}$ au dessus de la variable toutes les grandeurs adimensionnées, on n'adimensionnera pas la fraction volumique des deux fluides α^\pm , ni le coefficient de traînée qui sont des grandeurs sans dimension. On définit la variable λ dans le terme de traînée du système bifluide (1.9)-(1.11) :

$$\lambda = -\frac{C^*}{r^*} \alpha^+ \rho^- |u_r|, \quad (1.143)$$

et on définit les grandeurs adimensionnées suivantes :

$$\rho^+ = \rho_1 \tilde{\rho}^+, \quad \rho^- = \rho_2 \tilde{\rho}^-, \quad (1.144)$$

$$u^+ = u_1 \tilde{u}^+, \quad u^- = u_2 \tilde{u}^-, \quad (1.145)$$

$$x = L \tilde{x}, \quad \nabla = \frac{1}{L} \tilde{\nabla}, \quad (1.146)$$

$$t = T \tilde{t}, \quad p = P_1 \tilde{p}, \quad (1.147)$$

$$u_r = u_{r0} \tilde{u}_r, \quad \lambda = \lambda_0 \tilde{\lambda}, \quad (1.148)$$

$$g = g_0 \tilde{g}, \quad r = R \tilde{r}. \quad (1.149)$$

On choisit $R = r_{moy}$, rayon moyen des gouttelettes. A partir des équations bifluïdes (1.9)-(1.11), on obtient ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\alpha^- \tilde{\rho}^-) + \frac{T u_2}{L} \tilde{\nabla}(\alpha^- \tilde{\rho}^- \tilde{u}^-) = 0, \quad (1.150)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\alpha^+ \tilde{\rho}^+) + \frac{T u_1}{L} \tilde{\nabla}(\alpha^+ \tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+) = 0, \quad (1.151)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\alpha^- \tilde{\rho}^- \tilde{u}^-) + \frac{T u_2}{L} \tilde{\nabla}(\alpha^- \tilde{\rho}^- \tilde{u}^- \otimes \tilde{u}^-) + \frac{T P_1}{L \rho_2 u_2} \alpha^- \tilde{\nabla} \tilde{p} \\ = - \frac{T u_{r_0} \lambda_0}{\rho_2 u_2} \tilde{\lambda} \tilde{u}_r + \frac{T}{u_2} \alpha^- \tilde{\rho}^- g, \end{aligned} \quad (1.152)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\alpha^+ \tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+) + \frac{T u_1}{L} \tilde{\nabla}(\alpha^+ \tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+ \otimes \tilde{u}^+) + \frac{T P_1}{L \rho_1 u_1} \alpha^+ \tilde{\nabla} \tilde{p} \\ = \frac{T u_{r_0} \lambda_0}{\rho_1 u_1} \tilde{\lambda} \tilde{u}_r + \frac{T}{u_1} \alpha^+ \tilde{\rho}^+ g. \end{aligned} \quad (1.153)$$

Comme l'hypothèse des modèles de drift est que les deux fluïdes ne sont pas trop éloignés d'une situation d'équilibre, dans la suite, on va considérer que les grandeurs caractéristiques des vitesses des deux fluïdes sont du même ordre de grandeur :

$$u_1 \sim u_2 := u_0. \quad (1.154)$$

De plus, comme on considère des fluïdes macroscopiques, on a à la fois :

$$\frac{T u_1}{L} \sim 1 \quad \text{et} \quad \frac{T u_2}{L} \sim 1, \quad (1.155)$$

ce qui permet de réécrire :

$$\frac{T P_1}{L \rho_i u_i} \sim \frac{P_1}{\rho_i u_i^2}, \quad (1.156)$$

$$\frac{T u_{r_0} \lambda_0}{\rho_i u_i} \sim \frac{u_{r_0} \lambda_0 L}{\rho_i u_i^2}, \quad i = 1, 2. \quad (1.157)$$

On remplace dans la suite la vitesse caractéristique de chaque fluïde u_i par u_0 (1.154). Les équations adimensionnées des deux fluïdes donnent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\alpha^- \tilde{\rho}^- \tilde{u}^-) + \tilde{\nabla}(\alpha^- \tilde{\rho}^- \tilde{u}^- \otimes \tilde{u}^-) + \underbrace{\frac{P_1}{\rho_2 u_0^2}}_{\text{Pres2}} \alpha^- \tilde{\nabla} \tilde{p} \\ \sim - \underbrace{\frac{u_{r_0} L \lambda_0}{\rho_2 u_0^2}}_{D_{r2}} \tilde{\lambda} \tilde{u}_r + \underbrace{\frac{L g_0}{u_0^2}}_{\text{grav2}} \alpha^- \tilde{\rho}^- \tilde{g}, \end{aligned} \quad (1.158)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\alpha^+ \tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+) + \tilde{\nabla}(\alpha^+ \tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+ \otimes \tilde{u}^+) + \underbrace{\frac{P_1}{\rho_1 u_0^2}}_{\text{Pres1}} \alpha^+ \tilde{\nabla} \tilde{p} \\ \sim \underbrace{\frac{u_{r_0} L \lambda_0}{\rho_1 u_0^2}}_{D_{r1}} \tilde{\lambda} \tilde{u}_r + \underbrace{\frac{L g_0}{u_0^2}}_{\text{grav1}} \alpha^+ \tilde{\rho}^+ \tilde{g}. \end{aligned} \quad (1.159)$$

On voit que négliger les deux premiers termes des équations d'impulsion adimensionnées (1.158)-(1.159) revient à dire que certains des termes *Presi*, D_{ri} , *gravi* sont grands devant 1. On peut exprimer la grandeur caractéristique λ_0 de la force de traînée λ en fonction des autres grandeurs caractéristiques grâce à (1.143) :

$$\lambda = \underbrace{\frac{3}{8R} C_d \rho_2 u_{r0}}_{=\lambda_0} \underbrace{\frac{\alpha^+ \tilde{\rho}^- \tilde{u}_r}{\tilde{r}}}_{=\tilde{\lambda}}, \quad (1.160)$$

si bien que les coefficients devant les deux forces de traînée adimensionnées deviennent :

$$D_{r2} = \frac{3}{8} C_d \frac{(u_{r0})^2}{u_0^2} \frac{L}{R}, \quad (1.161)$$

$$D_{r1} = \frac{3}{8} C_d \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{(u_{r0})^2}{u_0^2} \frac{L}{R}. \quad (1.162)$$

L'idée sous-jacente pour utiliser un modèle de drift est de supposer que l'équilibre en vitesse entre les deux phases n'est pas encore atteint mais n'est pas trop éloigné si bien qu'on peut aussi supposer que $u_{r0} \sim u_0$. On reprend les ordres de grandeur liés aux simulations de type air-étain que l'on a rappelés dans la section 1.1.2 ou [Mat06]. Pour ces expériences, on a $L = 5 \cdot 10^{-3}$ et $R = 10^{-6}$, donc le rapport $\frac{L}{R}$ vaut $5 \cdot 10^3$ et est grand. Comme le nombre de Reynolds est grand, C_d est une constante (de l'ordre de 0,5). En faisant les applications numériques pour un $g_0 = 9,81$, des vitesses de fluide de l'ordre de 200 m.s^{-1} et les rapports de densité entre les deux fluides de l'ordre de $\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{0.616}{7310} \sim 8,4 \cdot 10^{-5}$, on obtient que les termes liés à la gravité sont faibles :

$$\text{gravi} \sim 10^{-6}. \quad (1.163)$$

Pour les termes de pression, on a :

$$\text{Pres1} \sim 0.06, \quad (1.164)$$

$$\text{Pres2} \sim 8 \cdot 10^2. \quad (1.165)$$

Enfin, pour les termes de traînée, celle du fluide léger est dictée par le rapport $\frac{L}{R}$ qui est grand :

$$D_{r2} \sim 10^3, \quad (1.166)$$

par contre, du fait de la présence du rapport de densité $\frac{\rho_2}{\rho_1}$ dans la traînée du fluide lourd, la traînée est faible du point de vue des gouttelettes. Cependant, comme l'équation sur u_r fait intervenir la différence des deux équations d'impulsion, la différence des termes de traînée et de pression des deux fluides sera bien prépondérante par rapport aux différences des termes d'inertie et de gravité.

1.2.2 Formalisation de l'obtention de la formule de vitesse relative via un développement de type Chapman-Enskog

Dans cette sous-section, on montre comment formaliser le calcul d'ordre de grandeur effectué dans la sous-section précédente, en se basant sur un développement asymptotique formel. On s'inspire pour cela de certains articles récents [GD07, ACC⁺08, GDLP07] ainsi que de la thèse de Gallié [Gal09], où sont considérés des systèmes bifluïdes à deux pressions isentropiques (i.e. sans équations sur l'énergie) et où est effectué un développement de type Chapman-Enskog dans l'équation sur u_r (1.64) préalablement adimensionnée. On pose :

$$\epsilon = \sqrt{\frac{R}{L}}, \quad (1.167)$$

où on rappelle que R correspond à r_{moy} , le rayon moyen des gouttelettes. On s'intéresse à la limite $\epsilon \rightarrow 0$ (cas des gouttelettes dont le rayon est petit devant une longueur caractéristique de l'écoulement). Seul le terme de traînée fait intervenir le paramètre ϵ , dans l'équation pour la vitesse relative¹ :

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla(u_r \cdot u) - \frac{\nabla(c_r |u_r|^2)}{2} - u^- \wedge \text{rot}(u^-) + u^+ \wedge \text{rot}(u^+) \\ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r. \end{aligned} \quad (1.168)$$

On pose donc :

$$\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho = \frac{4}{\rho(1 - c_r^2)} \frac{\lambda}{\epsilon^2}, \quad (1.169)$$

avec λ qui ne dépend pas de ϵ . L'équation sur u_r se réécrit :

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla(u_r \cdot u) - \frac{\nabla(c_r |u_r|^2)}{2} - u^- \wedge \text{rot}(u^-) + u^+ \wedge \text{rot}(u^+) \\ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{4}{\rho(1 - c_r^2)} \frac{\lambda}{\epsilon^2} |u_r| u_r. \end{aligned} \quad (1.170)$$

On cherche la solution u_r de (1.170) sous la forme d'un développement :

$$u_r = u_r^0 + \epsilon u_r^1 + O(\epsilon^2), \quad (1.171)$$

$$u^+ = u^{+0} + \epsilon u^{+1} + O(\epsilon^2), \quad (1.172)$$

$$u^- = u^{-0} + \epsilon u^{-1} + O(\epsilon^2), \quad (1.173)$$

conformément à la méthode de Chapman-Enskog. L'examen des termes en $\frac{1}{\epsilon^2}$ dans l'équation (1.170) montre que :

$$u_r^0 = 0. \quad (1.174)$$

Comme $u_r = u^- - u^+$, on en déduit que : $u^{-0} = u^{+0} = u^0$. L'examen des termes en ϵ^0 dans l'équation (1.170) implique ensuite que :

$$-u^0 \wedge \text{rot} u^0 + u^0 \wedge \text{rot} u^0 + \frac{1}{\rho_r} \nabla p = -\frac{4}{\rho(1 - c_r^2)} \lambda |u_r^1| u_r^1, \quad (1.175)$$

1. cela provient de la dépendance du coefficient de traînée λ (1.143) par rapport au rayon moyen des gouttelettes r_{moy} , cf. sous-section précédente (1.161)-(1.162)

d'où

$$\frac{1}{\rho_r} \nabla p = -\frac{4\lambda}{\rho(1-c_r^2)} |u_r^1| u_r^1, \quad (1.176)$$

et ainsi :

$$u_r^1 = -\sqrt{\frac{\rho(1-c_r^2)}{4} \frac{1}{\rho_r} \frac{1}{\lambda} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}} + O(\epsilon). \quad (1.177)$$

D'après la définition (1.169) de λ , on retrouve bien la formule attendue :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho} \frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}} + O(\epsilon), \quad (1.178)$$

en retournant à (1.171).

1.2.3 La vitesse relative vue comme un modèle de sous-mailles

Dans [GP06], on justifie l'utilisation de la formule (1.123) pour la vitesse relative en négligeant certains termes dans l'équation d'impulsion et en résolvant une équation simplifiée sur u_r . Dans la suite de cette section, on va rappeler la méthode utilisée et les simplifications basées sur des hypothèses physiques utilisées pour obtenir le résultat. On va détailler les étapes d'obtention ainsi que justifier certains passages. Les changements notables par rapport à l'article [GP06] sont les suivants : on détaille la vision de modèles de sous-mailles, on détaille la preuve de la Proposition 1.2.2 et on démontre le Théorème 1.2.3.

Cette formule approchée pour u_r est spécifique au modèle bifluide, à sa forme de force de traînée ainsi qu'aux hypothèses faites pour négliger certains termes dans l'équation (1.113). La formule n'est donc valable que pour un certain type d'écoulements. On verra en fin de section (sous-section 1.2.5) que la force de traînée utilisée dans le modèle bifluide n'est pas compatible avec une forte concentration de gouttelettes. Lorsqu'une telle forte concentration apparaît, une autre force de traînée pourra être utilisée, conduisant à une autre formule de vitesse relative, qui sera valide à forte concentration de gouttelettes.

L'originalité de la méthode de [GP06] réside dans l'obtention d'une solution approchée pour (1.113) en se plaçant à l'échelle d'une maille de discrétisation (d'où le nom de modèle de sous-maille). L'intérêt de se placer dans un modèle de sous-maille est qu'à cette échelle, les quantités physiques suivantes seront considérées comme constantes : ∇p , ρ^\pm et c^\pm . On se place donc à l'échelle d'une maille de discrétisation, on définit h la longueur caractéristique de la maille et r^* est proportionnel au rayon moyen d'une gouttelette (1.128) ($r^* = \frac{8}{3} r_{moy}$). Les gouttelettes seront supposées petites comparées à une maille : on a nécessairement $r^* \ll h$ (si bien qu'on peut se placer dans la limite $\frac{h}{r^*} \rightarrow +\infty$) : la résolution spatiale est faible [Dum04]. On a vu dans la sous-section précédente 1.2.1 que cela permettait aussi de rendre prépondérants les effets de la traînée dans l'équation sur la vitesse relative (1.113). On se place dans le cas 2D pour

exprimer la vitesse de dérive et c'est cette dimension qui nous intéresse pour insérer le modèle dans le code d'étude (cf. chapitre 4). On rappelle l'équation (issue par manipulation algébrique du modèle bifluide) obtenue pour l'équation de la vitesse relative u_r (1.113) :

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} - u^- \wedge \text{rot}(u^-) + u^+ \wedge \text{rot}(u^+) \\ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r. \end{aligned} \quad (1.179)$$

Afin d'obtenir une solution approchée de (1.179), on va supposer comme dans la sous-section 1.2.1 que

$$\partial_t(u^- - u^+) - u^- \wedge \text{rot}(u^-) + u^+ \wedge \text{rot}(u^+)$$

est négligeable devant :

$$\left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p,$$

mais on ne fait pas d'hypothèses pour $\nabla \left(\frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2}\right)$ (négligé dans la sous-section 1.2.1 avec le terme en $(u^- \cdot \nabla)u^- - (u^+ \cdot \nabla)u^+$ (1.58)). L'équation précédente (1.179) s'approxime alors sous la forme :

$$\nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \theta_\rho |u_r| u_r. \quad (1.180)$$

On souhaite justifier l'emploi de la formule simplifiée pour u_r (1.123) en résolvant l'équation (1.180) pour un type particulier de solutions initiales de la vitesse des deux fluides sur l'axe $x_2 = 0$, dans le cadre d'un modèle de sous-mailles.

Remarque 1.2.1 *La formule (1.123) revient a posteriori à annuler dans (1.180) : $\nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2}$. Si on retourne à la formule initiale (1.179), cela revient à considérer que :*

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \underbrace{\nabla(u_r \cdot u) - \frac{1}{2} \nabla(c_r |u_r|^2)}_{=\nabla\left(\frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2}\right) \text{ par (1.47)}} - u^- \wedge \text{rot}(u^-) + u^+ \wedge \text{rot}(u^+), \end{aligned} \quad (1.181)$$

est négligeable devant le terme $\frac{1}{\rho_r} \nabla p$, ce qui est conforme aux résultats obtenus dans la sous-section 1.2.1.

Toute la suite de cette section reprend l'obtention de la solution approchée de la vitesse relative u_r (1.123) de l'article de [GP06] : on suit la même démarche, en détaillant parfois certaines preuves (cf. en particulier la Proposition 1.2.2 ainsi que la démonstration du Théorème 1.2.3).

1.2.3.1 Formule asymptotique pour u_r vue dans le cadre d'un modèle de sous-maïlles

Le modèle HEM est un modèle à vocation numérique. La technique de résolution de l'équation (1.180) est une méthode dite de sous-maïlles. Dans chaque maille, les grandeurs physiques sont vues comme des constantes : ∇p , ρ^\pm ainsi que $\frac{r^*}{C^*\theta_\rho}$ (i.e. le coefficient de traînée C_d) seront donc considérées comme constantes. On se focalise sur une maille qui possède une vitesse de gaz u^- et le fluide de gouttelettes rentre dans cette maille en provenant d'une maille adjacente dont on connaît la vitesse à la sortie de cette maille. On suppose pour simplifier que le fluide de gouttelettes provient de la maille du dessous (les autres cas seront similaires). On installe sur cette maille un repère dans le coin bas gauche. La vitesse du fluide de gouttelettes à l'entrée de la maille devient la condition aux limites de l'équation (1.180) : en effet, le fluide de gouttelettes est entré par le bord bas de la maille et on connaît donc la valeur de la vitesse des gouttelettes $\begin{pmatrix} u_1^+ \\ u_2^+ \end{pmatrix}$ sur l'axe $x_2 = 0$ (Fig.1.3) ainsi que la vitesse du gaz dans la maille au moment où la gouttelette rentre donc aussi sur l'axe $x_2 = 0$: $u^-(x_2 = 0) = \begin{pmatrix} u_1^- \\ u_2^- \end{pmatrix}$. Dans toute la suite, on se place dans le cadre particulier où les vitesses de chacun des deux fluides vérifient la condition initiale sur l'axe $x_2 = 0$:

$$u^- \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.182)$$

$$u^+ \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.183)$$

où V est une constante positive :

$$V > 0. \quad (1.184)$$

Le modèle HEM est un modèle de mélange, ce type de modèle n'est valide que si le rayon moyen des gouttelettes r^* est petit à l'échelle de la maille (donc petit devant Δx_1 et Δx_2). L'objectif est de connaître la valeur de $u^- - u^+$ à la sortie de la maille, i.e. en $x_2 = \Delta x_2$ (en supposant que les gouttelettes ressortent de la maille par le haut). On veut se concentrer sur la maille de discrétisation choisie pour la résolution. On propose dans [GP06] le changement de variable suivant : $y = \frac{C^*\theta_\rho}{r^*}x$. L'équation (1.180) s'écrit alors :

$$\nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} + \frac{r^*}{C^*\theta_\rho} \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+} \right) \nabla p = -|u_r|u_r. \quad (1.185)$$

Comme on est dans un cadre où le rapport $\frac{h}{r^*}$ est grand ($h := \min(\Delta x_1, \Delta x_2)$), l'effet du changement de variable est de "dilater" la maille de discrétisation. A la limite (lorsque le rapport $\frac{h}{r^*} \rightarrow +\infty$), regarder la vitesse en sortie de maille

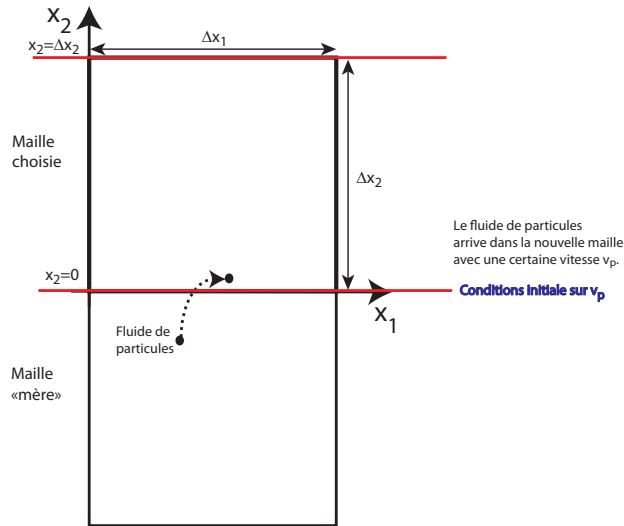


FIGURE 1.3 – Le fluide de gouttelettes entre dans la maille considérée par l'axe $x_2 = 0$, ce qui donne une condition initiale pour la résolution de (1.185) sur la vitesse de fluide lourd sur l'axe $x_2 = 0$.

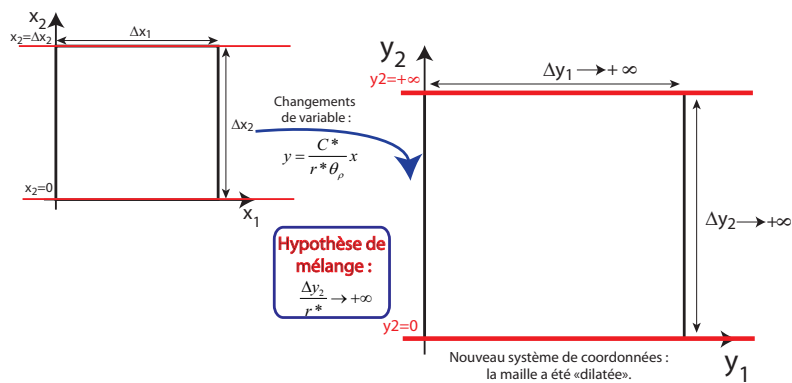


FIGURE 1.4 – L'effet du changement de variable (sous l'hypothèse de mélange à savoir $\frac{\Delta y_2}{r^*} \rightarrow +\infty$) est de dilater la maille considérée et la condition de sortie de maille devient la "droite" $y_2 \rightarrow +\infty$: on fait un zoom sur la maille.

correspond à regarder sur l'axe $y_2 = \frac{C^* \theta_\rho}{r^*} x_2 \rightarrow +\infty$ (cf. Fig. 1.4). Les conditions aux limites en entrée de maille qui étaient définies sur l'axe $x_2 = 0$ le sont maintenant sur l'axe $y_2 = 0$ et restent identiques. L'objectif est de vérifier sous ces hypothèses que :

$$u_r \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} - \sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}} \quad (1.186)$$

1.2.4 Résolution de l'équation (1.185)

On pose : $u^- = Vv^-$, $u^+ = Vv^+$ et on définit le vecteur constant :

$$\Pi := -\frac{r^*}{C^*\theta_\rho V^2} \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+} \right) \nabla p. \quad (1.187)$$

L'équation (1.185) devient :

$$\nabla \frac{|v^-|^2 - |v^+|^2}{2} - \Pi = -|v^- - v^+|(v^- - v^+), \quad (1.188)$$

avec pour conditions initiales sur l'axe $y_2 = 0$ (d'après (1.182)-(1.183)) :

$$v^- \begin{pmatrix} y_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.189)$$

$$v^+ \begin{pmatrix} y_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.190)$$

Grâce à la condition imposée sur l'axe $y_2 = 0$, si v est solution de (1.188) avec les conditions aux limites (1.189), (1.190), alors $w(y_1, y_2) = v(y_1 + c, y_2)$ est encore solution (où c est une constante quelconque) de (1.188) et vérifie bien les conditions (1.189), (1.190). Cette propriété permet de chercher v^\pm uniquement en fonction de y_2 si bien que (comme $\partial_{y_1} v^\pm = 0$), la première composante de $\nabla \frac{|v^-|^2 - |v^+|^2}{2}$ est nulle. Il reste donc deux équations à résoudre :

$$\Pi_1 = |v^- - v^+|(v_1^- - v_1^+), \quad (1.191)$$

$$\partial_{y_2} \left(\frac{|v^-|^2 - |v^+|^2}{2} \right) - \Pi_2 = |v^- - v^+|(v_2^- - v_2^+). \quad (1.192)$$

• De la première équation (1.191), [GP06] obtient que :

Proposition 1.2.2 *Soit $r^* > 0$, $C^* > 0$, $\theta_\rho > 0$, V , ρ^- , ρ^+ , ∇p des quantités constantes. On suppose de plus que $\rho^- < \rho^+$. On suppose que (1.187) et (1.191) sont vérifiées par des fonctions v^- et v^+ dépendant de y_2 uniquement et telles que (1.189)-(1.190) soient vérifiés. Alors la valeur de la première composante du vecteur constant Π (1.187) est : $\Pi_1 = 1$. De plus, la valeur de la constante V apparaissant dans (1.182) est :*

$$V = \sqrt{-\frac{r^*}{C^*\theta_\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+} \right)}. \quad (1.193)$$

Preuve de la Proposition 1.2.2 : En élevant (1.191) au carré, il vient :

$$\Pi_1^2 = |v^- - v^+|^2 (v_1^- - v_1^+)^2, \quad (1.194)$$

et en posant $X = (v_1^- - v_1^+)^2$ et $Y = (v_2^- - v_2^+)^2$, (1.194) devient :

$$X^2 + YX - \Pi_1^2 = 0. \quad (1.195)$$

C'est une équation en X (à Y fixé) qui possède 2 racines réelles :

$$X_1 = \frac{-Y - \sqrt{Y^2 + 4\Pi^2}}{2},$$

$$X_2 = \frac{-Y + \sqrt{Y^2 + 4\Pi^2}}{2},$$

dont on conserve la racine positive : $X = X_2$ (on rappelle que $X = (v_1^- - v_1^+)^2$). De (1.194), on tire $X = \frac{\Pi_1^2}{X+Y}$, i.e. $X = \frac{2\Pi_1^2}{Y + \sqrt{Y^2 + 4\Pi_1^2}}$. En prenant la racine, on obtient :

$$|v_1^- - v_1^+| = \frac{\sqrt{2}|\Pi_1|}{\sqrt{(v_2^- - v_2^+)^2 + \sqrt{(v_2^- - v_2^+)^4 + 4\Pi_1^2}}}. \quad (1.196)$$

Comme $v_1^- - v_1^+$ est du signe de Π_1 d'après (1.191), on a :

$$v_1^- - v_1^+ = \frac{\sqrt{2}\Pi_1}{\sqrt{(v_2^- - v_2^+)^2 + \sqrt{(v_2^- - v_2^+)^4 + 4\Pi_1^2}}}, \quad (1.197)$$

et d'après (1.191) toujours,

$$|v^- - v^+| = \frac{\sqrt{(v_2^- - v_2^+)^2 + \sqrt{(v_2^- - v_2^+)^4 + 4\Pi_1^2}}}{\sqrt{2}}. \quad (1.198)$$

On rappelle que Π (1.187) est un vecteur constant, en particulier pour $y_2 = 0$, en utilisant les conditions aux limites (1.189) ainsi que (1.190) dans (1.197), on a $\Pi_1 = 1$. Comme r^* , C^* et θ_ρ sont positifs, et que $\rho^- < \rho^+$, la définition de la première composante du vecteur constant Π , Π_1 (1.187) implique que $\frac{\partial p}{\partial x_1} < 0$ (signe opposé de Π_1 qui vaut 1) et (1.187) conduit à la valeur de V (V positif par hypothèse (1.184)) :

$$V = \sqrt{-\frac{r^* \frac{\partial p}{\partial x_1}}{C^* \theta_\rho} \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+} \right)}. \quad (1.199)$$

On conclut ainsi la preuve de la Proposition 1.2.2.

• On passe maintenant à la résolution de la deuxième équation (1.192) : on fait dans [GP06] le changement de variables :

$$\theta = \arg \sinh \frac{(v_2^- - v_2^+)^2}{2} \geq 0. \quad (1.200)$$

On a donc (comme $v_2^\pm(0) = 0$ par hypothèse) :

$$\theta(0) = 0, \quad (1.201)$$

et on obtient que

$$v_2^- - v_2^+ = \epsilon \sqrt{2 \sinh \theta}, \quad (1.202)$$

avec $\epsilon = \pm 1$. On remarque que l'utilisation de la variable θ (1.200)-(1.201) permet de réécrire l'équation différentielle (1.192) sous la forme suivante :

$$\frac{d}{dy_2} \left(\frac{1}{2} \exp \theta + (v_1^+ + v_2^+ \epsilon \sqrt{\exp(2\theta) - 1}) \exp\left(-\frac{\theta}{2}\right) \right) = \Pi_2 - \epsilon \sqrt{\exp(2\theta) - 1},$$

$$\theta(0) = 0. \quad (1.203)$$

En effet, comme $\Pi_1 = 1$, en reportant dans (1.197) et (1.198), on obtient que :

$$v_1^- - v_1^+ = \exp -\frac{\theta}{2}, \quad (1.204)$$

$$|v^- - v^+| = \exp \frac{\theta}{2}. \quad (1.205)$$

On réécrit l'équation (1.192) en fonction de la variable θ . Comme :

$$2(\sinh \theta) \exp \theta = \exp 2\theta - 1, \quad (1.206)$$

le membre de droite s'écrit :

$$|v^- - v^+|(v_2^- - v_2^+) = \Pi_2 - \epsilon \sqrt{\exp(2\theta) - 1}. \quad (1.207)$$

On se sert ensuite de la relation :

$$|v^-|^2 - |v^+|^2 = |v^- - v^+|^2 + 2v_1^+(v_1^- - v_1^+) + 2v_2^+(v_2^- - v_2^+).$$

On voit donc que le membre de gauche devient :

$$\partial_{y_2} \left(\frac{|v^-|^2 - |v^+|^2}{2} \right) - \Pi_2 = \frac{d}{dy_2} \left(\frac{1}{2} \exp \theta + v_1^+ \exp\left(-\frac{\theta}{2}\right) + v_2^+ \epsilon \sqrt{2 \sinh \theta} \right).$$

On en déduit que résoudre (1.192) revient bien à résoudre (1.203)-(1.203). On pose pour plus de clarté :

$$E(y_2) = \exp(\theta(y_2)), \quad (1.208)$$

$$w(y_2) = 2(v_1^+ + v_2^+ \epsilon \sqrt{\exp(2\theta(y_2)) - 1}) \exp\left(-\frac{\theta(y_2)}{2}\right), \quad (1.209)$$

$$L(F) := 2(\Pi_2 - \epsilon \sqrt{F^2 - 1}). \quad (1.210)$$

On peut ainsi écrire (1.203)-(1.203) sous la forme :

$$\frac{d}{dy_2} (E + w) = L(E), \quad (1.211)$$

$$E(0) = 1 ; w(0) = 0. \quad (1.212)$$

Afin de résoudre ce système, on va faire deux hypothèses. On suppose que :

$$v_2^\pm \text{ ainsi que } v_1^+ \text{ tendent vers des limites finies lorsque } y_2 \rightarrow +\infty,$$

$$\frac{dv_i^\pm}{dy_2} \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} 0, i = 1, 2. \quad (1.213)$$

Faire cette hypothèse est raisonnable du point de vue de la modélisation car la condition $y_2 \rightarrow +\infty$ correspond à la valeur des vitesses en sortie de mailles.

Théorème 1.2.3 *Sous la condition de limite finie sur les vitesses des deux phases ainsi que leurs dérivées (1.213), on suppose que E s'écrit sous la forme (1.202), (1.208), w sous la forme (1.209) et que L vérifie (1.210), alors la solution E du système (1.211)-(1.212) a, elle aussi, une limite finie lorsque $y_2 \rightarrow +\infty$. De plus, cette limite vaut :*

$$E \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} \sqrt{\Pi_2^2 + 1}, \quad (1.214)$$

et la quantité ϵ de l'équation (1.202) vaut :

$$\epsilon = \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|}. \quad (1.215)$$

Preuve du Théorème 1.2.3 :

- Le premier point est vérifié immédiatement : en retournant à la définition de E (1.202), (1.208) et avec les conditions de limite finie sur les vitesses (1.213), il vient :

$$E \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} L_3, \quad (1.216)$$

où L_3 est une constante. On obtient de plus que la dérivée de E tend vers 0 :

$$\frac{dE}{dy_2} \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} 0. \quad (1.217)$$

Ces deux limites vont nous permettre de démontrer la suite du théorème, et on va avoir aussi besoin de la dérivée de la fonction w (1.209) :

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dy_2} &= 2 \frac{dv_1^+}{dy_2} E^{-1/2} + 2 \frac{dv_2^+}{dy_2} \epsilon \frac{\sqrt{E^2-1}}{\sqrt{E}} \\ &\quad + 2\epsilon v_2^+ \frac{dE}{dy_2} \frac{E^{1/2}}{\sqrt{E^2-1}} \\ &\quad - (v_1^+ + v_2^+ \epsilon \sqrt{E^2-1}) \frac{dE}{dy_2} \frac{1}{E^{3/2}}. \end{aligned} \quad (1.218)$$

- On commence par obtenir la valeur de ϵ qui vaut de part sa définition (1.202) : ± 1 . On raisonne par l'absurde en supposant $\epsilon = -\frac{\Pi_2}{|\Pi_2|}$, dans ce cas là dans le système (1.211)-(1.212), la quantité $L(E)$ (1.210) s'écrit :

$$L(E) := 2(\Pi_2 + \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|} \sqrt{E^2-1}) > 0. \quad (1.219)$$

Ainsi, comme E converge vers une limite finie (1.216) lorsque $y_2 \rightarrow +\infty$, et que la constante $\Pi_2 \neq 0$, nécessairement $L(E)$ converge vers une limite finie strictement positive (L_4) lorsque $y_2 \rightarrow +\infty$. En retournant à (1.211), on a (comme la dérivée de E tend vers 0 (1.217)),

$$\frac{dw}{dy_2} \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} -L_4 < 0. \quad (1.220)$$

Or la limite de $\frac{dw}{dy_2}$ est nulle d'après (1.218) en utilisant les conditions sur les vitesses en sortie de mailles (1.213), ainsi que (1.216)-(1.217). Ceci constitue la contradiction et ainsi $\epsilon = \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|}$.

– On peut maintenant obtenir la limite de E . Comme $\epsilon = \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|}$, on a d'après (1.210) :

$$L(E) \xrightarrow{y_2 \rightarrow +\infty} \Pi_2 - \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|} \sqrt{L_3^2 - 1}. \quad (1.221)$$

Comme on a par (1.217) et (1.218) :

$$\lim_{y_2 \rightarrow +\infty} \frac{dw}{dy_2} + \frac{dE}{dy_2} = 0, \quad (1.222)$$

nécessairement :

$$L(E) \xrightarrow{y_2 \rightarrow +\infty} 0, \quad (1.223)$$

et par définition de $L(E)$ (1.210), on obtient que :

$$E \xrightarrow{y_2 \rightarrow +\infty} \sqrt{\Pi_2^2 + 1}, \quad (1.224)$$

ce qui termine la preuve du Théorème 1.2.3.

On peut dorénavant retourner à la définition de E (1.208) pour obtenir que :

$$\theta^* := \lim_{y_2 \rightarrow +\infty} \theta = \frac{1}{2} \ln(1 + \Pi_2^2), \quad (1.225)$$

et ainsi :

$$\Pi_2 = \epsilon \sqrt{\exp(2\theta^* - 1)}. \quad (1.226)$$

($\epsilon = \text{signe}(\Pi_2)$ d'après (1.215)). En passant à la limite dans (1.204), on obtient immédiatement grâce à (1.225) que :

$$v_1^- - v_1^+ \xrightarrow{y_2 \rightarrow +\infty} \frac{1}{(1 + \Pi_2^2)^{1/4}}. \quad (1.227)$$

$$(1.228)$$

De plus, grâce à (1.207) et (1.202) (en utilisant $2 \sinh(\theta) = e^{-\theta}(e^{2\theta} - 1)$), et comme $\epsilon = \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|}$ (1.215) :

$$v_2^- - v_2^+ = \frac{\Pi_2}{|\Pi_2|} \exp\left(-\frac{\theta}{2}\right) \sqrt{\exp(2\theta) - 1} \quad (1.229)$$

$$\xrightarrow{y_2 \rightarrow +\infty} \frac{\Pi_2}{(1 + \Pi_2^2)^{1/4}}. \quad (1.230)$$

On retourne dorénavant aux variables initiales :

$$u^- - u^+ = V(v^- - v^+) \quad (1.231)$$

$$\xrightarrow{y_2 \rightarrow +\infty} V \frac{1}{\sqrt{(1 + \Pi_2^2)^{1/2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \Pi_2 \end{pmatrix}, \quad (1.232)$$

grâce à (1.227) et (1.230). Or on a montré à la Proposition 1.2.2 que $\Pi_1 = 1$, donc

$$u^- - u^+ \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} V \frac{\Pi}{|\Pi|^{1/2}}. \quad (1.233)$$

Or d'après la définition de Π (1.187), on a :

$$\frac{\Pi}{|\Pi|^{1/2}} = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho} \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+} \right)} \frac{1}{V} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}. \quad (1.234)$$

On obtient donc la formule pour la vitesse relative :

$$u_r \rightarrow_{y_2 \rightarrow +\infty} -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho} \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+} \right)} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}. \quad (1.235)$$

Cette formule correspond à la vitesse relative en sortie de la maille dilatée, ce qui permet d'avoir la condition de bord pour la maille voisine et de pouvoir recommencer la résolution. Le résultat étant obtenu pour une maille quelconque, dans chaque maille de discrétisation, u_r vérifie asymptotiquement la relation précédente (1.235).

1.2.5 Modélisation de la traînée : symétrisation du système HEM

Dans cette section, on va revenir sur l'expression de la traînée entre les gouttelettes et le fluide léger. On a vu que la solution approchée obtenue pour u_r (1.123) est intimement liée à la forme de la force de traînée du système bifluide initial. La traînée utilisée jusqu'à présent dans ce chapitre est celle de la thèse de [Mat06] (présente aussi dans [DP99]) (équations de conservation de l'impulsion (1.10)). Ce terme s'exprime sous la forme :

$$\pm \frac{3}{8r} \alpha^+ \rho^- C_d |u_r| u_r, \quad (1.236)$$

et qui conduit aux équations sur la vitesse du fluide lourd et léger (1.56). La formule de vitesse relative qui en découle (1.235) se réécrit en explicitant θ_ρ :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^* c^-}{C^*}} \sqrt{\frac{|\rho^+ - \rho^-|}{(\rho^-)^2}} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}. \quad (1.237)$$

On voit dans cette formule que lorsque qu'il y a beaucoup de fluide lourd, (i.e. lorsque $c^- \rightarrow 0$), la vitesse relative u_r tend vers 0, ce qui ne devrait pas être le cas. Cela est dû au fait que ce type de traînée doit être seulement utilisé dans des cas où le fluide lourd n'est pas présent en trop grosse quantité. On voit directement dans le système bifluide de départ (dans l'équation d'impulsion du fluide léger (1.10)) que lorsque la fraction volumique de gaz α^- tend vers 0, tous les termes s'annulent hormis la traînée (ce modèle a donc une limite à forte concentration de fluide lourd comme indiqué dans la remarque 1.1.1).

Une forme de traînée alternative est présente dans des articles relatifs à l'instabilité de Rayleigh-Taylor (i.e. dans le cadre d'un fluide lourd situé au dessus d'un fluide léger) [You84, You89]. En ne prenant pas en compte les termes relatifs à la turbulence, la force de traînée s'exprime cette fois-ci comme :

$$-\frac{3}{8r} \frac{C_d \alpha^+ \alpha^- \rho}{r} |u_r| u_r, \quad (1.238)$$

et les équations sur la vitesse de chacun des deux fluides (1.56) deviennent :

$$\partial_t u^- + u^- \cdot \nabla u^- + \frac{1}{\rho^-} \nabla p = -\frac{3}{8r} C_d \frac{\alpha^+ \rho}{\rho^-} |u^- - u^+| (u^- - u^+), \quad (1.239)$$

ainsi que

$$\partial_t u^+ + u^+ \cdot \nabla u^+ + \frac{1}{\rho^+} \nabla p = -\frac{3}{8r} C_d \frac{\alpha^- \rho}{\rho^+} |u^- - u^+| (u^- - u^+), \quad (1.240)$$

si bien que l'équation sur la vitesse relative (1.241) devient :

$$\begin{aligned} \partial_t u_r + \nabla \frac{|u^-|^2 - |u^+|^2}{2} - u^- \wedge \text{rot}(u^-) + u^+ \wedge \text{rot}(u^+) \\ + \left(\frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}\right) \nabla p = -\frac{C^*}{r^*} \frac{\rho^2}{\rho^- \rho^+} |u_r| u_r. \end{aligned} \quad (1.241)$$

Une démarche similaire à celle de la section 1.2 (en remplaçant θ_ρ par $\frac{\rho^2}{\rho^- \rho^+}$) conduit à la formule de vitesse relative suivante :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^*}} \sqrt{\frac{|\rho^+ - \rho^-|}{\rho^2}} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}, \quad (1.242)$$

ce qui correspond à la formule de vitesse relative obtenue dans [You89] (en ne prenant toujours pas en compte les termes de turbulence). Si on note $\theta_{\rho 2} = \frac{\rho^2}{\rho^- \rho^+}$, le terme de traînée du modèle HEM devient :

$$F_{D2} = \rho \theta_{\rho 2} \frac{C^*}{r^*} \frac{1 - c_r^2}{4} |u_r| u_r. \quad (1.243)$$

L'intérêt d'utiliser le terme de traînée (1.238) associé à la formule de fermeture pour la vitesse relative (1.242) et au terme de force de traînée F_{D2} (1.243) dans le système HEM est que cette fois-ci, la vitesse relative ne dépend pas de la concentration de fluide lourd dans une maille. De plus, les termes sont maintenant symétriques entre le fluide $-$ et le fluide $+$. L'emploi de l'une ou de l'autre des formules de vitesse relative (1.235) ou (1.242) dépendra donc des applications que l'on souhaite faire. Pour un comparatif des différents termes de traînée existants de la littérature, on pourra consulter notamment [IM84, IZ79] ou le livre de Drew et Passmann [DP99].

Schéma BBC pour le modèle HEM

Dans le chapitre précédent, on a obtenu le modèle de mélange homogène équilibré avec une équation d'énergie interne (1.119)-(1.132). Un des objectifs de la thèse est l'implémentation de ce modèle HEM dans un code d'étude du CEA. Celui-ci possède déjà une brique de base pour l'implémentation du modèle : un modèle de mélange à une seule vitesse (à la fois isobare/isotherme et isovitesse) qui forme un cas particulier des équations HEM lorsque la vitesse relative u_r est égale à 0 (et donc sans équations sur la concentration relative). Une contrainte du code (et à la fois un avantage sachant qu'une partie de la discrétisation et de la gestion des variables a déjà été effectuée) est d'utiliser le schéma numérique BBC employé pour le mélange classique et introduit par Woodward et Colella [WC84] en 1984. C'est un schéma de type "Lagrange-projection". La phase lagrangienne se décompose en deux niveaux temporels et la discrétisation en espace utilise un maillage décalé, ce qui permet d'apparenter ce schéma à un schéma de type saute-mouton. Dans la section suivante (2.1), on va décrire le principe des schémas Lagrange-projection et les différentes étapes pour obtenir une variable au pas de temps $n + 1$ lorsque l'on connaît l'ensemble des variables au pas de temps n . Les deux dernières sections sont consacrées à la preuve (en $1D$) que la partie lagrangienne du schéma BBC classique est un schéma d'ordre 2 en temps et en espace (section 2.2) et que celle du schéma modifié pour le modèle HEM (BBC-HEM) perd cette propriété et est seulement d'ordre 1.

2.1 Cycle de calcul HEM

2.1.1 A propos du schéma BBC

Le schéma BBC a été conçu pour discrétiser les équations d'Euler d'un fluide compressible, à savoir :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (2.1)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u \otimes u) + \nabla p = 0, \quad (2.2)$$

$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e u) + p(\operatorname{div} u) = 0, \quad (2.3)$$

avec la pression p déterminée par une équation d'état :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e\right), \quad (2.4)$$

où f est une fonction dépendant du matériau considéré. Le schéma a été étendu pour les équations d'Euler caractérisant un mélange de deux fluides à l'équilibre en température, pression et vitesse. Ces équations forment un système identique au système précédent auquel on ajoute une équation de transport de la concentration relative du mélange c_r :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (2.5)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u \otimes u) + \nabla p = 0, \quad (2.6)$$

$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e u) + p(\operatorname{div} u) = 0, \quad (2.7)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \operatorname{div}(\rho u c_r) = 0, \quad (2.8)$$

avec la pression p déterminée cette fois-ci par une équation d'état dépendant de la concentration relative du mélange c_r :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e, c_r\right). \quad (2.9)$$

Au niveau du code d'étude du CEA, plusieurs types d'équations d'état sont disponibles pour le fluide lourd et le fluide léger, on peut citer notamment :

- les équations d'état de type gaz parfaits,
- les équations de type "stiffened gas",
- les équations tabulées.

Pour toutes ces équations d'état, l'identité (2.9) est une formule générique : les équations qui sont réellement résolues dépendent du caractère compressible ou non de la phase lourde : si le fluide lourd est compressible, la résolution de la pression est implicite et se fait par un algorithme de Newton sur le système :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} &= \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \\ p &= P^-(\rho^-, T) = P^+(\rho^+, T), \\ e &= c^+ e^+(\rho^+, T) + c^- e^-(\rho^-, T), \end{aligned} \quad (2.10)$$

avec $c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}$ (1.42), les fonctions P^\pm et e^\pm , dépendant de la température T et des densités de chaque fluide ρ^\pm , sont connues explicitement. On connaît via la résolution du système (2.5)-(2.9) : la densité moyenne ρ , l'énergie interne moyenne e , ainsi que les deux concentrations de fluide lourd et léger : c^\pm . A partir des quatre équations du système (2.10), l'algorithme de Newton permet d'obtenir : ρ^+ , ρ^- , T et p .

Remarque 2.1.1 *La résolution est par contre plus directe si le fluide lourd est incompressible (ρ^+ est alors une constante donnée), on a à résoudre dans ce cas le système suivant :*

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} &= \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \\ p &= P^-(\rho^-, T), \\ e &= c^+ e^+(\rho^+, T) + c^- e^-(\rho^-, T) \end{aligned} \quad (2.11)$$

avec toujours c^\pm vérifiant : $c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}$. La première et la troisième équation du système précédent (2.11) sont résolues par un algorithme de Newton : à partir des quantités ρ , e , c^\pm ainsi que ρ^+ connues, on obtient ρ^- et la température du mélange T . Ensuite, la deuxième équation de (2.11) permet d'en déduire la pression p du mélange.

Dans tous les cas (compressible ou non), on peut donc considérer que la pression est une fonction de ρ , e et c_r et dans toute la suite, on écrira simplement la formule générique (2.9).

2.1.1.1 Bref aperçu des différents types de schémas numériques existants

Pour résoudre ce type d'équations issues de la dynamique des gaz, plusieurs points de vue sont possibles. Le premier (eulérien) dans lequel le repère (et donc le maillage) reste fixe et voit le fluide évoluer. Ces méthodes nécessitent de traiter des termes d'advection (transport des quantités). Un autre point de vue consiste à se placer dans le référentiel mobile du gaz en mouvement, ce qui nécessite d'exprimer les dérivées partielles en fonction des nouvelles coordonnées mobiles ; hormis dans le cas $1D$, l'expression du jacobien de la transformation est complexe [Des10, Lou02, MABO07]. Un point de vue intermédiaire consiste à écrire les équations sur un maillage mobile qui suit le mouvement (i.e. en termes de dérivées temporelles matérielles $D_t = \partial_t + u \cdot \nabla$) mais en conservant les dérivées partielles (d'espace) exprimées sur le maillage fixe. C'est le principe des schémas Lagrange-projection. Pour plus de précisions sur cette classe de schémas, on pourra consulter [GR96, Lag00] ou [Des10].

Le système (2.5)-(2.8) se réécrit, en supposant que la densité ρ du fluide est une fonction strictement positive, en terme de volume spécifique $\tau = \frac{1}{\rho}$:

$$\partial_t \frac{1}{\rho} + u \cdot \nabla \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} (\operatorname{div} u), \quad (2.12)$$

$$\partial_t u + (u \cdot \nabla) u = -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (2.13)$$

$$\partial_t c_r + u \cdot \nabla c_r = 0, \quad (2.14)$$

$$\partial_t e + u \cdot \nabla e + \frac{p}{\rho} \operatorname{div} u = 0, \quad (2.15)$$

avec toujours l'équation d'état permettant d'obtenir la pression :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e, c_r\right). \quad (2.16)$$

Si on "isole" la partie advective, i.e. en utilisant l'opérateur de dérivée matérielle $D_t = \partial_t + u \cdot \nabla$, le système précédent se réécrit :

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} (\operatorname{div} u), \quad (2.17)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (2.18)$$

$$D_t c_r = 0, \quad (2.19)$$

$$D_t e + \frac{p}{\rho} \operatorname{div} u = 0, \quad (2.20)$$

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e, c_r\right). \quad (2.21)$$

Par abus de notations, D_t est souvent appelée dérivée lagrangienne (même si dans le système précédent le repère est mobile (utilisation de D_t) mais l'opérateur spatial reste exprimé à l'aide des coordonnées eulériennes).

Depuis les années 50, d'abord pour le cas $1D$, VonNeumann et Richtmyer [VR50] puis pour l'extension à $2D$, Wilkins [Wil63], se sont rendu compte qu'une manière naturelle de faire la discrétisation en espace de ces équations (2.17)-(2.20) était d'utiliser un maillage décalé (maillage MAC) (Fig.2.1) avec les vitesses connues aux cloisons des mailles et les autres quantités physiques (densité/énergie et pression) définies au centre des mailles : ainsi pour les équations définies au centre, (2.17) et (2.20), la divergence porte sur la vitesse définie aux cloisons et inversement pour l'équation de la vitesse dont l'opérateur porte sur la pression définie au centre. Ce type de schéma s'apparente finalement à un schéma de type saute-mouton. Un inconvénient est que cela entraîne de l'instabilité en présence de chocs. Cet inconvénient sera compensé par l'ajout d'un terme purement numérique au système d'équations (2.17)-(2.21) : la pseudo-viscosité. Un schéma Lagrange-projection résout à chaque pas de temps une étape "lagrangienne" qui consiste à résoudre les équations (2.17)-(2.21) et à la fin de chaque pas de temps, les quantités obtenues le sont sur un maillage mobile : une étape de projection est alors nécessaire afin d'obtenir les grandeurs sur la grille eulérienne fixe du début de pas de temps.

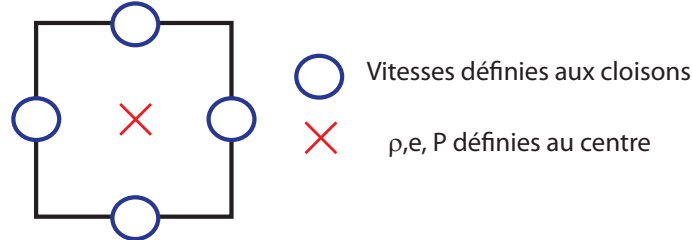


FIGURE 2.1 – Maillage MAC décalé du schéma BBC : les vitesses sont définies aux cloisons et les autres grandeurs au centre des mailles.

On présente une manière plus formelle de voir ce couplage entre résolution lagrangienne puis projection (on se restreint au cas $2D$ mais le cas $3D$ est similaire) : on se place sur les courbes caractéristiques X et Y de l'écoulement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} &= u_1(t, X, Y), & X(0, x, y) &= x, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} &= u_2(t, X, Y), & Y(0, x, y) &= y, \end{aligned} \quad (2.22)$$

où u_1 et u_2 sont les composantes du vecteur vitesse u et x et y les variables d'espace.

On introduit le vecteur H :

$$H(t, x, y) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho}(t, X(t, x, y), Y(t, x, y)) \\ u_1(t, X(t, x, y), Y(t, x, y)) \\ u_2(t, X(t, x, y), Y(t, x, y)) \\ c_r(t, X(t, x, y), Y(t, x, y)) \\ e(t, X(t, x, y), Y(t, x, y)) \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

et ainsi, grâce à (2.22) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t}(t, x, y) &= \begin{pmatrix} \partial_t \frac{1}{\rho} + \frac{\partial X(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial Y(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial y} \\ \partial_t u_1 + \frac{\partial X(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial Y(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial u_1}{\partial y} \\ \partial_t u_2 + \frac{\partial X(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{\partial Y(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ \partial_t c_r + \frac{\partial X(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial c_r}{\partial x} + \frac{\partial Y(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial c_r}{\partial y} \\ \partial_t e + \frac{\partial X(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial Y(t, x, y)}{\partial t} \frac{\partial e}{\partial y} \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} \partial_t \frac{1}{\rho} + u \cdot \nabla \frac{1}{\rho} \\ \partial_t u_1 + u \cdot \nabla u_1 \\ \partial_t u_2 + u \cdot \nabla u_2 \\ \partial_t c_r + u \cdot \nabla c_r \\ \partial_t e + u \cdot \nabla e \end{pmatrix} (t, X(t, x, y), Y(t, x, y)), \end{aligned}$$

si bien qu'en utilisant (2.12)-(2.15), on obtient :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho}(\operatorname{div} u) \\ -\frac{1}{\rho} \nabla p \\ 0 \\ -\frac{p}{\rho} \operatorname{div} u \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Ce "changement de variables" a permis de faire disparaître les termes d'advection mais par contre à chaque pas de temps, il faut prendre en compte son effet : il fait évoluer le maillage (car les opérateurs de discrétisation spatiale sont encore définis sur la grille eulérienne de départ). Ainsi la phase de projection n'est plus vue comme la résolution d'une équation d'advection mais simplement une étape qui permet d'obtenir les grandeurs physiques non pas sur le maillage qui a évolué mais sur la grille eulérienne (fixe) du début de pas de temps.

2.1.1.2 Description du schéma BBC utilisé dans le code d'étude du CEA

Le schéma BBC [WC84] se place dans la lignée des schémas Lagrange-projection et a été développé dans les années 80 par une équipe de Los Alamos. Il utilise pour sa partie lagrangienne un schéma modifié du schéma lagrangien de [VR50] développé pour le code KRAKEN par DeBar [DeB74], auquel vient s'ajouter une étape de projection de type MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Law) introduit par Van Leer [Lee79], qui consiste à regarder comment le fluide est transporté et à recalculer ses propriétés sur le maillage fixe eulérien (on peut consulter par exemple [Har89]). Ce schéma, bien que formulé en énergie interne (ce qui correspond bien aux contraintes du CEA d'utilisation d'équations d'état dépendants de l'énergie interne) a la propriété d'être conservatif en énergie totale (contrairement aux schémas antérieurs de [VR50] et [Wil63]).

Le maillage eulérien du schéma BBC est un maillage cartésien. On commence par se focaliser sur la partie lagrangienne de la résolution du système (2.5)-(2.9),

(2.17)-(2.21). Le schéma BBC utilise le maillage décalé (Fig.2.1) qui conduit à une instabilité du schéma numérique en présence de chocs. L'idée de [VR50], reprise ensuite par [Wil80] était d'ajouter un terme artificiel (pseudo-viscosité) à la pression pour augmenter la valeur de celle-ci lorsqu'un choc en compression se produit (de telle sorte que cela ait un effet négligeable à l'extérieur de la zone de choc). Un choc en compression correspond à avoir $\text{div}u < 0$ et la pseudo-viscosité est introduite dans les deux équations de conservation de l'impulsion et de l'énergie aux côtés de la pression afin d'étaler le choc en le dissipant, i.e. de transférer l'énergie cinétique induite par le choc en énergie interne. Cette grandeur est homogène à une pression et on la note q . Le système que l'on résout réellement n'est donc pas (2.17)-(2.21) mais :

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} (\text{div}u), \quad (2.25)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \nabla(p + q), \quad (2.26)$$

$$D_t c_r = 0, \quad (2.27)$$

$$D_t e + (p + q) \frac{1}{\rho} \text{div}u = 0, \quad (2.28)$$

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e, c_r\right). \quad (2.29)$$

La pseudo-viscosité est finalement une force artificielle ajoutée au système qui est nulle lorsqu'il n'y a pas de chocs et qui devient de plus en plus grande au fur et à mesure que le choc est important, ce qui permet de l'étaler. De nombreuses formes de pseudo-viscosité ont été discutées dans la littérature, on pourra en trouver des exemples dans [HJJ09]. Dans le code d'étude du CEA, la pseudo-viscosité utilisée est une combinaison d'un terme quadratique ($\sim |\text{div}u|^2$) qui capture bien les chocs importants mais introduit des oscillations parasites et d'un terme linéaire ($\sim |\text{div}u|$) qui décroît moins vite mais à tendance à "diffuser le choc". La contrainte imposée par le CEA était d'insérer le modèle HEM dans le code existant et ainsi d'utiliser la pseudo-viscosité déjà intégrée au code. On donne à titre d'exemple la formule suivante : $q = \rho [c_1 |\Delta u| + c_2 |\Delta u|^2]$ avec c_1 et c_2 de l'ordre de 1 et dépendant des grandeurs thermodynamiques T , c_s (célérité du son) et Δu le saut de vitesse [Ben92, HJJ09].

Dans le système précédent (2.25)-(2.29), il apparaît naturellement la dérivée "massique" : $\nabla_M := \frac{1}{\rho} \nabla$ (où ∇ est l'opérateur usuel défini simplement sur la variable d'espace, dont on notera les dérivées partielles massiques $D_{i_M} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i}$). La discrétisation spatiale n'est pas effectuée en termes du pas d'espace Δx et Δy du maillage cartésien mais en termes de "pas de masse" Δm_i d'une maille m_i : $\Delta m_i = \Delta x \rho_i^n$ (resp. $\Delta m_i = \Delta y \rho_i^n$ pour la seconde direction) où ρ_i^n est la valeur discrétisée de la masse volumique ρ sur la maille x_i au pas de temps n . Le schéma utilise des pas de temps intermédiaires, mais que l'on soit au pas de temps intermédiaire $n + 1/4$, $n + 1/2$ ou en train d'obtenir le pas de temps $n + 1$, la valeur utilisée du terme $\frac{1}{\rho}$ en facteur devant tous les opérateurs spatiaux est celle au pas de temps n . C'est en ce sens que l'on dit que $\frac{1}{\rho} \nabla$ est l'opérateur de discrétisation de masse (la phase lagrangienne conserve la masse dans une cellule).

Enfin, le dernier principe de ce schéma est d'utiliser une double discrétisation en temps : chaque équation du système (2.17)-(2.21) est discrétisée deux fois pendant un pas de temps : entre un pas de temps n et un pas de temps $n + 1$, les grandeurs sont connues à des pas de temps intermédiaires $n + 1/4$ (uniquement pour la vitesse) et $n + 1/2$ (pour toutes les grandeurs). A noter que la pseudo-viscosité n'étant pas une grandeur physique mais juste numérique, celle-ci est calculée une seule fois à chaque pas de temps dans le code d'étude et n'est pas actualisée aux pas de temps intermédiaires.

A la fin d'un cycle lagrangien entre un pas de temps n et $n + 1$, toutes les grandeurs sont connues au pas de temps $n + 1$ sur le maillage déformé qui a suivi le mouvement et afin de passer à l'itération suivante, il reste encore à obtenir les données de la cellule de discrétisation à partir de la valeur moyenne de chaque cellule mobile intersectant la cellule initiale. L'algorithme de projection utilisé est un algorithme 1D couplé à un splitting directionnel. La projection de type MUSCL est choisie pour être d'ordre 2 : sur le maillage déformé, on connaît la valeur moyenne de chaque quantité, et on reconstruit une fonction continue de la variable x (si on se place par exemple dans la première direction) grâce à la formule :

$$w_i(x) = \underbrace{\overline{w}_i}_{\text{valeur moyenne de la quantité } w} + \underbrace{\Delta w_i}_{\text{=pente dans la maille } i \text{ de cette quantité}} (x - x_i),$$

(les pentes utilisées sont en réalité limitées). On définit ainsi une fonction $w(x)$ par morceaux maille lagrangienne après maille lagrangienne sur toute la longueur du domaine et la valeur dans la maille eulérienne x_i fixe est obtenue comme étant la valeur moyenne sur cette maille de la fonction w . Afin d'assurer que les mailles déformées ne se croisent pas, cette étape de projection impose une restriction sur le pas de temps de type CFL : $\max_i(u_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 0.5$: aucune maille ne peut se déformer de plus de la moitié de sa longueur.

Dans toute la suite de ce chapitre, on va s'intéresser à l'ordre du schéma BBC original (que l'on notera BBC classique) ainsi qu'à celui modifié pour les équations HEM (que l'on notera BBC-HEM). Ce schéma est connu pour être d'ordre 2 en espace et en temps [WC84] grâce à l'utilisation conjointe de la double discrétisation spatio-temporelle et du maillage décalé, cependant les preuves précises de ce résultat n'ont pas été publiées à ce jour. On commence donc par l'étude de l'ordre de ce schéma dans la section suivante (section 2.2). Cette preuve sera la brique de base pour démontrer que l'on perd l'ordre 2 sur notre schéma BBC modifié (BBC-HEM) (section 2.3). Cette étude ne concernera que la partie lagrangienne du schéma puisque la phase de projection est choisie d'ordre 2.

2.1.2 Stratégie du schéma BBC-HEM

On décrit maintenant comment nous avons adapté le schéma BBC des équations d'Euler classiques (2.5)-(2.8) à nos équations HEM (1.119)-(1.123). Le schéma BBC classique existait déjà dans le code d'étude et l'objectif était d'implémenter dans le code d'étude le schéma BBC-HEM à partir du schéma BBC classique.

On utilise la double discrétisation temporelle pour l'équation supplémentaire sur la concentration relative c_r ainsi que le maillage décalé : la vitesse moyenne u reste la seule grandeur définie aux cloisons et les nouvelles variables propres au système HEM, i.e. les grandeurs relatives, vont être définies au centre des mailles (à savoir la concentration relative c_r , la vitesse relative u_r , l'énergie relative e_r). La vitesse relative u_r en tant que vitesse aurait pu aussi être définie sur les cloisons comme la vitesse moyenne. Le choix de la définir au centre des mailles a été dicté par la forme des équations HEM : les termes sous les divergences font apparaître les grandeurs relatives multipliées par une grandeur déjà définie au centre dans le schéma BBC classique : la masse volumique de mélange ρ . Définir la vitesse relative au centre des mailles permet de connaître tous les termes se trouvant sous une dérivée (par exemple $\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r$ pour l'équation sur la concentration relative c_r) au même endroit, et ainsi de limiter le recours aux interpolations.

2.1.3 Description d'une itération d'un cycle de calcul BBC classique et BBC-HEM

2.1.3.1 Initialisation des grandeurs de mélange dans le domaine de calcul

Avant de rentrer dans les routines propres au schéma BBC dans le code d'étude, il est nécessaire d'initialiser dans le domaine de calcul un certain nombre de grandeurs.

On doit tout d'abord se donner les constantes suivantes : la viscosité dynamique du gaz η , le rayon moyen des gouttelettes : r_{moy} (ces grandeurs interviennent dans la formule de vitesse relative pour l'obtention du coefficient de traînée (1.123)). Ensuite, on introduit les grandeurs de mélange ρ , c_r , u et e que l'on a choisies comme conditions initiales dans chacune des mailles. Du fait de la dépendance des grandeurs θ_ρ (1.60) et du coefficient de traînée C_d (qui dépend du nombre de Reynolds : $Re = \frac{2r_{moy}\rho^-|u_r|}{\eta}$) par rapport aux variables suivantes propre à chaque fluide : ρ^+ , ρ^- , e^+ et e^- ; il est nécessaire de résoudre une première fois l'équation implicite liée aux équations d'état (2.10) ou (2.11) qui permet en plus de la pression, de récupérer ces grandeurs. A partir de la pression p du mélange, ainsi que des grandeurs citées précédemment, on est dorénavant capable de calculer u_r à l'aide de la relation (1.123).

2.1.3.2 Cycle de calcul du schéma BBC classique et du schéma BBC-HEM

Nous allons maintenant détailler une étape du cycle de calcul BBC-HEM. On va décrire dans le même temps le schéma BBC classique tel qu'il était déjà implémenté dans le code d'étude du CEA tout en précisant les modifications apportées pour discrétiser les équations HEM par rapport au schéma BBC classique ; en effet, le schéma BBC-HEM nécessite l'ajout d'étapes supplémentaires

nécessaires pour prendre en compte les grandeurs relatives des équations HEM (2.34)-(2.38). Pour simplifier les écritures, on se restreint au cas $1D$ (mais le code est réellement programmé en $2D$).

Avec l'utilisation du maillage décalé, on a vu que le traitement des dérivées spatiales s'apparente finalement à un schéma de type saute-mouton et le calcul d'une grandeur BBC (classique ou HEM) nécessiterait un traitement spécifique pour les mailles de bord de domaine du fait de l'absence d'une maille voisine. Dans le code d'étude, la stratégie qui a été mise en place pour simplifier la gestion des bords de zone est d'entourer le domaine réel d'étude d'un tapis de quatre rangées de mailles fantômes qui permettent d'effectuer la discrétisation spatiale dans tout le domaine réel de la même façon en allant chercher le cas échéant de l'information dans les mailles fantômes (Fig. 2.3). Ces mailles fantômes sont remplies en début de cycle de calcul via l'application de conditions aux limites artificielles.

2.1.3.2.a Equations du mélange classique et du modèle HEM

On rappelle ici les deux systèmes d'équations : de mélange classique d'une part (i.e. sans vitesse relative) et HEM d'autre part, écrits en "dérivée lagrangienne" : $D_t = \partial_t + u \cdot \nabla$. On rappelle que q est un terme numérique (pseudoviscosité) qui agit aux côtés de la pression pour stabiliser le schéma dans les équations d'impulsion et d'énergie. Le système de mélange classique isobare/isotherme et isovitesse s'écrit :

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(u), \quad (2.30)$$

$$D_t c_r = 0, \quad (2.31)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \nabla(p + q), \quad (2.32)$$

$$D_t e = -\frac{(p + q)}{\rho} \operatorname{div}(u), \quad (2.33)$$

tandis que le modèle de mélange HEM s'écrit quand à lui (1.133)-(1.137) :

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(u), \quad (2.34)$$

$$\text{nouvelle équation} \{ D_t c_r = -\frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r), \quad (2.35)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \nabla(p+q) - \underbrace{\frac{1}{\rho} \nabla(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)}_{\text{nouveau terme}}, \quad (2.36)$$

$$\text{nouvelle équation} \{ u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}}, \quad (2.37)$$

$$D_t e = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r)}_{\text{nouveau terme}} - \frac{p+q}{\rho} (\operatorname{div} u + \underbrace{\operatorname{div}(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r)}_{\text{nouveau terme}}) + \underbrace{\frac{F_D}{\rho} \cdot u_r}_{\text{nouveau terme}}, \quad (2.38)$$

où F_D est la force de traînée du problème (1.127) :

$$F_D = \rho \theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{1-c_r^2}{4} |u_r| u_r. \quad (2.39)$$

Dans la formule sur la vitesse relative (2.37), il apparaît des quantités définies au chapitre 1 : on rappelle que θ_ρ (1.60) est une grandeur sans dimension :

$$\theta_\rho = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+}, \quad (2.40)$$

et que le rapport $\frac{r^*}{C^*}$ (1.4) est proportionnel au rapport entre le rayon moyen r_{moy} des gouttelettes et le coefficient de traînée C_d :

$$\frac{r^*}{C^*} = \frac{8}{3} \frac{r_{moy}}{C_d}. \quad (2.41)$$

Le coefficient de traînée des gouttelettes est un nombre sans dimension qui dépend du nombre de Reynolds (2.77) de l'écoulement (et ainsi à la fois de la vitesse relative u_r mais aussi de la densité du fluide léger ρ^-), la forme exacte utilisée dans le code d'étude pour C_d sera définie ultérieurement (2.78).

Remarque 2.1.2 *La prise en compte de la vitesse relative dans les équations (2.34)-(2.38) est une correction que l'on apporte aux équations de mélange classique (2.30)-(2.33). On a donc décidé de ne pas faire intervenir la pseudo-viscosité aux côtés de la pression dans la formule de prédiction de la vitesse relative (2.37), qui est elle même un terme de correction.*

Les deux systèmes (2.30)-(2.33) et (2.34)-(2.38) sont complétés par une relation permettant d'obtenir la pression p du mélange définie de manière implicite. On rappelle que l'on peut l'écrire de manière générique (2.9) :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e, c_r\right). \quad (2.42)$$

Le système HEM nécessite l'ajout de trois autres relations de fermeture :

$$e_r = g(\rho, e, c_r), \quad (2.43)$$

$$\rho^- = d(\rho, e, c_r), \quad (2.44)$$

$$\rho^+ = b(\rho, e, c_r). \quad (2.45)$$

En effet, la résolution du système implicite dont découle (2.42) va aussi permettre d'obtenir les densités et énergies internes de chaque fluide (ρ^\pm, e^\pm) qui sont utiles pour fermer le modèle HEM (2.34)-(2.38) : celui-ci nécessite la connaissance de l'énergie relative $e_r = e^- - e^+$ et de $\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho^-} - \frac{1}{\rho^+}$ dans l'équation d'énergie (2.38) ; de plus, la quantité θ_ρ (2.40) dépend du rapport $\frac{\rho^-}{\rho^+}$ et le coefficient de traînée C_d (2.77)-(2.78) dépend de ρ^- dans la formule permettant d'obtenir u_r (2.37).

En pratique, que ce soit pour le schéma BBC classique ou pour notre schéma BBC-HEM, la pression du système est obtenue de manière effective par la résolution du système de quatre équations suivantes, liant la quantité moyenne de densité et d'énergie interne à celle de chaque fluide, ainsi que la double relation correspondant à l'hypothèse isobare (système (2.10)) dans le cas compressible :

$$p = P^+(\rho^+, T) = P^-(\rho^-, T), \quad (2.46)$$

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \quad (2.47)$$

$$e = c^+ e^+(\rho^+, T) + c^- e^-(\rho^-, T). \quad (2.48)$$

A chaque pas de temps, grâce aux équations (2.30)-(2.33) pour BBC classique et (2.34)-(2.38) pour BBC-HEM, on connaît ρ, e . La concentration c^\pm de chacun des deux fluides s'obtient via la relation :

$$c^\pm = \frac{1 \mp c_r}{2}. \quad (2.49)$$

Les fonctions P^\pm ainsi que e^\pm sont connues explicitement (équations d'état de chacun des deux fluides) et dépendent des matériaux considérés. Dans le code d'étude, ce système est résolu via un algorithme de Newton : de la connaissance de ρ, e et c^\pm , on obtient les densités des deux fluides ρ^\pm et la température du mélange T à l'aide de la résolution de la seconde égalité de (2.46) ainsi que (2.47)-(2.48). Ensuite, on en déduit la pression grâce à la première égalité de (2.46) ainsi que l'énergie interne de chacun des deux fluides e^\pm (ou ici, on note abusivement e^\pm pour la valeur de la fonction e^\pm prise au point ρ^\pm et T : $e^\pm = e^\pm(\rho^\pm, T)$). Ainsi, la connaissance de ρ, e, c_r permet bien à partir du système de quatre équations : (2.46)-(2.48), d'obtenir la pression p , la quantité relative e_r , ainsi

que ρ^\pm . Par le théorème des fonctions implicites, il existe quatre fonctions f , b , d et g qui permettent d'obtenir les variables p , e_r et ρ^\pm à partir de ρ , e et c_r , d'où les relations (2.42)-(2.45).

Remarque 2.1.3 *Dans le cadre incompressible, on résout à la place de (2.46)-(2.48), le système (2.11), mais les mêmes relations (2.42)-(2.45) en découlent.*

On peut d'ores et déjà voir sur les équations continues, le travail supplémentaire pour discrétiser les équations HEM par rapport aux équations de mélange classique : on a à la fois une nouvelle équation sur la concentration relative c_r à discrétiser (2.35) et de nouveaux termes dans les équations d'impulsion (2.36) et d'énergie (2.38) dépendant des grandeurs relatives.

Remarque 2.1.4 *Les équations HEM possèdent une équation sur la concentration relative c_r , contrairement à la plupart des modèles de la littérature qui portent sur la concentration d'un des deux fluides (celle du fluide léger en général c^- (cf. [ACC⁺08, GDLP07],...)) : l'intérêt est de ne privilégier aucun des deux fluides et ainsi de conserver l'aspect symétrique. Par contre, on va voir dans la suite que l'inconvénient sera l'obligation de maintenir la concentration relative dans l'intervalle $[-1, 1]$.*

A ceci s'ajoute les conditions aux limites des systèmes (2.30)-(2.33) et (2.34)-(2.38) sur la frontière du domaine réel que l'on notera Γ : dans les deux cas (BBC classique ou BBC-HEM), on disposera des mêmes jeux de conditions aux limites sur la vitesse. Au niveau du code d'étude, deux types de conditions aux limites sont disponibles : les conditions aux limites de type Dirichlet (MUR) où :

$$u = 0 \text{ sur } \Gamma, \quad (2.50)$$

ou de type Neumann (FLUX) :

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma. \quad (2.51)$$

2.1.3.2.b Description du cycle de calcul

On décrit maintenant les étapes nécessaires à la double discrétisation temporelle pour les deux schémas (l'ordre dans lequel on discrétise les équations a son importance pour considérer les variables au bon pas de temps). Au début d'un cycle de calcul (à un pas de temps n quelconque), on connaît toutes les grandeurs physiques à cet instant. Les étapes indiquées en **gras** sont des étapes supplémentaires propres à notre schéma BBC pour le modèle HEM (BBC-HEM). Durant la description du cycle de calcul, on renvoie aux équations discrétisées pour chaque schéma ; ces équations sont indiquées à la fin de la description de ce paragraphe via leurs deux étapes de prédiction suivie d'une étape de correction. La figure (Fig.2.2) représente le cycle de calcul utilisant une double discrétisation temporelle du schéma BBC et les différentes étapes sont décrites ci-dessous :

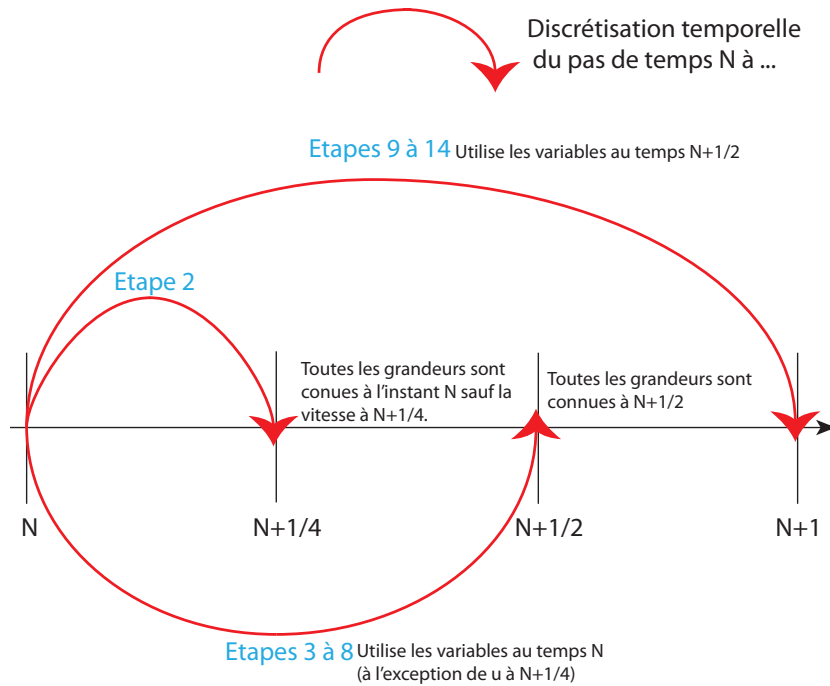


FIGURE 2.2 – Cycle de calcul du schéma BBC. On se positionne entre un pas de temps N et un pas de temps $N + 1$. Suivant l'endroit du cycle où l'on se trouve, on utilise les variables pour la discrétisation spatiale à différents instants.

- Actualisation des tableaux de variables : La première étape consiste à remplir les valeurs des variables sur les mailles fantômes (i.e. hors domaine de calcul). Pour ce qui est des variables définies au centre, à savoir, ρ , e , p (ainsi que c_r , e_r pour le schéma BBC-HEM), le code d'étude ne permet d'appliquer qu'un seul type de conditions aux limites : des conditions aux limites de type Neumann qui remplissent les mailles fantômes en faisant un effet miroir par rapport à la cloison de bord (Fig. 2.3) : la maille touchant la cloison du bord est mise à la valeur de la maille de bord intérieure au domaine et ainsi de suite sur les 4 rangées de mailles fantômes. Dans le cadre BBC-HEM, on réserve aussi un traitement particulier pour la vitesse relative u_r pour être cohérent avec sa définition dépendant du gradient de pression (2.37) : en effet, les conditions aux limites "miroir" appliquées à la pression impliquent un gradient de pression sur la cloison de bord de domaine réel nul tandis que le gradient de pression sur la première cloison intérieure au domaine fantôme est de valeur opposée à sa valeur correspondante dans le domaine réel. Comme la formule de fermeture sur la vitesse relative (2.37) dépend des quantités centrales ρ^\pm et c^- mais aussi du gradient de pression, on recalcule u_r à l'aide de sa formule (2.37) dans le domaine fantôme et on est ainsi cohérent avec les conditions aux limites appliquée sur la pression. Pour les vitesses, les cloisons de bord de domaine de calcul sont connues, le remplissage des cloisons du domaine fantôme dé-

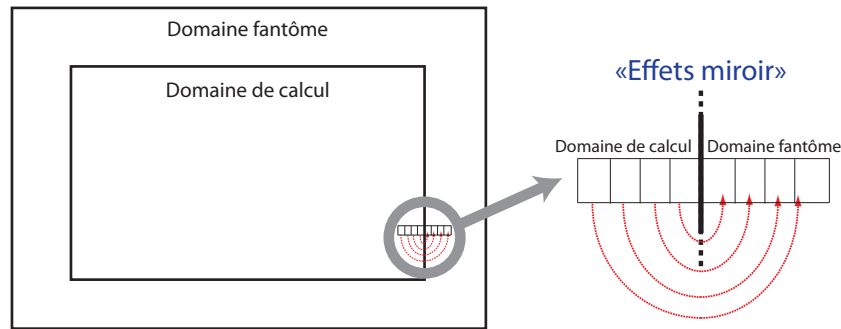


FIGURE 2.3 – Le domaine fantôme est rempli à l’aide de la valeur des variables dans le domaine réel. Une maille fantôme est remplie à partir de la valeur de sa "maille miroir" située dans le domaine réel (mailles reliées par des flèches rouges). Suivant le type de conditions aux limites (CL) utilisées, on met la maille fantôme à la valeur de la maille miroir ou à sa valeur opposée. Un traitement particulier est appliqué pour la vitesse définie aux cloisons qui est laissé au choix de l'utilisateur.

pend du choix de l'utilisateur : soit des conditions aux limites de type FLUX (de type Dirichlet) qui laissent sortir la matière du domaine, soit des conditions aux limites de type MUR (de type Neumann).

- 2 Calcul de la vitesse intermédiaire u à $n + 1/4$: Pour cette étape, on résout l’expression discrétisée (2.52) pour le schéma BBC classique alors que pour le schéma BBC-HEM, on utilise (2.62) qui inclut en plus les termes contenant des grandeurs relatives.
- 3 Calcul de l’énergie interne e à $n + 1/2$: Ici, on considère l’expression (2.54) pour le schéma BBC classique et (2.65) pour le schéma BBC-HEM.
- 1 **Calcul de la concentration relative c_r à $n + 1/2$** : Le calcul de la concentration relative doit impérativement se faire après celui de l’énergie interne car dans le calcul de l’énergie interne, on a besoin de la concentration relative c_r à l’instant n . On utilise (2.64). Afin de s’assurer que c_r reste bien dans l’intervalle $[-1, 1]$, on utilise un limiteur.
- 0 **Obtention des concentrations de chacun des deux fluides c^+ et c^- à $n + 1/2$** :

$$c^{\mp} = \frac{1 \pm c_r}{2}.$$

(Dans le cadre du schéma BBC classique, cette étape n’est pas nécessaire car la conservation de la masse des deux fluides sur le maillage mobile est assurée.)

6 Calcul de la masse volumique ρ à $n + 1/2$: Cette étape utilise l'expression discrétisée (2.53) pour le schéma BBC classique, de même pour le BBC-HEM (2.63), les équations continues étant identiques dans les deux modèles.

7 Passage dans les équations d'état pour récupérer la pression p à $n + 1/2$
 Comme précisé en fin de sous section 2.1.3.2.a, cette étape permet d'obtenir la masse volumique des deux fluides ρ^+ et ρ^- , la température du mélange T et d'en déduire la pression ainsi que l'énergie interne de chacun des deux fluides e^+ et e^- via la résolution du système (2.46)-(2.48). L'obtention des masses volumiques et énergies de chaque fluide est importante pour le schéma BBC-HEM afin d'avoir les quantités $\frac{1}{\rho_r}$ et e_r à disposition.

8 Actualisation de u_r à $n + 1/2$: Durant cette étape, on résout l'équation (2.67).

A noter que pour le schéma BBC-HEM, il est nécessaire de stocker en mémoire certaines grandeurs à la fois à l'instant n et $n + 1/2$ pour pouvoir effectuer l'étape suivante lagrangienne, ce qui n'était pas nécessaire avec le schéma BBC classique. En effet toutes les grandeurs discrétisées en temps (à savoir la masse volumique ρ , l'énergie interne e et la vitesse u) n'apparaissent pas dans les termes spatiaux des équations d'Euler (2.17)-(2.20). Du coup les valeurs à $n + 1/2$ de ces trois grandeurs n'étaient pas conservées dans le code BBC classique pour l'étape lagrangienne suivante d'obtention des équations de $n + 1/2$ à $n + 1$ mais seulement leurs valeurs à l'instant n . Dorénavant, il est nécessaire de stocker c_r (nouvelle grandeur discrétisée en temps) et ρ à $n + 1/2$ en plus de leurs valeurs à l'instant n pour la discrétisation spatiale BBC-HEM de $n + 1/2$ à $n + 1$.

9 Calcul de l'énergie e à $n + 1$: Toutes les grandeurs nécessaires à la discrétisation spatiale seront considérées au pas de temps $n + 1/2$ alors que pour la dérivée temporelle, on utilise la valeur de l'énergie au pas de temps n . Durant cette étape, on résout soit (2.59) pour le schéma BBC classique, soit (2.72) pour le schéma BBC-HEM.

10 Calcul de c_r à $n + 1$: Étape uniquement pour le schéma BBC-HEM (2.71). Après cette étape, on utilise un limiteur pour forcer c_r à rester dans l'intervalle $[-1, 1]$.

11 Obtention des concentrations de chacun des deux fluides à $n + 1$:
 On la déduit immédiatement de la connaissance de la concentration relative c_r : $c^\mp = \frac{1 \pm c_r}{2}$.

12 Calcul de la masse volumique ρ à $n + 1$ Résolution de la même expression pour le schéma BBC classique (2.58) que pour le schéma BBC-HEM (2.70).

13 Deuxième passage dans les équations d'état : On connaît maintenant la pression à $n + 1$ ainsi que ρ^+ , ρ^- , T et e^\pm à $n + 1$.

14 Actualisation de u_r à $n + 1$: en utilisant l'équation (2.75).

Après cette dernière étape, toutes les grandeurs sont connues à l'instant $n + 1$ mais sur la grille lagrangienne, i.e. la grille eulérienne du début de pas

de temps déformée par l'avancée des noeuds du maillage à la vitesse u . Une étape de projection est alors nécessaire. Le schéma BBC classique nécessitait déjà la projection à l'ordre 2 des grandeurs suivantes : la masse volumique ρ , la vitesse u , l'énergie interne e ainsi que les concentrations c^\pm de chacun des deux fluides. A ceci s'ajoute si l'on considère le schéma BBC-HEM, la projection de la vitesse relative u_r (variable supplémentaire projetée par rapport au schéma classique). A partir des quantités c^\pm , ρ et e projetées sur la grille eulérienne fixe de début de pas de temps, la pression p , l'énergie interne de chaque fluide e^\pm , ainsi que la densité de chaque fluide ρ^\pm sont obtenus via la résolution du système (2.46)-(2.48).

Finalement avec le schéma BBC-HEM, on obtient directement c_r , $\frac{1}{\rho_r}$ et e_r sur la grille eulérienne via la connaissance des quantités projetées c^\pm , e^\pm et ρ^\pm . Cette étape permet d'obtenir toutes les grandeurs physiques sur la grille eulérienne fixe et ainsi de pouvoir recommencer un nouveau cycle HEM.

Dans les sections suivantes 2.2 et 2.3, les étapes précises (en $1d$) de discrétisation dans un pas de temps de la partie lagrangienne sont explicitées, on les indique également ici. On précise quand même que les quantités définies au centre des mailles sont indicées par des indices entiers et la vitesse moyenne u est indicée par des indices demi-entiers en tant que grandeur définie aux cloisons. De plus $\Delta m_i = \rho_i^n \Delta x$ est la variable de discrétisation de masse qui discrétise l'opérateur $\frac{1}{\rho} \partial_x$ des équations continues.

2.1.3.2.c Cycle de calcul schéma BBC classique

Pour le schéma BBC classique, on a :

A Étape de prédiction de la vitesse u à $n + 1/4$:

$$u_{i-1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^n = -\frac{\Delta t}{2} \frac{(p_i^n + q_i^n) - (p_{i-1}^n + q_{i-1}^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (2.52)$$

A partir de cette vitesse intermédiaire, suit une phase d'obtention des variables de l'instant n à $n + 1/2$ en utilisant la vitesse intermédiaire à $n + 1/4$:

B Prédiction des autres quantités physiques au temps $n + 1/2$ à partir de la vitesse connue à $n + 1/4$:

Durant cette phase lagrangienne, la concentration relative c_r est préservée (2.486).

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{i+1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^{n+1/4}}{\Delta m_i}, \quad (2.53)$$

$$e_i^{n+1/2} = e_i^n - (p_i^n + q_i^n) \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right), \quad (2.54)$$

$$f \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^n \right) = \left\{ \begin{array}{l} p_i^{n+1/2} \\ e_i^{n+1/2} \\ c_i^{\pm, n} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} c_i^{\pm, n} = \frac{1 \mp c_{r_i}^n}{2}, \\ P^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1/2}}, T_i^{n+1/2} \right) = P^- \left(\frac{1}{\rho_i^{-, n+1/2}}, T_i^{n+1/2} \right), \\ \frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} = \frac{c_i^{-, n}}{\rho_i^{-, n+1/2}} + \frac{c_i^{+, n}}{\rho_i^{+, n+1/2}}, \\ e_i^{n+1/2} = c_i^{+, n} e^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1/2}}, T_i^{n+1/2} \right) + c_i^{-, n} e^- \left(\frac{1}{\rho_i^{-, n+1/2}}, T_i^{n+1/2} \right), \\ p_i^{n+1/2} = P^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1/2}}, T_i^{n+1/2} \right), \end{array} \right. \quad (2.55)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1/2} = u_{i-1/2}^n - \Delta t \frac{(p_i^{n+1/2} + q_i^n) - (p_{i-1}^{n+1/2} + q_{i-1}^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (2.56)$$

Enfin obtention des variables à l'instant $n + 1$ en rediscrétisant les équations de la masse et de l'énergie. La vitesse est quant à elle obtenue à partir des vitesses déjà calculées aux pas de temps intermédiaire $n + 1/4$ et $n + 1/2$.

Étape de correction au temps t^{n+1} :

Durant cette phase, la concentration relative est là encore préservée (2.486).

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^{n+1/2}, \quad (2.57)$$

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (2.58)$$

$$e_i^{n+1} = e_i^n - (p_i^{n+1/2} + q_i^n) \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right), \quad (2.59)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1} = 2u_{i-1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^n, \quad (2.60)$$

$$f \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^n \right) = \left\{ \begin{array}{l} p_i^{n+1} \\ e_i^{n+1} \\ c_i^{\pm, n} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} P^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1}}, T_i^{n+1} \right) = P^- \left(\frac{1}{\rho_i^{-, n+1}}, T_i^{n+1} \right), \\ \frac{1}{\rho_i^{n+1}} = \frac{c_i^{-, n}}{\rho_i^{-, n+1}} + \frac{c_i^{+, n}}{\rho_i^{+, n+1}}, \\ e_i^{n+1} = c_i^{+, n} e^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1}}, T_i^{n+1} \right) + c_i^{-, n} e^- \left(\frac{1}{\rho_i^{-, n+1}}, T_i^{n+1} \right), \\ p_i^{n+1} = P^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1}}, T_i^{n+1} \right). \end{array} \right. \quad (2.61)$$

Dans le cycle de calcul précédent, cela correspond aux étapes 1, 2, 3, 6, 7, 9, 12 et 13.

Remarque 2.1.5 Dans le schéma BBC classique, les concentrations sont conservées pendant la phase lagrangienne : on prend donc les concentrations des deux fluides c^\pm à l'instant n pendant tout le cycle de calcul.

2.1.3.2.d Cycle de calcul schéma BBC-HEM

La stratégie saute-mouton du maillage décalé ne peut pas être utilisée immédiatement avec les équations du modèle HEM, comme indiqué dans la sous-section 2.1.2. Il a été nécessaire de faire des interpolations pour obtenir une valeur aux cloisons de quantités définies aux mailles. Pour cela on introduit les valeurs aux cloisons $\varsigma_{i+1/2}$ et $\varsigma_{i-1/2}$ pour une grandeur centrée sur la maille. On aura :

$$\varsigma_{i+1/2} := \frac{\varsigma_i + \varsigma_{i+1}}{2}, \quad \varsigma_{i-1/2} := \frac{\varsigma_i + \varsigma_{i-1}}{2}.$$

Afin d'obtenir le schéma BBC-HEM, on utilisera successivement $\varsigma = \rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r$, $\varsigma = \rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r$ et $\varsigma = \frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r$. Notre schéma BBC-HEM s'écrit finalement (pour simplifier les notations, on écrit pour la vitesse relative, que λ_i est la quantité discrétisée au bon pas de temps qui correspond à la grandeur devant $(\partial_x p)^{1/2}$ dans la formule (2.37) ; on a également noté la force de traînée F_D^n , $F_D^{n+1/2}$ à la place de sa définition (2.39) avec les quantités discrétisées utilisées au bon pas de temps) :

A Étape de prédiction de la vitesse u à $n + 1/4$:

$$u_{i-1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^n = -\frac{\Delta t}{2} \frac{(p_i^n + q_i^n) - (p_{i-1}^n + q_{i-1}^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{\Delta t}{2} \frac{(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)_i^n - (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \quad (2.62)$$

B Prédiction des autres quantités physiques au temps $n + 1/2$ à partir de la vitesse connue à $n + 1/4$:

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{i+1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^{n+1/4}}{\Delta m_i} \quad (2.63)$$

$$c_{r_i}^{n+1/2} = c_{r_i}^n - \frac{\Delta t}{4} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i} \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} e_i^{n+1/2} &= e_i^n - (p_i^n + q_i^n) \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right) - \frac{\Delta t}{4} \frac{\left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i} \\ - (p_i^n + q_i^n) \frac{\Delta t}{4} \frac{\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i} &+ \left(\frac{FD}{\rho} \cdot u_r\right)_i \end{aligned} \quad (2.65)$$

$$\begin{aligned} p_i^{n+1/2} &= \left. \begin{aligned} f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}\right), \\ g(\rho_i^{n+1/2}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}), \\ d(\rho_i^{n+1/2}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}), \\ b(\rho_i^{n+1/2}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} p_i^{\pm, n+1/2} &= \frac{1 \mp c_{r_i}^{n+1/2}}{2} \\ P^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1/2}}, T_i^{n+1/2}\right) &= P^- \left(\frac{1}{\rho_i^{-, n+1/2}}, T_i^{n+1/2}\right) \\ \frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} &= \frac{c_i^{-, n+1/2}}{\rho_i^{-, n+1/2}} + \frac{c_i^{+, n+1/2}}{\rho_i^{+, n+1/2}} \\ e_i^{n+1/2} &= c_i^{+, n+1/2} e^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1/2}}, T_i^{n+1/2}\right) + c_i^{-, n+1/2} e^- \left(\frac{1}{\rho_i^{-, n+1/2}}, T_i^{n+1/2}\right) \\ p_i^{n+1/2} &= P^+ \left(\frac{1}{\rho_i^{+, n+1/2}}, T_i^{n+1/2}\right) \end{aligned} \end{aligned}$$

$$u_{r_i}^{n+1/2} = \lambda_i^{n+1/2} \left(\frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta x} \right)^{1/2} \quad (2.66)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1/2} = u_{i-1/2}^n - \Delta t \frac{(p_i^{n+1/2} + q_i^n) - (p_{i-1}^{n+1/2} + q_{i-1}^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \Delta t \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_i^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \quad (2.67)$$

$$(2.68)$$

C Étape de correction au temps t^{n+1} :

$$x_{i-1}^{n+1} = x_{i-1}^n + \Delta t u_{i-1}^{n+1/2} \quad (2.69)$$

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1}^{n+1/2} - u_{i-1}^{n+1/2}) \quad (2.70)$$

$$c_{r_i}^{n+1} = c_{r_i}^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i} \quad (2.71)$$

$$e_i^{n+1} = e_i^n - (p_i^{n+1/2} + q_i^n) \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i} \\ - (p_i^{n+1/2} + q_i^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i} + \Delta t \left(\frac{E_D}{\rho} \cdot u_r \right)_i^{n+1/2} \quad (2.72)$$

$$u_{i-1}^{n+1} = 2u_{i-1}^{n+1/2} - u_{i-1}^n \quad (2.73)$$

$$\left. \begin{aligned} p_i^{n+1} &= \\ f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}\right), & \\ e_{r_i}^{n+1} &= \\ g(\rho_i^{n+1}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}), & \Leftrightarrow \\ \rho_i^{-,n+1} &= \\ d(\rho_i^{n+1}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}), & \\ \rho_i^{+,n+1} &= \\ b(\rho_i^{n+1}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}) & \end{aligned} \right\} \begin{aligned} c_i^{\pm, n+1} &= \frac{1 \mp c_{r_i}^{n+1}}{2} \\ P^+\left(\frac{1}{\rho_i^{+,n+1}}, T_i^{n+1}\right) &= P^-\left(\frac{1}{\rho_i^{-,n+1}}, T_i^{n+1}\right) \\ \frac{1}{\rho_i^{n+1}} &= \frac{c_i^{-,n+1}}{\rho_i^{-,n+1}} + \frac{c_i^{+,n+1}}{\rho_i^{+,n+1}} \\ e_i^{n+1} &= c_i^{+,n+1} e^+\left(\frac{1}{\rho_i^{+,n+1}}, T_i^{n+1}\right) + c_i^{-,n+1} e^-\left(\frac{1}{\rho_i^{-,n+1}}, T_i^{n+1}\right) \\ p_i^{n+1} &= P^+\left(\frac{1}{\rho_i^{+,n+1}}, T_i^{n+1}\right) \end{aligned}$$

$$(2.74)$$

$$u_{r_i}^{n+1} = \lambda_i^{n+1} \left(\frac{p_i^{n+1} - p_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right)^{1/2}. \quad (2.75)$$

Remarque 2.1.6 *A noter que pour le schéma BBC-HEM, les concentrations de chaque fluide c^\pm sont bien actualisées à chaque demi pas de temps via la valeur de la concentration relative c_r .*

Les équations du maillage déformé sont données par (2.57) ou (2.69) suivant le schéma considéré et ne sont en réalité pas identiques car les vitesses intermédiaires $n + 1/2$ sont différentes (2.56) pour BBC classique et (2.68) pour BBC-HEM).

Si l'on récapitule, par rapport au modèle de mélange isovitesse déjà discrétisé dans le code d'étude via le schéma BBC classique, la mise en place du schéma BBC-HEM a nécessité la gestion de deux nouvelles variables relatives u_r et c_r définies au centre de la maille ainsi que de rajouter la discrétisation de la concentration relative c_r au pas de temps $n + 1/2$ (2.64) et au pas de temps $n + 1$ (2.71) en respectant la stratégie saute-mouton du maillage décalé. Des termes supplémentaires ont aussi été ajoutés pour la vitesse moyenne u au temps $n + 1/2$ (2.68) et au temps $n + 1$ (2.73) ainsi que pour l'énergie interne moyenne e au pas de temps $n + 1/2$ (2.65) et au pas de temps $n + 1$ (2.72). Les termes dépendant des grandeurs relatives dans les équations HEM ne permettent plus d'utiliser directement la stratégie de discrétisation en espace utilisant le maillage décalé : pour tous ces termes, il a été nécessaire de faire des interpolations de valeurs définies aux mailles, aux cloisons et inversement pour s'y ramener. Lors de l'étape de projection, il a fallu aussi rajouter la projection de u_r (et l'obtention immédiate de c_r , $\frac{1}{\rho_r}$ et e_r à partir des grandeurs c^\pm , e^\pm déjà connues auparavant dans le schéma BBC classique). D'un point de vue espace de stockage, il a fallu stocker pour la phase de correction de $n + 1/2$ à $n + 1$ en plus des valeurs à l'instant n de ρ et c_r déjà conservées pour le schéma BBC classique, leurs valeurs intermédiaires à $n + 1/2$ (pour les équations (2.71) et (2.72)) qui n'étaient pas utiles auparavant.

Remarque 2.1.7 *On présente ci-dessous quelques détails concernant la simulation qui ne sont pas explicités dans la description du schéma (2.62)-(2.75)*

- *Lors de l'étape 8 et 14 du cycle de calcul BBC modifié pour le modèle HEM, qui correspond aux calculs de la vitesse relative, on ne résout pas directement la formule sur la vitesse relative :*

$$u_r = -\sqrt{\frac{8r_{moy}}{3C_d}} \theta_\rho \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}}. \quad (2.76)$$

La formule sur la vitesse relative (2.76) dépend en effet du coefficient de traînée C_d du fluide lourd qui dépend lui même de la vitesse relative. On a par définition du nombre de Reynolds de l'écoulement,

$$Re = \frac{2r_{moy}\rho^- |u_r|}{\eta}, \quad (2.77)$$

où η est la viscosité dynamique (constante) du fluide léger. Pour le coefficient de traînée intervenant dans la définition de la vitesse relative, on utilise la formule suivante [BDM03] :

$$C_d = \frac{1}{r}(24 + 4r^{2/3}) \quad \text{où} \quad \begin{cases} r = Re \text{ si } Rem \leq Re \leq Rec \\ r = Rec \text{ si } Re > Rec \\ r = Rem \text{ si } Re < Rem, \end{cases} \quad (2.78)$$

où $Rec = 1000$ et $Rem = 10^{-4}$ (cette formule correspond à la formule utilisée dans le code d'étude, d'autres formules de coefficient de traînée utilisées dans la littérature sont résumées dans [SEL04]).

Pour les équations (2.67) et (2.75) du schéma BBC-HEM qui permettent de calculer la vitesse relative à un instant donné, on fait deux itérations de la formule sur u_r (2.76) : on calcule une première fois la vitesse relative u_r à partir du coefficient de traînée de la maille à l'instant précédent. On obtient ainsi une vitesse relative intermédiaire : u_r^{inter} . A partir de cette valeur, on recalcule un nouveau nombre de Reynolds de l'écoulement : Re^{inter} , puis un nouveau coefficient de traînée C_d^{inter} à l'aide de (2.78) et avec cette nouvelle traînée intermédiaire, on recalcule une nouvelle fois la vitesse relative avec la formule (2.76) pour obtenir u_r au pas de temps suivant. Ces deux étapes permettent d'actualiser la traînée en cas de fluctuations importantes de la vitesse relative d'un pas de temps à l'autre.

- Toujours pour les équations (2.67) et (2.75), la formule de vitesse relative fait intervenir le gradient de pression, on utilise en fait un limiteur de type min-mod [Roe86, LeV02] pour limiter ce gradient.
- Dans le code d'étude, le choix est laissé à l'utilisateur d'utiliser ou non une formule qui va atténuer la valeur de la vitesse relative obtenue avec la formule (1.186) : on peut ainsi couper la formule de vitesse relative à l'aide de la fonction de coupure suivante qui s'enclenche si besoin est :

$$u_r := u_r \frac{1}{1 + 2|u_r| |\rho_r| \frac{|\nabla u|_\infty}{|\nabla p|}}. \quad (2.79)$$

Ce terme sert en particulier à stabiliser le schéma numérique en présence de forts gradients de vitesse moyenne.

Pour faire l'étude théorique de l'ordre des deux schémas : BBC classique et BBC-HEM (sections 2.2 et 2.3), on ne prend pas en compte la pseudo-viscosité. On remplace l'équation d'état (pour simplifier et mener à bien les calculs) par la forme simplifiée suivante :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e\right), \quad (2.80)$$

au lieu du système (2.46)-(2.48) qui revient à considérer en plus dans la fonction f la variable c_r . Cependant, dans la sous-section 2.4.3, on utilisera bien la formule dépendant de c_r (2.42) pour faire l'étude de consistance (ordre 1 du schéma BBC-HEM). De plus, (uniquement pour le schéma BBC-HEM (section 2.3)), on considère la forme simplifiée suivante pour u_r : $u_r = \lambda \partial_x p$, où λ est une constante.

2.2 Ordre du schéma BBC classique

Comme on l'a vu dans la sous-section précédente (2.1.1), la résolution d'un cycle de calcul BBC se décompose en une phase lagrangienne et une phase de projection. L'objectif de cette section est de montrer que la partie lagrangienne du schéma BBC classique est bien d'ordre 2 en espace et en temps en se restreignant au cas $1D$.

Le schéma BBC résout le système lagrangien suivant,

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_x u, \quad (2.81)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \partial_x p, \quad (2.82)$$

$$D_t e = -p D_t \frac{1}{\rho} = -\frac{p}{\rho} \partial_x u, \quad (2.83)$$

où

$$D_t = \partial_t + u \partial_x, \quad (2.84)$$

est la dérivée lagrangienne. Notons que dans le cadre de cette section consacrée à l'étude théorique de l'ordre du schéma, on ne prend pas en compte le terme q de pseudo-viscosité, ni l'équation sur c_r (2.486) ($D_t c_r = 0$ donc trivialement d'ordre 2 dans cette étape lagrangienne).

Ce système s'écrit sous forme eulérienne :

$$\partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_x u, \quad (2.85)$$

$$\partial_t u + u \partial_x u = -\frac{1}{\rho} \partial_x p, \quad (2.86)$$

$$\partial_t e + u \partial_x e + \frac{p}{\rho} \partial_x u = 0. \quad (2.87)$$

On fait dans cette section également l'hypothèse simplificatrice que la loi de pression est une fonction dépendant de la masse volumique et de l'énergie : la pression est donnée par la loi d'état suivante :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e\right). \quad (2.88)$$

On rappelle que dans le code d'étude, la pression est calculée grâce aux équations (2.10).

Le schéma BBC résout le système lagrangien (2.81)-(2.83) en utilisant une variable de discrétisation de masse de la forme :

$$\Delta m_i = \Delta x \rho_i^n,$$

où ρ_i^n est la masse volumique sur la maille x_i au pas de temps n . A noter que la variable de masse entre un pas de temps n et un pas de temps $n + 1$ reste constante : la valeur de ρ_i^n n'est pas actualisée durant la totalité du pas de temps.

Dans ce schéma, les grandeurs définies au centre des mailles sont indicées par des indices entiers tandis que les vitesses définies aux cloisons sont définies par des indices demi-entiers : une quantité définie au centre de la maille x_i est indicée par un indice i , la cloison gauche de la maille x_i est notée $i - 1/2$ tandis que la droite sera indicée $i + 1/2$ (Fig. 2.4).

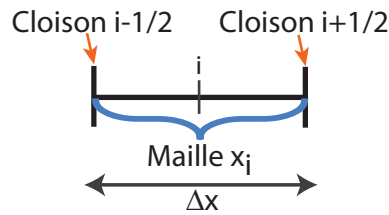


FIGURE 2.4 – Les quantités définies au centre de la maille x_i sont indicées par un indice entier tandis que les vitesses définies aux cloisons seront indicées $i - 1/2$ à gauche de la maille et $i + 1/2$ à droite.

On rappelle que le schéma BBC classique utilise deux niveaux temporels pour chaque équation, on se place entre un pas de temps n et un pas de temps $n + 1$. La vitesse sera discrétisée aux pas de temps $n + 1/4$ et $n + 1/2$ tandis que la masse volumique et l'énergie en $n + 1/2$ et $n + 1$. La première étape consiste à obtenir une première vitesse intermédiaire au pas de temps $n + 1/4$ (cf. (2.52)) :

$$u_{i-1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^n = -\frac{\Delta t}{2} \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (2.89)$$

A partir de cette vitesse intermédiaire, suit une phase d'obtention des variables de l'instant n à $n + 1/2$ en utilisant la vitesse intermédiaire à $n + 1/4$: (cf. (2.53)-(2.56)) (on rappelle qu'on a ici enlevé les termes de pseudo-viscosité,

les formules pour c_r et utilisé l'équation d'état simplifiée) :

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{i+1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^{n+1/4}}{\Delta m_i}, \quad (2.90)$$

$$e_i^{n+1/2} = e_i^n - p_i^n \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right), \quad (2.91)$$

$$p_i^{n+1/2} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}\right), \quad (2.92)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1/2} = u_{i-1/2}^n - \Delta t \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (2.93)$$

Enfin l'obtention des variables à l'instant $n + 1$ est obtenue en rediscrétisant les équations de la masse et de l'énergie. La vitesse est quant à elle obtenue à partir des vitesses déjà calculées aux pas de temps intermédiaires $n + 1/4$ et $n + 1/2$: (cf. le jeu d'équations (2.57)-(2.61) dans lequel on a aussi éliminé la pseudo-viscosité, la formule pour c_r , et utilisé l'équation d'état simplifiée) :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^{n+1/2}, \quad (2.94)$$

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (2.95)$$

$$e_i^{n+1} = e_i^n - p_i^{n+1/2} \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right), \quad (2.96)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1} = 2u_{i-1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^n, \quad (2.97)$$

$$p_i^{n+1} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}\right). \quad (2.98)$$

A noter que les quantités obtenues au temps $n + 1$ sont situées sur le maillage déformé qui suit le mouvement et la cloison $i - 1/2$ a bougé selon l'expression (2.94).

Dans la figure ci-dessous, on peut observer la dépendance par rapport aux mailles voisines lorsqu'on calcule des quantités au pas de temps $n + 1$ à partir des quantités connues au pas de temps n . (Fig.2.5)

On peut réécrire ce schéma en une seule étape :

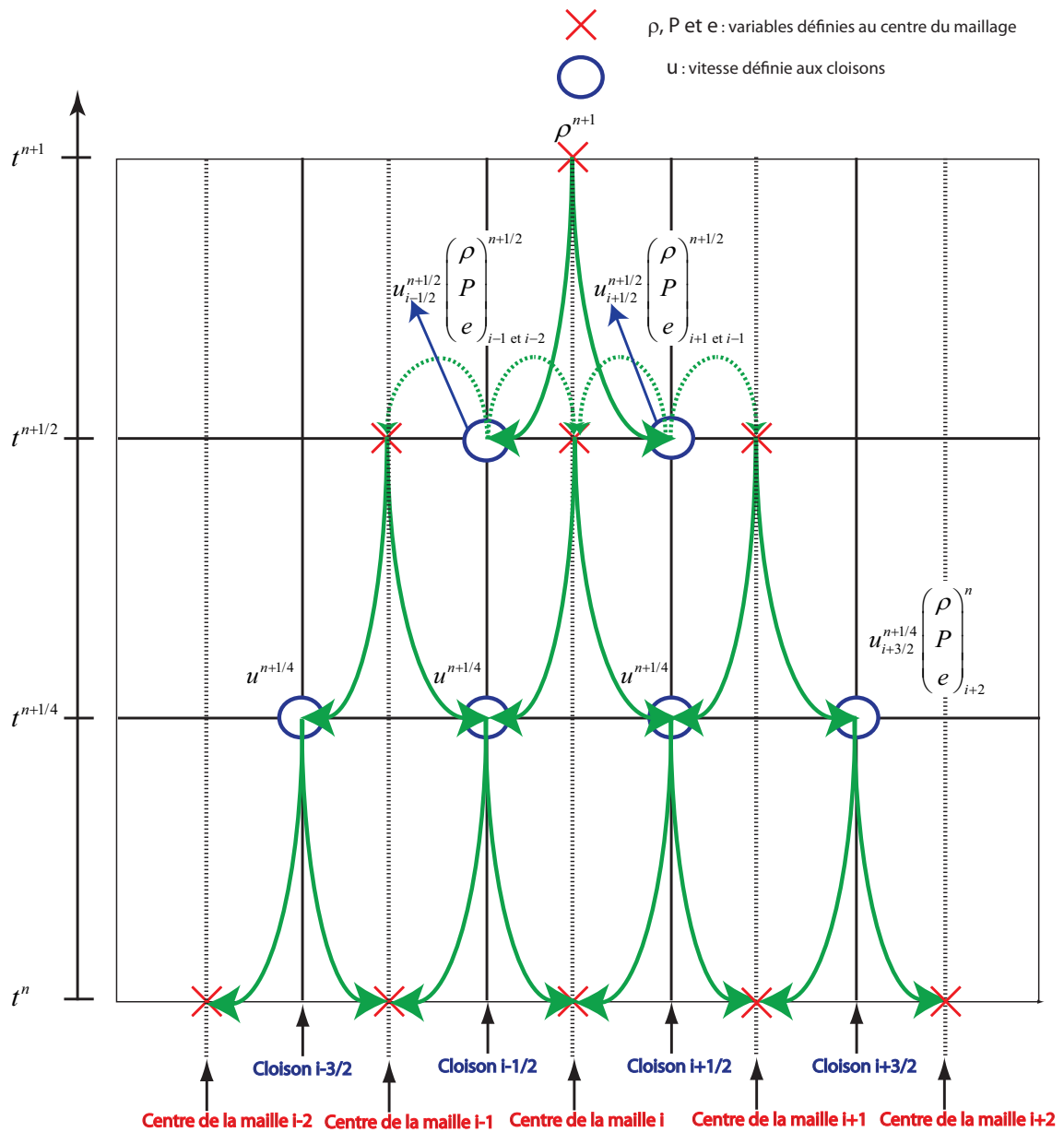


FIGURE 2.5 – Dépendance spatiale et temporelle pour obtenir une variable au temps $n + 1$ au centre de la maille i (exemple de la masse volumique ρ). Il est nécessaire de connaître les grandeurs aux cloisons ou au centre des deux mailles situées à gauche et des deux situées à droite de la maille centrale i au pas de temps précédent n . La vitesse définie aux cloisons $u_{i-1/2}^{n+1}$ ne fait pas intervenir plus de grandeurs au pas de temps n que la quantité centrale au pas de temps n du fait de sa définition (2.97), il suffit de connaître la vitesse $u_{i-1/2}^{n+1/2}$ comme pour ρ_i^{n+1} .

d'abord pour la vitesse, le schéma s'écrit :

$$\bullet w_{i-1/2}^{n+1} = w_{i-1/2}^n - \Delta t \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\frac{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}{2}} \quad (2.99)$$

$$= w_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{\frac{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}{2}} (f(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}) - f(\frac{1}{\rho_{i-1}^{n+1/2}}, e_{i-1}^{n+1/2})) \quad (2.100)$$

$$= w_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{\frac{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}{2}} \left\{ f\left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i}, \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\} \right), \right.$$

$$e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right) \quad (2.101)$$

$$- \left. f\left(\frac{1}{\rho_{i-1}^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left\{ u_{i-1/2}^n - u_{i-3/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i-1}^n - p_{i-2}^n}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} - \frac{p_{i-2}^n - p_{i-3}^n}{\Delta m_{i-2} + \Delta m_{i-3}} \right) \right\} \right), \right.$$

$$e_{i-1}^n - p_{i-1}^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} (u_{i-1/2}^n - u_{i-3/2}^n) + p_{i-1}^n \left(\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left(\frac{p_{i-1}^n - p_{i-2}^n}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} - \frac{p_{i-2}^n - p_{i-3}^n}{\Delta m_{i-2} + \Delta m_{i-3}} \right) \right) \quad (2.102)$$

et pour la masse volumique :

$$\bullet \frac{1}{\rho_i^{n+1}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}) \quad (2.103)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + \frac{(\Delta t)^2}{\Delta m_i} \left(-\frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} + \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\ &= \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \\ &\quad - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \left\{ f \left(\frac{1}{\rho_{i+1}^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left\{ u_{i+3/2}^n - u_{i+1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+2}^n - p_{i+1}^n}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \right\} \right), \right. \\ &\quad e_{i+1}^n - p_{i+1}^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} (u_{i+3/2}^n - u_{i+1/2}^n) + p_{i+1}^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left(\frac{p_{i+2}^n - p_{i+1}^n}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \Bigg) \\ &\quad - f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\}, \right. \\ &\quad \left. e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right) \Bigg) \\ &\quad + \frac{(\Delta t)^2}{\Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \left\{ f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\}, \right. \right. \\ &\quad \left. \left. e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. - f \left(\frac{1}{\rho_{i-1}^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left\{ u_{i-1/2}^n - u_{i-3/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i-1}^n - p_{i-2}^n}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} - \frac{p_{i-2}^n - p_{i-3}^n}{\Delta m_{i-2} + \Delta m_{i-3}} \right) \right\}, \right. \right. \\ &\quad \left. \left. e_{i-1}^n - p_{i-1}^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} (u_{i-1/2}^n - u_{i-3/2}^n) + p_{i-1}^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left(\frac{p_{i-1}^n - p_{i-2}^n}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} - \frac{p_{i-2}^n - p_{i-3}^n}{\Delta m_{i-2} + \Delta m_{i-3}} \right) \right) \right) \Bigg) \Bigg) \quad (2.104) \end{aligned}$$

car

$$\begin{aligned}
p_i^{n+1/2} &= f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\}, \right. \\
&\quad \left. e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right). \tag{2.105}
\end{aligned}$$

Enfin, pour l'énergie interne :

$$e_i^{n+1} = e_i^n - p_i^n \frac{1}{\rho_i^n} \left(\frac{1}{\rho_i^n} - \frac{1}{\rho_i^{n+1}} \right) - \frac{1}{\rho_i^n} e_i^{n+1/2} = e_i^n - f \left(\frac{1}{\rho_i^n} - \frac{1}{\rho_i^{n+1}} \right) e_i^{n+1/2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}) \right) \quad (2.106)$$

$$= e_i^n - \left\{ f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right\} - \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right), \right. \\ \left. e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\} \\ * \left\{ \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \left(u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\} \\ = e_i^n - \left\{ f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right\} - \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right), \right. \\ \left. e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\} \\ * \left\{ \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \left(u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\}, \\ e_{i+1}^n - p_{i+1}^n \frac{\Delta t}{2 \Delta m_{i+1}} (u_{i+3/2}^n - u_{i+1/2}^n) + p_{i+1}^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left\{ u_{i+3/2}^n - u_{i+1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+2}^n - p_{i+1}^n}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \right\}, \\ - f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right\} - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right), \\ e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\ + \frac{(\Delta t)^2}{\Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \left\{ f \left(\frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \left\{ u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n \right\} - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right), \right. \\ \left. e_i^n - p_i^n \frac{\Delta t}{2 \Delta m_i} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) + p_i^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\} \\ - f \left(\frac{1}{\rho_{i-1}^n} + \frac{\Delta t}{2 \Delta m_{i-1}} \left\{ u_{i-1/2}^n - u_{i-3/2}^n \right\} - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i-1}^n - p_{i-2}^n}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} - \frac{p_{i-2}^n - p_{i-3}^n}{\Delta m_{i-2} + \Delta m_{i-3}} \right) \right), \\ e_{i-1}^n - p_{i-1}^n \frac{\Delta t}{2 \Delta m_{i-1}} (u_{i-1/2}^n - u_{i-3/2}^n) + p_{i-1}^n \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left(\frac{p_{i-1}^n - p_{i-2}^n}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} - \frac{p_{i-2}^n - p_{i-3}^n}{\Delta m_{i-2} + \Delta m_{i-3}} \right) \right\}, \quad (2.107)$$

avec l'équation d'évolution du maillage suivante :

$$\bullet x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^{n+1/2}. \quad (2.108)$$

L'objectif de cette partie est de se donner des fonctions (ρ, e, u, p) de classe C^3 solutions du système (2.85)-(2.87) et de montrer lorsque l'on introduit ces fonctions dans le schéma (2.89)-(2.98) (exprimé en une seule étape et en divisant toutes les équations du schéma (2.89)-(2.98) par Δt hormis celles sur la pression), on obtient un terme en $O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x)$ via des développements limités. On aura ainsi prouvé que la partie lagrangienne du schéma BBC est d'ordre 2. On va procéder équation par équation.

Lors de cette étude, on commence par isoler la partie de discrétisation temporelle (partie gauche de l'équation) de celle de discrétisation spatiale (partie droite).

Partie A La partie liée à la discrétisation temporelle est séparée en deux phases distinctes :

Phase A_1 : elle consiste à faire un développement limité qui correspond au déplacement du centre x_i^{n+1} ou de la cloison $x_{i-1/2}^{n+1}$ du maillage déformé par le mouvement (son déplacement est dicté par la formule (2.94)).

Phase A_2 Il s'agit d'une phase de recombinaison des dérivées secondes de la variable dont on étudie l'équation. Si on se donne une fonction générique ϖ , où ϖ prendra les valeurs u , $\frac{1}{\rho}$ ou e selon l'équation considérée ; la phase précédente A_1 aura fait apparaître la quantité $\frac{1}{2} \partial_{tt}^2 \varpi + \frac{u^2}{2} \partial_{xx}^2 \varpi + u \partial_{xt}^2 \varpi$ et durant cette étape, on va chercher à exprimer la valeur de cette quantité en dérivant selon x et/ou t et en combinant les équations (2.85)-(2.87).

Partie B La seconde partie consiste à obtenir un développement limité pour la discrétisation spatiale du schéma, puis à regrouper les dérivées secondes partielles de la fonction f (2.88) qui définit la pression afin de faire apparaître les dérivées secondes de la pression comme dans le membre de gauche.

Une fois ces deux étapes terminées, il ne reste plus qu'à soustraire le développement limité obtenu dans la partie A à celui obtenu dans la partie B pour vérifier qu'il ne reste bien qu'un reste d'ordre 2 en temps et en espace.

Pour mener à bien les calculs, on a besoin de supposer que l'on a une dépendance entre le pas de temps et le pas d'espace : $\Delta t = O(\Delta x)$ (simplification de termes de la forme $\frac{(\Delta t)^3}{\Delta x}$ dans les restes d'ordre 2). Cette condition apparaît de manière naturelle comme condition CFL pour la stabilité du schéma ($\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \text{cste}$).

Dans cette section, on a choisi d'insérer uniquement la démonstration de l'ordre 2 du schéma BBC pour l'équation en vitesse, grandeur ancrée aux cloisons du maillage. Le calcul complet de l'ordre pour les deux autres équations

du schéma (définies au centre de la maille) se trouvent dans l'Annexe A. Dans la sous-section 2.4.1 suivante consacrée à l'étude de l'ordre du schéma BBC modifié pour les équations HEM (BBC-HEM), on étudiera l'ordre de l'équation de conservation de la masse du schéma modifié pour le modèle HEM, grandeur ancrée au centre des mailles. Cette démonstration utilisera les résultats sur l'ordre du schéma BBC classique de conservation de la masse (A.1) de l'Annexe A .

Ordre de l'équation en vitesse

On commence par traiter le cas de l'équation en vitesse. On rappelle que la vitesse est une grandeur ancrée aux cloisons.

Le schéma pour l'équation en vitesse se réécrit :

$$\frac{u_{i-1/2}^{n+1} - u_{i-1/2}^n}{\Delta t} = -2 \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \quad (2.109)$$

où l'on remplace les " $p^{n+1/2}$ " par (2.105).

On commence par considérer le membre de gauche de ce schéma. On va chercher à obtenir un développement limité (d.l.) de la fonction définie par cette partie du schéma prise aux points x_i du maillage fixe.

Comme le schéma est lagrangien, les cloisons du maillage évoluent entre deux pas de temps et on obtient d'après (2.108) que la cloison $i - 1/2$ a bougé au pas de temps $n + 1$ selon :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^n - (\Delta t)^2 \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (2.110)$$

On note :

$$\begin{aligned}
H &:= f \left\{ \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{2\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\}, \\
e(x_i, t^n) - p(x_i, t^n) &\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) + p(x_i, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \Bigg\} \\
-f &\left\{ \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left(u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n) \right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{2\Delta m_{i-1}} \left(\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} \right) \right\}, \\
&e(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-1}, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left(u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n) \right) \\
&+ p(x_{i-1}, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i-1}} \left(\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\Delta m_{i-1} + \Delta m_{i-2}} \right) \Bigg\}, \tag{2.111}
\end{aligned}$$

la fonction qui correspond à la quantité $p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}$ (où la pression au pas de temps $n + 1/2$ est donné par (2.105)) définie au temps t^n et prise aux points du maillage eulérien fixe du début de pas de temps.

L'équation pour la position des cloisons prise aux points du maillage fixe (2.110) s'écrit :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}. \quad (2.112)$$

On obtient ainsi en utilisant (2.112) et la formule de Taylor que la différence de termes du membre de gauche de (2.109) s'écrit :

$$\begin{aligned} u(x_{i-1/2}^{n+1}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}^n, t^n) &= u(x_{i-1/2}^n + k, t^n + h) - u(x_{i-1/2}^n, t^n) \\ &= k \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}^n, t^n) + h \frac{\partial u}{\partial t}(x_{i-1/2}^n, t^n) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{i-1/2}^n, t^n) \\ &\quad + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_{i-1/2}^n, t^n) + hk \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}(x_{i-1/2}^n, t^n) + O(|h|^3) + O(|k|^3), \end{aligned} \quad (2.113)$$

où

$$k = \Delta t u(x_{i-1/2}^n, t^n) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}, \quad (2.114)$$

et

$$h = \Delta t. \quad (2.115)$$

Désormais, on va s'affranchir de l'exposant n relatif au temps (toutes les grandeurs sont définies au pas de temps n). Dans toute la suite, par exemple,

$$x_{i-1/2} := x_{i-1/2}^n$$

Partie A Phase A_1

Proposition 2.2.1 *Le développement limité à l'ordre 2 du membre de gauche de l'équation de la vitesse est :*

$$\begin{aligned} \frac{u(x_{i-1/2}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} &= \partial_t u + u \partial_x u - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x p) (\partial_x u) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 p + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (2.116)$$

Ce résultat est obtenu en trois étapes : on effectue d'abord un développement limité à l'ordre 2 de (2.113), s'en suit une phase de regroupement des termes à l'aide de dérivations en temps et en espace de l'équation vérifiée par la vitesse (2.86), enfin on traite l'apparition des dérivées secondes de la pression via leurs expressions en fonction des dérivées partielles de la fonction f .

Pour la première étape, on veut obtenir un développement à l'ordre 2 en temps et en espace du membre de gauche donc en particulier, pour que $\frac{k}{h}$ soit à

l'ordre 2, on va chercher à obtenir un développement limité (d.l.) à l'ordre 2 de H (2.111) au point $(x_{i-1/2}, t^n)$.

En introduisant dans H :

$$-f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) + f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right), \quad (2.117)$$

on obtient que

$$H = f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}) + K_1, e(x_{i-1/2}, t^n) + K_2\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) + \left(f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}) + K_3, e(x_{i-1/2}, t^n) + K_4\right)\right), \quad (2.118)$$

où

$$K_1 := \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} - \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right)}_{:=2}, \quad (2.119)$$

$$K_2 := e(x_i, t^n) - e(x_{i-1/2}, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right), \quad (2.120)$$

$$K_3 := \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} - \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \left(\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} - \frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_{i-2}, t^n)} \right)}_{:=2bis}, \quad (2.121)$$

et

$$K_4 := e(x_{i-1}, t^n) - e(x_{i-1/2}, t^n) - p(x_{i-1}, t^n) \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} + p(x_{i-1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \left(\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} - \frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_{i-2}, t^n)} \right). \quad (2.122)$$

D'après la formule de Taylor, (2.118) devient :

$$\begin{aligned} H = & (K_1 - K_3) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\ & + (K_2 - K_4) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\ & + O(K_1^2) + O(K_2^2) + O(K_3^2) + O(K_4^2). \end{aligned} \quad (2.123)$$

– On va d'abord obtenir un d.l. à l'ordre 2 de K_1 en $(x_{i-1/2}, t^n)$:

1.

$$\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) = \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^2), \quad (2.124)$$

2.

$$\begin{aligned} 2 = & -\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \underbrace{\left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right)}_{=a(x_i) - a(x_{i-1}) = \Delta x \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}) + O((\Delta x)^2)} \\ & = -\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta t)^2), \end{aligned} \quad (2.125)$$

où

$$a : x \mapsto \frac{p(x + \Delta x, t^n) - p(x, t^n)}{\rho(x + \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n)}. \quad (2.126)$$

Ce terme 2 est en fait un reste d'ordre 2 en temps car $\frac{\partial a}{\partial x} = O(\Delta x)$.
En effet, en dérivant la fonction a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial x}(x) &= \frac{(\frac{\partial p}{\partial x}(x + \Delta x, t^n) - \frac{\partial p}{\partial x}(x, t^n))(\rho(x + \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n))}{(\rho(x + \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n))^2} \\ &\quad - \frac{(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x + \Delta x, t^n) - \frac{\partial \rho}{\partial x}(x, t^n))(p(x + \Delta x, t^n) + p(x, t^n))}{(\rho(x + \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n))^2} \\ &= \Delta x \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x, t^n) + O(\Delta x)}{(\rho(x + \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n))} \\ &\quad + \Delta x \frac{(\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}(x, t^n) + O(\Delta x))(p(x + \Delta x, t^n) + p(x, t^n))}{(\rho(x + \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n))^2} \\ &= O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.127)$$

3.

$$\frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} = \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.128)$$

Donc finalement, on a obtenu le d.l. à l'ordre 2 de K_1

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \\ &\quad + O((\Delta t)(\Delta x)) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (2.129)$$

– On obtient de la même manière pour K_2

$$\begin{aligned}
K_2 &= \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \underbrace{p(x_i, t^n)}_{=p(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta x)} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + O((\Delta t)^2) \\
&\quad + O((\Delta t)(\Delta x)) + O((\Delta x)^2) \\
&= \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t}{2} p(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \\
&\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta t)(\Delta x)) + O((\Delta x)^2). \tag{2.130}
\end{aligned}$$

– Pour K_3 :

$$\begin{aligned}
K_3 &= -\frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} + O((\Delta t)^2) \\
&\quad + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \tag{2.131}
\end{aligned}$$

– Et enfin pour K_4 :

$$\begin{aligned}
K_4 &= -\frac{\Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t}{2} p(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} + O((\Delta t)^2) \\
&\quad + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \tag{2.132}
\end{aligned}$$

On a bien

$$O(K_1^2) = O(K_2^2) = O(K_3^2) = O(K_4^2) = O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \tag{2.133}$$

Ainsi, en remplaçant dans (2.123), K_1 , K_2 , K_3 et K_4 par les d.l. précédents (2.129) à (2.132), on obtient :

$$\begin{aligned}
H &= \Delta x \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad + \Delta t \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n)\right) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad - \Delta t p(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n)\right) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \tag{2.134}
\end{aligned}$$

Or

$$\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) = \Delta x \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \tag{2.135}$$

En s'arrêtant à l'ordre 2, on obtient que

$$\begin{aligned}
H &= \Delta x \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x), \tag{2.136}
\end{aligned}$$

que l'on note sous forme condensée (i.e. en s'affranchissant des variables d'espace et de temps $(x_{i-1/2}, t^n)$) :

$$H = \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \partial_1 f + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \quad (2.137)$$

On a ainsi que k (2.114) à l'ordre 3 vaut :

$$k = \Delta t u(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{(\Delta t)^2}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f + O\left(\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x}\right) + O(\Delta x) \right). \quad (2.138)$$

(On va se servir ici de la condition CFL, à savoir $\Delta t = O(\Delta x)$ si bien que $O\left(\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x}\right) = O(\Delta t)$.)

En remplaçant (2.138) dans (2.113) (et en divisant par Δt), on obtient le développement limité à l'ordre 2 suivant :

$$\begin{aligned} & \frac{u(x_{i-1/2}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} = \\ & \frac{\partial u}{\partial x} (u(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} (\frac{\partial^1}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f)) \\ & + \frac{\partial u}{\partial t} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} (x_{i-1/2}, t^n) + \Delta t u(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \\ & + \frac{\Delta t}{2} (u(x_{i-1/2}, t^n))^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O\left(\frac{(\Delta t)^3}{\Delta x}\right). \end{aligned} \quad (2.139)$$

Or

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial^1}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f, \quad (2.140)$$

et

$$\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n) = 2\rho(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta x). \quad (2.141)$$

Donc :

$$\begin{aligned} & \frac{u(x_{i-1/2}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} = \partial_t u + u \partial_x u - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x p \partial_x u + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 u \\ & + \Delta t u \partial_{tx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 u + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + \underbrace{O\left(\frac{(\Delta t)^3}{\Delta x}\right)}_{=O((\Delta t)^2) \text{ grace à la condition CFL}} \end{aligned} \quad (2.142)$$

(Dans cette formule, on a sous-entendu que toutes les quantités étaient prises au point $(x_{i-1/2}, t^n)$).

Phase A_2

On passe maintenant à la seconde étape, qui consiste à exprimer les termes qui font apparaître la dérivée seconde de la vitesse u dans le développement limité du membre de gauche précédent (2.142), $\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 u + \Delta t u \partial_{tx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 u$, à l'aide de l'équation pour u (2.86).

Comme u est solution du système (2.86),

$$\partial_t u + u \partial_x u = -\frac{1}{\rho} \partial_x p. \quad (2.143)$$

Si on dérive par rapport au temps, on obtient :

$$\partial_{tt}^2 u + \partial_t u \partial_x u + u \partial_{tx}^2 u = \frac{1}{\rho^2} \partial_t \rho \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_{tx}^2 p. \quad (2.144)$$

Si on dérive maintenant par rapport à x :

$$\partial_{tx}^2 u + (\partial_x u)^2 + u \partial_{xx}^2 u = \frac{1}{\rho^2} \partial_x \rho \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 p. \quad (2.145)$$

En se servant de (2.144), on obtient que :

$$\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 u + \Delta t u \partial_{tx}^2 u = -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} u \partial_{xt}^2 u + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} (\partial_t \rho) (\partial_x p) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 p. \quad (2.146)$$

En utilisant (2.145), on a :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 u + \Delta t u \partial_{tx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 u &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} u (\partial_x u)^2 \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho^2} (\partial_x \rho) (\partial_x p) - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 p + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} (\partial_t \rho) (\partial_x p) \\ &- \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 p. \end{aligned} \quad (2.147)$$

– Or comme

$$\partial_x \rho = -\rho^2 \partial_x \frac{1}{\rho}, \quad (2.148)$$

$$\text{et } \partial_t \rho = -\rho^2 \partial_t \frac{1}{\rho}, \quad (2.149)$$

et comme ρ est solution du système (2.86) :

$$\partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_x u, \quad (2.150)$$

on obtient :

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho^2} (\partial_x \rho) (\partial_x p) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} (\partial_t \rho) (\partial_x p) = -\frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x p) (\partial_x u). \quad (2.151)$$

– Grâce à (2.143), on a :

$$-\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} u (\partial_x u)^2 = \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x p) (\partial_x u), \quad (2.152)$$

donc finalement, (2.147) devient :

$$\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 u + \Delta t u \partial_{tx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 u = -\frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 p, \quad (2.153)$$

ce qui donne en remplaçant dans (2.142) le développement limité de la Proposition 2.2.1 (2.116) :

$$\frac{u(x_{i-1/2}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} = \partial_t u + u \partial_x u - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x p) (\partial_x u) \quad (2.154)$$

$$- \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 p + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \quad (2.155)$$

On a de nouveau sous-entendu que toutes les fonctions étaient prises au point $(x_{i-1/2}, t^n)$.

Partie B

On s'attaque maintenant à la partie droite de notre équation : celle-ci s'écrit d'après (2.109) sous la forme :

$$\frac{-2H}{\Delta x (\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))}. \quad (2.156)$$

On veut obtenir un d.l. de H à l'ordre 3 cette fois-ci car H va être divisé par Δx . On va donc pousser le d.l. qu'on avait obtenu pour H (2.123) un ordre plus loin.

Proposition 2.2.2 *Le d.l. à l'ordre 2 de la partie droite de l'équation vérifiée par la vitesse (2.156) est donné par (toutes les fonctions sont prises au point $(x_{i-1/2}, t^n)$) :*

$$\begin{aligned} -\frac{2H}{\Delta x (\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\Delta t}{2\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2}{\partial x} \partial_2 f - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho)^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \partial_1 f \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\rho^2} p \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \partial_2 f - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} \partial_{11}^2 f + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} \partial_{22}^2 f \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} \partial_{12}^2 f - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} \partial_{12}^2 f + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.157)$$

On obtient ce résultat en calculant le développement limité de la quantité H à l'ordre 3 cette fois-ci. On a toujours en utilisant la formule de Taylor :

$$\begin{aligned} H = & (K_1 - K_3) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\ & + (K_2 - K_4) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\ & + \frac{K_1^2 - K_3^2}{2} \partial_{11}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\ & + \frac{K_2^2 - K_4^2}{2} \partial_{22}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) \\ & + (K_1 K_2 - K_3 K_4) \partial_{12}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n), e(x_{i-1/2}, t^n)\right) + O(K_1^3) \\ & + O(K_2^3) + O(K_3^3) + O(K_4^3). \end{aligned} \quad (2.158)$$

On reprend donc tous les d.l. précédents de K_1 (2.119), K_2 (2.120), K_3 (2.121), K_4 (2.122) en montant en ordre. On commence par les termes relatifs à K_1 et K_2 .

1.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) &= \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \end{aligned} \quad (2.159)$$

2.

$$\begin{aligned} 2 &= -\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}}_{=a(x_i) - a(x_{i-1}) = \Delta x \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}) + O((\Delta x)^3)} \right) \\ &= -\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta t)^2 \Delta x), \end{aligned} \quad (2.160)$$

où on rappelle que a est la fonction suivante

$$a : x \mapsto \frac{p(x + \Delta x, t^n) - p(x, t^n)}{\rho(x + \Delta x, t^n) - \rho(x, t^n)}. \quad (2.161)$$

3.

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} &= \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \\ &+ O(\Delta t (\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.162)$$

On en déduit le d.l. de K_1 à l'ordre 3 :

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n) \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \\ &+ \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \\ &+ \underbrace{O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta x)^2 \Delta t)}_{=O((\Delta x)^3) \text{ grâce à la condition CFL}}. \end{aligned} \quad (2.163)$$

De la même manière, on obtient pour K_2 à l'ordre 3 :

$$\begin{aligned} K_2 &= \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n) \\ &- p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \\ &- p(x_i, t^n) \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{p}{\rho}(x_i, t^n) \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \\ &+ \underbrace{O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta x)^2 \Delta t)}_{=O((\Delta x)^3) \text{ par la condition CFL}}. \end{aligned} \quad (2.164)$$

Le développement de Taylor de H fait apparaître des termes d'ordre supérieur, on doit dorénavant calculer K_1^2 , K_2^2 et K_1K_2 à l'ordre 3.

On obtient (en se souvenant que $\frac{\partial a}{\partial x} = O(\Delta x)$ d'après le calcul précédent (2.127)) :

$$\begin{aligned} K_1^2 &= \frac{(\Delta x)^2}{4} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)^2}{(\rho(x_i, t^n))^2} \\ &\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + O((\Delta x)^3), \end{aligned} \quad (2.165)$$

$$\begin{aligned} K_2^2 &= \frac{(\Delta x)^2}{4} \left(\frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)^2 + (p(x_i, t^n))^2 \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)^2}{(\rho(x_i, t^n))^2} \\ &\quad - \frac{\Delta t \Delta x}{2} p(x_i, t^n) \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + O((\Delta x)^3), \end{aligned} \quad (2.166)$$

$$\begin{aligned} K_1K_2 &= \frac{(\Delta x)^2}{4} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right) \left(\frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t \Delta x}{4} p(x_i, t^n) \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right) \left(\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)}{\rho(x_i, t^n)} \\ &\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{1}{\rho} (x_i, t^n) \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \\ &\quad - p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)^2}{(\rho(x_i, t^n))^2} + O((\Delta x)^3). \end{aligned} \quad (2.167)$$

On passe aux termes faisant intervenir K_3 et K_4 :

1.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} (x_{i-1}, t^n) - \frac{1}{\rho} (x_{i-1/2}, t^n) &= -\frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n) \\ &\quad + O((\Delta x)^3), \end{aligned} \quad (2.168)$$

2.

$$\begin{aligned} 2bis &= -\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \underbrace{\left(\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} - \frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_{i-2}, t^n)} \right)}_{=a(x_{i-1})-a(x_{i-2})=\Delta x \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i-3/2}) + O((\Delta x)^3)} \\ &= -\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho} (x_{i-1}, t^n) \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i-3/2}, t^n) + O((\Delta t)^2 \Delta x), \end{aligned} \quad (2.169)$$

3.

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} &= \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} - \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \\ &\quad + O(\Delta t (\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.170)$$

Ainsi, le d.l. à l'ordre 3 de K_3 est le suivant :

$$\begin{aligned}
K_3 &= -\frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4 \Delta x} \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i-3/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \tag{2.171}
\end{aligned}$$

De la même manière, on obtient celui de K_4 :

$$\begin{aligned}
K_4 &= -\frac{\Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} p(x_{i-1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t \Delta x}{4} p(x_{i-1}, t^n) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad + \frac{(\Delta t)^2}{4 \Delta x} p(x_{i-1}, t^n) \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i-3/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \tag{2.172}
\end{aligned}$$

(Comme pour K_1 et K_2 , on remplace le $O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta x)^2 \Delta t) + O((\Delta x)^3)$ par $O((\Delta x)^3)$ grâce à la condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$.)

Pour les carrés et le terme croisé (K_3^2 , K_4^2 et $K_3 K_4$), on obtient :

$$\begin{aligned}
K_3^2 &= \frac{(\Delta x)^2}{4} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)\right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n))^2}{(\rho(x_{i-1}, t^n))^2} \\
&\quad - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3), \tag{2.173}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_4^2 &= \frac{(\Delta x)^2}{4} \left(\frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)\right)^2 + (p(x_{i-1}, t^n))^2 \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n))^2}{(\rho(x_{i-1}, t^n))^2} \\
&\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{2} p(x_{i-1}, t^n) \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3), \tag{2.174}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_3 K_4 &= \frac{(\Delta x)^2}{4} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)\right) \left(\frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)\right) \\
&\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{4} p(x_{i-1}, t^n) \frac{(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n)) (\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n))}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \\
&\quad - \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{1}{\rho} (x_{i-1}, t^n) \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad - p(x_{i-1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n))^2}{(\rho(x_{i-1}, t^n))^2} + O((\Delta x)^3). \tag{2.175}
\end{aligned}$$

Afin d'obtenir le d.l. de H à l'ordre 2 (2.158), il nous reste à calculer les quantités différentielles suivantes : $K_1 - K_3$, $K_2 - K_4$, $K_1^2 - K_3^2$, $K_2^2 - K_4^2$ ainsi que les différences de termes croisés $K_1 K_2 - K_3 K_4$, toujours à l'ordre 3.

En utilisant (2.163) et (2.171), on a (les termes en $((\Delta x)^2$ se simplifient) :

$$\begin{aligned}
K_1 - K_3 &= \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \underbrace{\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) \right)}_{= \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^2)} \\
&\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (x_{i-1/2}, t^n) \underbrace{\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) \right)}_{= 2 \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta x)} \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4 \Delta x} \left(\underbrace{\frac{\frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} - \frac{\frac{\partial a}{\partial x}(x_{i-3/2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)}}_{= b(x_i) - b(x_{i-1}) = \Delta x \frac{\partial b}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^2) = O((\Delta x)^2) \text{ car } \frac{\partial b}{\partial x} = O(\Delta x)} \right) + O((\Delta x)^3),
\end{aligned} \tag{2.176}$$

où l'on a posé :

$$b(x) = \frac{\frac{\partial a}{\partial x}(x - \frac{\Delta x}{2})}{\rho(x)}. \tag{2.177}$$

Remarque 2.2.3 La fonction $\frac{\partial b}{\partial x}$ est un reste d'ordre 1 en espace. En effet, en dérivant b , on obtient

$$\frac{\partial b}{\partial x} = \frac{\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}}{\rho(x)} - \frac{\frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x}}{(\rho(x))^2}. \tag{2.178}$$

En utilisant la forme de a (2.126), on avait obtenu que $\frac{\partial a}{\partial x} = O((\Delta x))$ (2.127). De la même manière, en redérivant $\frac{\partial a}{\partial x}$, on a $\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} = O(\Delta x)$ et ainsi $\frac{\partial b}{\partial x} = O((\Delta x))$.

Finalement $K_1 - K_3$ s'exprime simplement à l'ordre 3,

$$\begin{aligned}
K_1 - K_3 &= \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad + \frac{1}{2} \Delta t \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{1}{\rho} (x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3).
\end{aligned} \tag{2.179}$$

De la même manière, on obtient pour $K_2 - K_4$ d'après (2.164) et (2.172) :

$$\begin{aligned}
K_2 - K_4 &= \Delta x \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^{\frac{2}{2}}}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \\
&\quad - \frac{1}{2} \Delta t \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{p}{\rho} (x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3).
\end{aligned} \tag{2.180}$$

On a d'après (2.165) et (2.173) :

$$\begin{aligned}
K_1^2 - K_3^2 &= \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \right)^2 \underbrace{\left(\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) \right)^2 - \left(\frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) \right)^2 \right)}_{= O(\Delta x)} \\
&\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \underbrace{\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) \right)}_{= 2 \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^2)} + O((\Delta x)^3).
\end{aligned} \tag{2.181}$$

Donc finalement, à l'ordre 3, on obtient :

$$K_1^2 - K_3^2 = \Delta t \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \quad (2.182)$$

De la même manière, il vient

$$K_2^2 - K_4^2 = -\Delta t \Delta x \left(\frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{p}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \quad (2.183)$$

On s'occupe enfin du double produit (2.167) et (2.175) :

$$\begin{aligned} K_1 K_2 - K_3 K_4 &= -\frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \underbrace{\left(\frac{p}{\rho}(x_i, t^n) + \frac{p}{\rho}(x_{i-1}, t^n) \right)}_{=2\frac{p}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta x)} \\ &\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{4} \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \underbrace{\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + \frac{1}{\rho}(x_{i-1}, t^n) \right)}_{=2\frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta x)} \\ &\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \right)^2 \underbrace{\left(\frac{p}{(\rho)^2}(x_i, t^n) - \frac{p}{(\rho)^2}(x_{i-1}, t^n) \right)}_{=O(\Delta x)}, \end{aligned} \quad (2.184)$$

si bien qu'à à l'ordre 3, on a :

$$\begin{aligned} K_1 K_2 - K_3 K_4 &= -\frac{\Delta t \Delta x}{2} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{p}{\rho} \right)(x_{i-1/2}, t^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{1}{\rho} \right)(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^3). \end{aligned} \quad (2.185)$$

On a $O((K_1)^3) = O((K_2)^3) = O((K_3)^3) = O((K_4)^3) = O((\Delta x)^3)$ et on réinjecte tous ces d.l. dans (2.158) afin d'obtenir le d.l. à l'ordre 3 de H :

$$\begin{aligned} H &= (\Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n)) \partial_1 f \\ &\quad + (\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{1}{2} \Delta t \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{p}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n)) \partial_2 f \\ &\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i-1/2}, t^n) \frac{1}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) \partial_{11}^2 f \\ &\quad \quad - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{p}{\rho}(x_{i-1/2}, t^n) \partial_{22}^2 f \\ &\quad + \left(-\frac{\Delta t \Delta x}{2} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{p}{\rho} \right)(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{1}{\rho} \right)(x_{i-1/2}, t^n) \right) \partial_{12}^2 f + O((\Delta x)^3). \end{aligned} \quad (2.186)$$

Comme $H = O(\Delta x)$, la partie droite (2.156) de notre équation devient à l'ordre 2 :

$$-\frac{2H}{\Delta x (\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} = -\frac{H}{\Delta x \rho(x_{i-1/2}, t^n)} + O((\Delta x)^2). \quad (2.187)$$

De plus en se servant de la forme de la loi de pression,

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e\right) \implies \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial^1 \rho}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}, e\right), \quad (2.188)$$

et en injectant (2.186) dans (2.187), on obtient la proposition 2.2.2 (2.157) (où toutes les fonctions sont considérées au point $(x_{i-1/2}, t^n)$) :

$$\begin{aligned} -\frac{2H}{\Delta x(\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \underbrace{\frac{\Delta t}{2\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1 \rho}{\partial x}}_{=1} \partial_1 f + \underbrace{\frac{\Delta t}{2\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x}}_{=7} \partial_2 f - \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho)^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{=8} \partial_1 f \\ &+ \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\rho^2} p \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{=6} \partial_2 f - \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1 \rho}{\partial x}}_{=2} \partial_{11}^2 f + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}}_{=3} \partial_{22}^2 f \\ &+ \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^1 \rho}{\partial x}}_{=4} \partial_{12}^2 f - \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}}_{=5} \partial_{12}^2 f + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.189)$$

On dispose maintenant du développement limité du membre de gauche et de droite de l'équation vérifiée par la vitesse. L'idée consiste à repartir de notre membre de gauche (2.116) : on va exprimer $u \partial_{xx}^2 p + \partial_{xt}^2 p$ en fonction des dérivées partielles de f pour pouvoir faire des simplifications avec les termes dépendant des dérivées secondes de f du membre de droite. On va se servir des trois équations continues (2.85)-(2.87).

On dérive (2.88) par rapport à la variable x puis la variable t .

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x^2} \partial_1 f + \left(\frac{\partial^1 \rho}{\partial x}\right)^2 \partial_{11}^2 f + 2\left(\frac{\partial^1 \rho}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}\right) \partial_{12}^2 f + \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} \partial_2 f + \left(\frac{\partial e}{\partial x}\right)^2 \partial_{22}^2 f, \quad (2.190)$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x \partial t} = \frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x \partial t} \partial_1 f + \frac{\partial^1 \rho}{\partial x} \frac{\partial^1 \rho}{\partial t} \partial_{11}^2 f + \left(\frac{\partial^1 \rho}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial^1 \rho}{\partial t} \frac{\partial e}{\partial x}\right) \partial_{12}^2 f + \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} \partial_2 f + \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial t} \partial_{22}^2 f. \quad (2.191)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
u\partial_{xx}^2 p + \partial_{xt}^2 p &= \left(u \frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x \partial t} \right) \partial_1 f \\
&\quad + \left(u \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} \right) \partial_2 f \\
&\quad + \underbrace{\left(u \left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t} \right)}_{= \frac{1}{\rho} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \text{ grâce à (2.85)}} \partial_{11}^2 f \\
&\quad + \left(\underbrace{u \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial t}}_{= -\frac{p}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) \text{ grâce à (2.87)}} + \underbrace{u \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t} \frac{\partial e}{\partial x}}_{= \frac{1}{\rho} (\partial_x e) (\partial_x u) \text{ grâce à (2.85)}} \right) \partial_{12}^2 f \\
&\quad + \underbrace{\left(u \left(\frac{\partial e}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial t} \right)}_{= -\frac{p}{\rho} (\partial_x u) (\partial_x e) \text{ grâce à (2.87)}} \partial_{22}^2 f. \tag{2.192}
\end{aligned}$$

En dérivant (2.85) et (2.87) par rapport à x , on va pouvoir remplacer les quantités devant les dérivées d'ordre 1 de f de (2.192) :

$$\frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x \partial t} + u \frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{2.193}$$

$$\frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} + (\partial_x u) (\partial_x e) + u \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} + \frac{1}{\rho} (\partial_x p) (\partial_x u) - \frac{p}{\rho^2} (\partial_x \rho) (\partial_x u) + \frac{p}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \tag{2.194}$$

Donc finalement, en se servant de ces deux dernières égalités dans (2.192), on a pour le membre de gauche (2.116) (en remplaçant $\partial_x p$ par son expression (2.88)

dans le terme $\frac{\Delta t}{2\rho}(\partial_x p)(\partial_x u)$:

$$\begin{aligned}
\frac{u(x_{i-1/2}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} &= \partial_t u + u \partial_x u - \frac{\Delta t}{2\rho}(\partial_x p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 p \\
&\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) \\
&= \partial_t u + u \partial_x u - \underbrace{\frac{\Delta t}{2\rho}(\partial_x u) \partial_x \left(\frac{1}{\rho}\right) \partial_1 f}_{=1} + \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2}(\partial_x p)(\partial_x u) \partial_2 f - \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho^3}(\partial_x \rho)(\partial_x u) \partial_2 f}_{=7} \\
&\quad + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \partial_2 f}_{=6} - \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \partial_1 f}_{=8} \\
&\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \partial_{11}^2 f}_{=2} \\
&\quad + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho^2)} \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \partial_{12}^2 f}_{=4} \\
&\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \partial_{12}^2 f}_{=5} \\
&\quad + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} \partial_{22}^2 f}_{=3} + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \tag{2.195}
\end{aligned}$$

De plus, comme :

$$\frac{\partial^2}{\partial x} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x}, \tag{2.196}$$

les termes 7 des membres de gauche (2.195) et de droite (2.189) sont égaux. Les termes numérotés 1 à 6 et 8 des deux membres de l'équation en vitesse sont égaux.

Ainsi en faisant la différence de (2.195) et de (2.189) et comme u est solution de (2.86) :

$$\begin{aligned}
\frac{u(x_{i-1/2}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} + \frac{2H}{\Delta x(\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} &= \underbrace{\partial_t u + u \partial_x u + \frac{1}{\rho} \partial_x p}_{=0 \text{ par (2.86)}} \\
&\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) \\
&= O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \tag{2.197}
\end{aligned}$$

L'équation en vitesse était définie aux cloisons des mailles du maillage, les deux autres équations qu'il reste à étudier sont quant à elles définies au centre des mailles.

On vérifie dans l'Annexe A que les équations associées à la concentration et l'énergie interne conduisent à une discrétisation d'ordre 2 lorsque l'on utilise le schéma BBC classique. On obtient au final le théorème suivant :

Théorème 2.2.4 *Le schéma BBC classique associé aux équations (2.85)-(2.88) est d'ordre 2 en espace et en temps sous la condition CFL $\Delta t = O(\Delta x)$ (en ce qui concerne sa partie lagrangienne).*

On rappelle que la partie projection de ce même schéma est choisie pour être d'ordre 2 également. Par contre le splitting directionnel (cas 2D) n'est pas d'ordre 2 dans la version actuelle du code.

2.3 Schéma BBC modifié pour les équations HEM

Les équations correspondant au modèle HEM (2.34)-(2.45) amènent de nouveaux termes dépendant des grandeurs relatives par rapport aux équations de mélange classique, ainsi qu'une nouvelle équation sur la concentration relative c_r de mélange. Pour faire l'étude d'ordre du schéma BBC-HEM, on fait les simplifications suivantes :

- On suppose que la vitesse relative (2.37) suit la relation simplifiée suivante : $u_r = \lambda \partial_x p$ où λ est une constante.
- La loi de pression et les lois permettant d'obtenir les quantités propres à chaque fluide e_r et ρ^\pm (2.42)-(2.45) ne dépendent pas de la concentration relative c_r .
- On ne met pas de pseudo-viscosité : $q = 0$.

Sous ces hypothèses, les équations du modèle HEM (2.34)-(2.45) s'écrivent en 1D :

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_x u, \quad (2.198)$$

$$D_t c_r = -\frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r \right), \quad (2.199)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{4} u_r^2 \right) \quad (2.200)$$

$$u_r = \lambda \partial_x p, \quad \text{où } \lambda \text{ est une constante,} \quad (2.201)$$

$$D_t e = -\frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right) - \frac{p}{\rho} (\partial_x u + \partial_x \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right)) + \frac{F_D}{\rho} \cdot u_r, \quad (2.202)$$

avec la pression p qui suit la loi d'état suivante :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e\right), \quad (2.203)$$

ainsi que la loi permettant d'obtenir e_r et ρ^\pm :

$$e_r = g(\rho, e), \quad (2.204)$$

$$\rho^- = d(\rho, e), \quad (2.205)$$

$$\rho^+ = b(\rho, e). \quad (2.206)$$

On rappelle que D_t la dérivée lagrangienne : $D_t = \partial_t + u \cdot \nabla$. On rappelle que F_D est la force de traînée du problème qui dépend de la vitesse relative u_r (1.127) :

$$F_D = \rho \theta \frac{C^*}{r^*} \frac{1 - C_r^2}{4} |u_r| u_r. \quad (2.207)$$

Remarque 2.3.1 *On va déjà constater avec cette formule simplifiée sur u_r (2.201) la perte de l'ordre 2 sur l'équation de concentration relative c_r (sous-section 2.4.2), il n'était donc pas nécessaire de faire les calculs avec la véritable formule utilisée pour u_r (2.37).*

Afin de discrétiser ces termes, on a voulu conserver la même stratégie que le schéma BBC classique, à savoir faire une double discrétisation temporelle de chacune des équations, et utiliser le maillage décalé afin de faire une discrétisation en espace maille/cloison. Pour utiliser le maillage décalé, on choisit de discrétiser les nouvelles grandeurs relatives : c_r , e_r et u_r au centre de la maille. Cependant, les nouveaux termes introduits par le modèle HEM ne sont pas forcément positionnés au bon endroit du maillage pour conserver la stratégie maille/cloison. Ceci nous conduit à faire une interpolation si nécessaire pour obtenir les grandeurs aux noeuds à la place des cloisons et ainsi essayer de conserver la propriété d'ordre 2 en temps et en espace du schéma BBC classique. Le pas de temps est donc toujours scindé en deux et voici l'algorithme de calcul des équations HEM (les indices entiers dénotent toujours le centre de la maille, tandis que les indices demi-entiers indiquent les cloisons des mailles) :

l'étape de prédiction de la vitesse s'écrit (cf. (2.62) dans laquelle on ne prend pas en compte la pseudo-viscosité) :

A Étape de prédiction de la vitesse u à $n + 1/4$:

$$u_{i-1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^n = -\frac{\Delta t}{2} \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{\Delta t}{2} \frac{(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)_i^n - (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (2.208)$$

L'étape de prédiction des autres quantités physiques s'écrit (2.63)-(2.68), dans lesquelles on ne prend pas en compte la pseudo-viscosité, et où on a simplifié l'équation d'état et la formule pour u_r :

B Prédiction des autres quantités physiques au temps $n + 1/2$ à partir de la vitesse

connue à $n + 1/4$:

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{i+1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^{n+1/4}}{\Delta m_i}, \quad (2.209)$$

$$c_{r_i}^{n+1/2} = c_{r_i}^n - \frac{\Delta t}{4} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i}, \quad (2.210)$$

$$\begin{aligned} e_i^{n+1/2} &= e_i^n - p_i^n \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right) - \frac{\Delta t}{4} \frac{\left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i} \\ &\quad - p_i^n \frac{\Delta t}{4} \frac{\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^n}{\Delta m_i} + \left(\frac{F_D}{\rho} \cdot u_r\right)_i^n, \end{aligned} \quad (2.211)$$

$$p_i^{n+1/2} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}\right), \quad (2.212)$$

$$u_{r_i}^{n+1/2} = \lambda \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta x}, \quad (2.213)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1/2} = u_{i-1/2}^n - \Delta t \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \Delta t \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2\right)_i^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2\right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \quad (2.214)$$

$$e_{r_i}^{n+1/2} = g\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}\right), \quad (2.215)$$

$$\rho_i^{-,n+1/2} = d\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}\right), \quad (2.216)$$

$$\rho_i^{+,n+1/2} = b\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}\right). \quad (2.217)$$

□ Étape de correction au temps t^{n+1} :

Il s'agit des équations (2.69)-(2.75) dans lesquelles on ne prend pas en compte la pseudo-viscosité et dans lesquelles on utilise la forme simplifiée

pour u_r et pour les équations d'état :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^{n+1/2}, \quad (2.218)$$

$$\frac{1}{\rho_i^{n+1}} = \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (2.219)$$

$$c_{r_i}^{n+1} = c_{r_i}^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r\right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i}, \quad (2.220)$$

$$e_i^{n+1} = e_i^n - p_i^{n+1/2} \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i} - p_i^{n+1/2} \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r\right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i} + \Delta t \left(\frac{F_D}{\rho} \cdot u_r \right)_i^{n+1/2} \quad (2.221)$$

$$u_{i-1/2}^{n+1} = 2u_{i-1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^n, \quad (2.222)$$

$$p_i^{n+1} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}\right), \quad (2.223)$$

$$u_{r_i}^{n+1} = \lambda \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x}, \quad (2.224)$$

$$e_{r_i}^{n+1} = g\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}\right), \quad (2.225)$$

$$\rho_i^{-,n+1} = d\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}\right), \quad (2.226)$$

$$\rho_i^{+,n+1/2} = b\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}\right). \quad (2.227)$$

On représente à nouveau la dépendance spatiale des quantités au temps $n + 1$ en fonction des quantités au temps n . Dans la figure Fig. 2.6, on voit que la dépendance spatiale est élargie d'une maille de chaque côté par rapport au schéma BBC classique. En particulier, le schéma BBC classique nécessite la connaissance en plus du domaine de travail de deux rangées de mailles fantômes tandis qu'il en faut trois pour le schéma BBC-HEM.

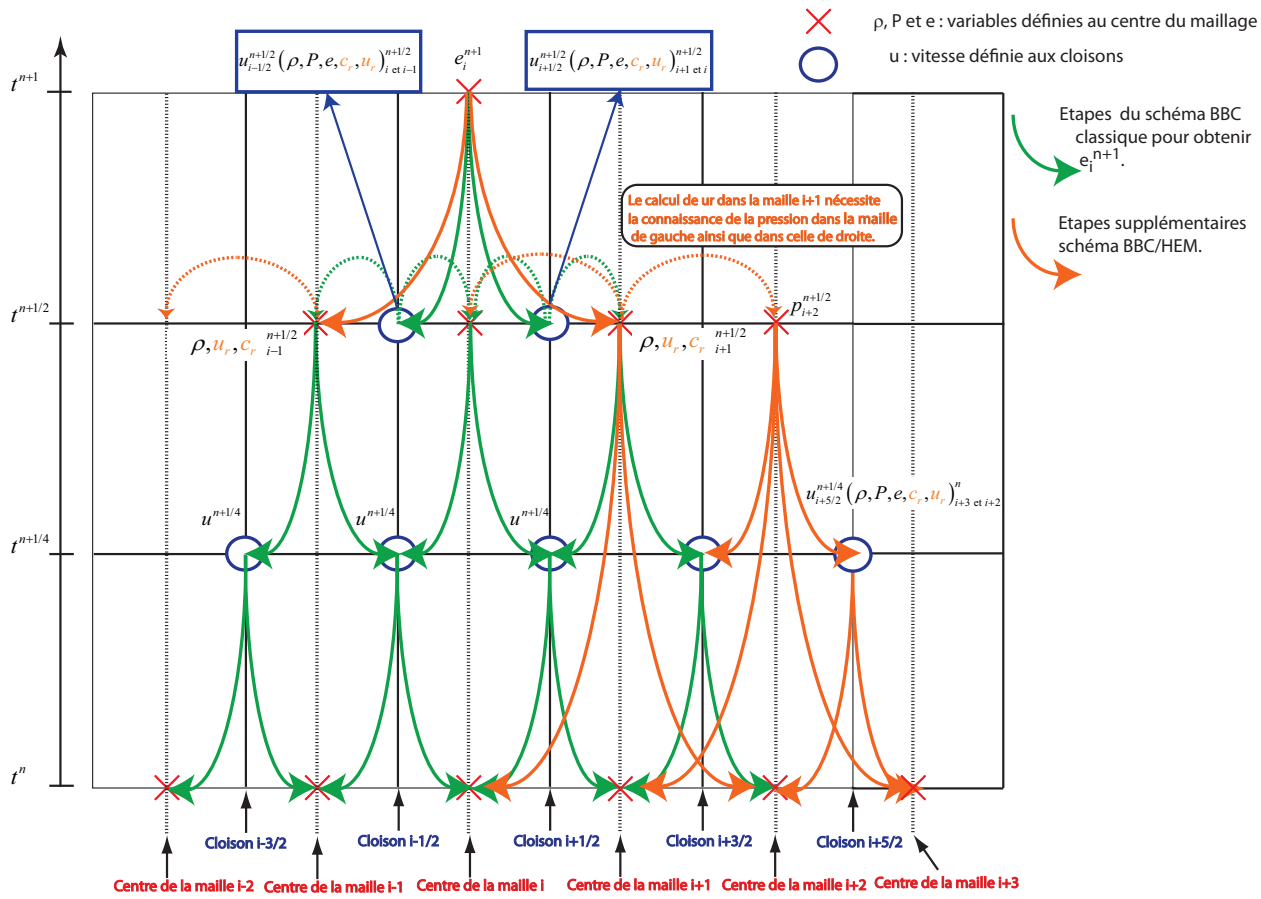


FIGURE 2.6 – Dépendance spatiale et temporelle pour obtenir une variable au temps $n + 1$ au centre de la maille i (exemple de l'énergie interne e). On ne représente pas la masse volumique ρ car pour cette équation, la dépendance spatiale est identique à celle de la même quantité pour le schéma BBC classique (cf. Fig. 2.5). Les grandeurs qui étaient déjà nécessaires pour le schéma classique sont représentées en vert tandis que les supplémentaires sont représentées en orange. Pour ne pas compliquer la figure, on a représenté les étapes supplémentaires avec des flèches orange uniquement sur la partie droite de la maille i (la recherche d'informations du côté gauche est totalement symétrique). Les étapes supplémentaires proviennent du fait que l'on doit connaître la vitesse relative u_r sur la maille $i + 1$ à l'instant $n + 1/2$ pour obtenir la vitesse au même instant sur la cloison $i + 1/2$ (2.214). On a donc besoin de connaître les grandeurs centrales sur la maille $i + 3$ (et de manière symétrique sur la maille $i - 3$) au temps n . La vitesse définie aux cloisons ($u_{i-1/2}^{n+1}$) ne fait pas intervenir plus de grandeurs que la quantité centrale au pas de temps n à cause de sa définition (2.222), il suffit de connaître la vitesse $u_{i-1/2}^{n+1/2}$, déjà nécessaire à l'obtention de e_i^{n+1} .

2.4 Etude de l'ordre du schéma BBC modifié pour les équations HEM

Le schéma BBC-HEM simplifié pour l'étude de l'ordre (2.198)-(2.207) s'écrit sous forme eulérienne :

$$\partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_x u, \quad (2.228)$$

$$\partial_t c_r + u \partial_x c_r = -\frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r \right), \quad (2.229)$$

$$\partial_t u + u \partial_x u = -\frac{1}{\rho} \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{4} u_r^2 \right), \quad (2.230)$$

$$\partial_t e + u \partial_x e = -\frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right) - \frac{p}{\rho} (\partial_x u + \partial_x \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right)) \quad (2.231)$$

$$+ \frac{F_D}{\rho} \cdot u_r, \quad (2.232)$$

$$u_r = \lambda \partial_x p,$$

avec les fermetures suivantes :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e\right), \quad (2.233)$$

$$e_r = g(\rho, e), \quad (2.234)$$

$$\rho^- = d(\rho, e), \quad (2.235)$$

$$\rho^+ = b(\rho, e), \quad (2.236)$$

ainsi que la force de traînée définie par (2.207). On suppose que les fonctions b , d , f et g , qui définissent les lois (2.233)-(2.236) du mélange sont des fonctions suffisamment dérivables de $\frac{1}{\rho}$ et de e .

Pour écrire les différentes phases du schéma BBC-HEM (2.208)-(2.227), on s'est déjà servi de ces hypothèses simplificatrices pour être plus concis.

On a conservé la même stratégie que dans le schéma original pour discrétiser l'équation supplémentaire sur la concentration relative qui apparaît dans les équations HEM ainsi que les termes de flux relatifs qui apparaissent dans nos équations. Il n'a cependant pas été possible de conserver l'ordre 2 en temps et en espace du schéma BBC classique pour toutes les équations .

Théorème 2.4.1 *Le schéma BBC modifié est d'ordre 1 et pas d'ordre 2 en temps et en espace pour le système des équations HEM (2.228)-(2.236). L'équation de conservation de la masse reste néanmoins d'ordre 2 en espace et en temps.*

Pour obtenir ce résultat, on utilise la même démarche que pour le schéma BBC classique, à savoir : on isole la partie gauche de discrétisation temporelle des équations du schéma et la partie droite de discrétisation spatiale.

Partie A Dans la partie A, on considère le membre de gauche des équations du schéma BBC modifié (écrit en une seule étape).

Phase A1 On effectue d'abord les développements limités de l'expression du schéma.

Phase A2 Il s'agit d'une étape de recombinaison des dérivées secondes de la variable dont on considère l'équation grâce aux équations continues du système (2.228)-(2.231) : comme pour le schéma classique, **la Phase A1** aura fait apparaître la quantité :

$$\frac{1}{2}\partial_{tt}^2\varpi + \frac{u^2}{2}\partial_{xx}^2\varpi + u\partial_{xt}^2\varpi, \quad (2.237)$$

où ϖ prendra les valeurs ρ, c_r selon l'équation que l'on considère.

Partie B Dans la partie B, on effectue un développement limité de la partie droite du schéma correspondant à la dérivée spatiale.

2.4.1 L'équation de conservation de la masse reste d'ordre 2

On va commencer par vérifier que l'équation de conservation de la masse est bien d'ordre 2 en espace et en temps. Bien que l'équation continue de conservation de la masse reste identique entre les équations d'Euler classiques (2.81) et le jeu d'équations HEM (2.198), l'équation d'évolution du maillage du temps n au temps $n + 1$ a changé (2.218) car elle utilise la vitesse au temps $n + 1/2$ qui ne vérifie plus la même équation que pour le schéma BBC classique du fait de la prise en compte des grandeurs relatives (2.214). Les grandeurs intermédiaires (temps $n + 1/4$ et $n + 1/2$) apparaissant dans le membre de gauche dépendent dorénavant aussi de grandeurs relatives. Ainsi les termes intervenant dans le développement limité de cette équation de conservation de la masse vont contenir le développement limité des termes déjà présents dans les équations d'Euler auxquelles vont s'ajouter des termes dépendants de la vitesse relative u_r . On va se servir des résultats obtenus dans l'Annexe (section A.1) pour les développements limités de chaque membre auxquels vont s'ajouter le développement des termes dépendants des grandeurs relatives.

En écrivant le schéma BBC-HEM en une seule étape temporelle, on obtient comme pour le schéma BBC classique une différence entre la quantité $\frac{1}{\rho}$ au pas de temps $n + 1$ (quantité ancrée au maillage mobile qui suit le mouvement) et cette même quantité au pas de temps n (quantité définies sur la grille eulérienne fixe de départ). On a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^n} \right) &= \frac{u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n}{\Delta m_i} - \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)_i^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \end{aligned} \quad (2.238)$$

avec les relations suivantes pour exprimer les termes indexés $n + 1/2$ en fonction des quantités au temps n :

1.

$$p_i^{n+1/2} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}\right),$$

avec :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_i^{n+1/2}} &= \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{i+1/2}^{n+1/4} - u_{i-1/2}^{n+1/4}}{\Delta m_i} \\ &= \frac{1}{\rho_i^n} + \frac{\Delta t}{2\Delta m_i} \left(u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n\right) - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}\right) \\ &\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{\beta_{i+1}^n - \beta_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta_i^n - \beta_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}\right), \end{aligned} \quad (2.239)$$

et

$$\begin{aligned} e_i^{n+1/2} &= e_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta m_i} p_i^n \left(u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n\right) + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} p_i^n \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}\right) \\ &\quad + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} p_i^n \left(\frac{\beta_{i+1}^n - \beta_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta_i^n - \beta_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}\right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} \left(\gamma_{i+1} - \gamma_{i-1}\right) - \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} p_i^n \left(\Omega_{i+1} - \Omega_{i-1}\right) + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{FD}{\rho} u_r\right)_i^n, \end{aligned} \quad (2.240)$$

où les fonctions β , γ et Ω sont définies par :

$$\beta := \rho \frac{1 - c_r^2}{4} u_r^2, \quad (2.241)$$

$$\gamma = \rho e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r, \quad (2.242)$$

$$\Omega = \frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r. \quad (2.243)$$

2. Les termes nécessaires pour exprimer la fonction β (2.241) au temps $n + 1/2$ intervenant dans (2.238) sont :

$$c_{r_i}^{n+1/2} = c_{r_i}^n - \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} \left(\left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r\right)_{i+1}^n - \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r\right)_{i-1}^n \right), \quad (2.244)$$

$$\begin{aligned} u_{r_i}^{n+1/2} &:= \lambda \partial_x p_i^{n+1/2} \\ &= \lambda \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta x}, \end{aligned} \quad (2.245)$$

et d'après (2.239) :

$$\rho_i^{n+1/2} = \frac{2\Delta m_i}{2\Delta x + \Delta t A_i}, \quad (2.246)$$

$$\begin{aligned} \text{où } A_i &= u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}\right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\beta_{i+1}^n - \beta_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta_i^n - \beta_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}\right). \end{aligned} \quad (2.247)$$

On rappelle que par définition du schéma, au pas de temps $n + 1$, avant l'étape de projection, le maillage a évolué en suivant la relation :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^{n+1/2}. \quad (2.248)$$

Maintenant que l'équation discrétisée de la masse est totalement explicitée, on commence par s'occuper du membre de gauche de (2.238) : le schéma BBC-HEM donne comme évolution du maillage au pas de temps $n + 1$ pour le centre d'une maille de discrétisation, à l'aide de (2.248) :

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t \left[\frac{u_{i-1/2}^n + u_{i+1/2}^n}{2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} - \frac{\Delta t}{2} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\beta_{i+1}^{n+1/2} - \beta_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\beta_i^{n+1/2} - \beta_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right], \quad (2.249)$$

on obtient ainsi en considérant l'équation du schéma, à l'ordre 2 grâce à la formule de Taylor :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n) &= k \frac{\partial^1}{\partial x}(x_i^n, t^n) + h \frac{\partial^1}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \\ &+ \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) + hk \frac{\partial^2}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) + O(|h|^3) + O(|k|^3), \end{aligned} \quad (2.250)$$

avec

$$h = \Delta t, \quad k = \Delta t \left[\frac{u(x_{i-1/2}, t^n) + u(x_{i+1/2}, t^n)}{2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{\beta_{i+1}^{n+1/2} - \beta_i^{n+1/2}}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{\beta_i^{n+1/2} - \beta_{i-1}^{n+1/2}}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right]. \quad (2.251)$$

Dans l'expression de k ci-dessus (2.251), pour ne pas surcharger d'équations, on a noté abusivement : $p_i^{n+1/2}$ à la place des relations (2.239)-(2.240). De la même manière, les termes $\beta_i^{n+1/2}$ sont à comprendre au sens de la définition de la fonction β (2.241) dans laquelle on a remplacé c_r , ρ et u_r au point $n + 1/2$ par leurs formules respectives (2.244), (2.246) et (2.245). Si on note :

$$MbresGaucheRho(x_i, t^n) := \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t}, \quad (2.252)$$

où x_i^{n+1} correspond au centre de la maille x_i qui s'est déformée :

$$x_i^{n+1} = x_i^n + k, \quad (2.253)$$

où k est la quantité (2.251) dans laquelle on a noté abusivement $p_i^{n+1/2}$ à la place des relations (2.239)-(2.240). De plus, les termes $\beta_i^{n+1/2}$ sont à comprendre au sens de la définition de la fonction β (2.241) dans laquelle on a remplacé c_r , ρ et u_r au point $n + 1/2$ par leurs formules respectives (2.244), (2.245) et (2.246).

Partie A Phase A_1

Proposition 2.4.2 *Le développement limité du membre de gauche de notre équation en $\frac{1}{\rho}$ correspondant au schéma BBC modifié pour le modèle HEM est (sous la condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$) :*

$$\begin{aligned}
\text{MbreGaucheRho}(x_i, t^n) &= u(x_i, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i^n, t^n) + \frac{\partial^1}{\partial t} (x_i^n, t^n) \\
&- \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i^n, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_i)}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i^n, t^n) \\
&- \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) \\
&+ O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x).
\end{aligned} \tag{2.254}$$

On commence par effectuer le développement limité du membre de gauche de l'équation. Si on note G la fonction qui représente la formule $p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}$

(avec (2.239) et (2.240)) :

$$\begin{aligned}
\bullet G := & f \left\{ \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right) \right. \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \left(\frac{\beta(x_{i+2}, t^n) - \beta(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right), \\
& e(x_{i+1}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right) \\
& + p(x_{i+1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \\
& + p(x_{i+1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \left(\frac{\beta(x_{i+2}, t^n) - \beta(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \\
& - \frac{\Delta t}{4\Delta m_{i+1}} [\gamma(x_{i+2}) - \gamma(x_i)] - p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{4\Delta m_{i+1}} [\Omega(x_{i+2}) - \Omega(x_i)] \\
& \left. + \frac{\Delta t}{2} \frac{\left[F_D \cdot u_r \right](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right\} \\
- & f \left\{ \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) \right. \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right), \\
& e(x_i, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) \\
& + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\
& + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\
& - \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} [\gamma(x_{i+1}) - \gamma(x_{i-1})] - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} [\Omega(x_{i+1}) - \Omega(x_{i-1})] \\
& \left. + \frac{\Delta t}{2} \frac{\left[F_D \cdot u_r \right](x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \right\}.
\end{aligned} \tag{2.255}$$

Comme on veut obtenir un développement à l'ordre 2 en espace et en temps de $\frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t}$, il faut que tous les termes apparaissant dans le dévelop-

pement de Taylor (2.250) à savoir $\frac{k}{h}$, $\frac{k^2}{h}$ et k soient développés à l'ordre 2 en espace et en temps. En particulier, on veut que $\frac{k}{h}$ soit à l'ordre 2 et donc en servant de la condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$, on veut obtenir le développement limité de G au point x_{i+1} à l'ordre 2.

Afin d'obtenir le d.l. de G au point x_{i+1} , on va introduire dans G (comme pour le schéma BBC classique) :

$$-f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right), \quad (2.256)$$

ainsi :

$$\begin{aligned} G &= f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + K_1, e(x_{i+1}, t^n) + K_2\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\ &+ \left(f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + K_3, e(x_{i+1}, t^n) + K_4\right) \right), \end{aligned} \quad (2.257)$$

avec

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right)}_3 \\ &- \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}}}_5 - \underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_6 \right) \\ &- \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \left(\underbrace{\frac{\beta(x_{i+2}, t^n) - \beta(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}}}_5 - \underbrace{\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_6 \right), \end{aligned} \quad (2.258)$$

$$\begin{aligned} K_2 &= -p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right)}_{11} \\ &+ p(x_{i+1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right)}_{12} \\ &+ p(x_{i+1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(\frac{\beta(x_{i+2}, t^n) - \beta(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right)}_{13} \\ &\underbrace{- \frac{\Delta t}{4\Delta m_{i+1}} [\gamma(x_{i+2}) - \gamma(x_i)]}_{20} \underbrace{- p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{4\Delta m_{i+1}} [\Omega(x_{i+2}) - \Omega(x_i)]}_{21} \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)}, \end{aligned} \quad (2.259)$$

$$\begin{aligned}
K_3 = & \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right)}_4 \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_{5bis} - \underbrace{\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_{6bis} \right) \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_{5bis} - \underbrace{\frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_{6bis} \right), \quad (2.260)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
K_4 = & e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) \\
& + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\
& + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\
& - \underbrace{\frac{\Delta t}{4\Delta m_i} \left[\gamma(x_{i+1}) - \gamma(x_{i-1}) \right]}_{20bis} - \underbrace{p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} \left[\Omega(x_{i+1}) - \Omega(x_{i-1}) \right]}_{21bis} \\
& + \frac{\Delta t}{2} \frac{[F_D \cdot u_r](x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)}. \quad (2.261)
\end{aligned}$$

D'après la formule de Taylor, (2.257) devient :

$$\begin{aligned}
G = & (K_1 - K_3) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + (K_2 - K_4) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
& + O(K_1^2) + O(K_2^2) + O(K_3^2) + O(K_4^2). \quad (2.262)
\end{aligned}$$

On va obtenir un d.l. à l'ordre 2 de $K_1 - K_3$ et de $K_2 - K_4$. Déjà pour $K_1 - K_3$: un certain nombre des termes se trouvant dans cette différence vont se retrouver dans les restes d'ordre 2 :

Lemme 2.4.3 : Soit z une fonction dérivable s'écrivant sous la forme d'une différence spatiale d'une fonction w elle même dérivable. Si z s'écrit :

$$z(x) := \frac{w(x + \frac{\Delta x}{2}) - w(x - \frac{\Delta x}{2})}{q(x, \Delta x)}, \quad (2.263)$$

(q étant une fonction dérivable ne s'annulant pas), alors la dérivée de z est un reste d'ordre 1 en Δx :

$$\frac{\partial z}{\partial x} = O(\Delta x). \quad (2.264)$$

En effet, en dérivant la fonction $z(x)$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial z}{\partial x} &= \frac{\overbrace{\left(\partial_x w\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) - \partial_x w\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)\right)}^{=\Delta x \partial_x^2 w(x) + O(\Delta x)} q(x, \Delta x) - \overbrace{\left(w\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) - w\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)\right)}^{=\Delta x \partial_x w(x) + O(\Delta x)} \partial_x q(x, \Delta x)}{(q(x, \Delta x))^2} \\ &= O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.265)$$

On va se servir par la suite du Lemme 2.4.3 qui va nous permettre de mettre une grande partie des termes intervenant dans les différences de termes $K_1 - K_3$ et $K_2 - K_4$ dans les restes d'ordre 2 : en appliquant (2.264) dans les termes 3 – 4 à la fonction $c_1(x)$:

$$c_1(x) := \frac{u(x, t^n) - u(x - \Delta x, t^n)}{\rho(x - \frac{\Delta x}{2}, t^n)}, \quad (2.266)$$

on obtient que $c_1(x) = 0(\Delta x)$ et

$$\begin{aligned} 3 - 4 &= \frac{\Delta t}{2\Delta x} (c_1(x_{i+3/2}) - c_1(x_{i+1/2})) = \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial c_1}{\partial x}(x_{i+1}) + O(\Delta x) \right) \\ &= 0(\Delta t \Delta x) \text{ grâce à (2.264)}. \end{aligned} \quad (2.267)$$

De la même manière, $5 - 5bis$, $6 - 6bis$, $\tilde{5} - \tilde{5}bis$ et $\tilde{6} - \tilde{6}bis$ sont d'ordre 2 ($O((\Delta t)^2)$). On se donne l'exemple de la différence de terme : $\tilde{6} - \tilde{6}bis$:

$$\begin{aligned} \tilde{6} - \tilde{6}bis &= \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \underbrace{\left[\tilde{z}(x_{i+1}) - \tilde{z}(x_i) \right]}_{=\Delta x \partial_x \tilde{z}(x_{i+1}) + O((\Delta x)^2) = O((\Delta t)^2)} \text{ grâce à (2.264)}, \end{aligned} \quad (2.268)$$

avec

$$\tilde{z}(x) := \frac{1}{\rho(x)} \frac{\beta(x) - \beta(x - \Delta x)}{\rho(x) + \rho(x - \Delta x)}. \quad (2.269)$$

Ainsi dans l'obtention du développement de $K_1 - K_3$, un seul terme va donner un reste d'ordre inférieur à 2, $-\left[\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n)\right]$:

$$-\left[\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n)\right] = \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\rho}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2). \quad (2.270)$$

Donc grâce à (A.31), on obtient :

$$K_1 - K_3 = \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\rho}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.271)$$

En faisant le même travail pour $K_2 - K_4$, on observe que les termes 12 et 13 sont similaires à ceux qui apparaissent pour la différence $K_1 - K_3$ à une multiplication près par $p(x_{i+1}, t^n)$, les termes d'ordre 2 restent d'ordre 2 tandis que le terme en énergie fait apparaître une dérivée en énergie. Les termes supplémentaires 20, 20bis et 21, 21bis font apparaître un reste d'ordre 2 : $O(\Delta t \Delta x)$

grâce à la double différence spatiale. (Le terme de traînée donne lui aussi le même reste). Par exemple pour $20 - 20bis$, on a :

$$\begin{aligned} 20 - 20bis &= -\frac{\Delta t}{4\Delta x} \left[\frac{\gamma(x_{i+2}) - \gamma(x_i)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{\gamma(x_{i+1}) - \gamma(x_{i-1})}{\rho(x_i, t^n)} \right] \\ &= -\frac{\Delta t}{4} \underbrace{\left[\frac{\frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{\frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_i)}{\rho(x_i, t^n)} \right]}_{=O(\Delta x)} + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.272)$$

Et ainsi, on obtient le développement de $K_2 - K_4$ à l'ordre 2 en espace et en temps :

$$K_2 - K_4 = \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.273)$$

De plus, grâce à la condition CFL, $\Delta t = O(\Delta x)$, on voit que les quantités K_1, K_2, K_3, K_4 sont des termes d'ordre 1 en temps et en espace : on a

$$O(K_1^2) = O(K_2^2) = O(K_3^2) = O(K_4^2) = O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \quad (2.274)$$

En repartant de (A.20), on a obtenu que :

$$\begin{aligned} G &= \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\ &\quad + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.275)$$

Comme la fonction G est en fait une fonction qui dépend du point x_{i+1} et de l'instant t^n , on va la renommer :

$$G := M(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \quad (2.276)$$

Si on note H la fonction qui représente $p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}$, H est donc la même fonction décalée d'un pas d'espace,

$$H = M(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \quad (2.277)$$

Afin d'obtenir le d.l. de k (2.251), il reste encore à étudier les termes provenant des expressions en $\beta_i^{n+1/2}$ exprimés à l'aide de (2.244), (2.245) et (2.246). On veut obtenir le d.l. de ces termes toujours à l'ordre 2 en espace et en temps, cependant, comme on a une différence entre une quantité exprimée au point x_{i+1} avec cette même quantité au point x_i , il est suffisant d'effectuer un d.l. de ces termes à l'ordre 1 car ces termes d'ordre 1 (de la forme $O(\Delta x)$ ou $O(\Delta t)$) vont devenir, via les différences spatiales, des termes d'ordre 2 grâce à la dérivée et donc au Δx qui en résulte.

On commence déjà par obtenir le d.l. de $u_r^{n+1/2}$: on a par définition du schéma (2.245) que :

$$u_{r_i}^{n+1/2} = \lambda \frac{\overbrace{p_{i+1}^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{:=K}}{2\Delta x}. \quad (2.278)$$

De la même manière que G (2.255) représentait la formule $p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}$, K représente la quantité $p_{i+1}^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}$ définie par (2.239) et (2.240). Contrairement à G que l'on voulait obtenir aux points x_{i+1} , on veut obtenir K aux points x_i . Le même type de développements que ceux faits pour obtenir le d.l. de G (en introduisant toujours la quantité $-f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)) + f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n))$ dans l'expression de K afin d'obtenir le d.l. de u_r au point (x_i, t^n)) conduisent au développement suivant à l'ordre 2 :

$$K = 2\Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \partial_1 f + 2\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \partial_2 f + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x), \quad (2.279)$$

ce qui conduit aux développements limités à l'ordre 1 de la vitesse relative au temps $n + 1/2$ (le reste $O(\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x})$ va dans les restes d'ordre 1 grâce à la condition CFL) :

$$UrDemi(x_i) := \lambda \frac{K}{2\Delta x} \quad (2.280)$$

$$\begin{aligned} &= \lambda \left[\underbrace{\frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f}_{=\partial_x p(x_i, t^n)} \right] + O(\Delta t) + O(\Delta x) \\ &= \lambda \partial_x p(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x) \\ &= u_r(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x) \text{ grâce à (2.201)}. \end{aligned} \quad (2.281)$$

On s'occupe de $\rho_i^{n+1/2}$ (2.246), on rappelle que :

$$\rho_i^{n+1/2} = \frac{2\Delta m_i}{2\Delta x + \Delta t A_i}, \quad (2.282)$$

$$\begin{aligned} \text{où } A_i &= u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} - \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\beta_{i+1}^n - \beta_i^n}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{\beta_i^n - \beta_{i-1}^n}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right). \end{aligned} \quad (2.283)$$

On veut obtenir le développement limité de :

$$RhoDemi(x_i) := \frac{2\Delta x \rho(x_i, t^n)}{2\Delta x + \Delta t \tilde{A}(x_i, t^n)},$$

$$\begin{aligned} \text{avec } \tilde{A}(x_i, t^n) &= u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta x(\rho(x_i) + \rho(x_{i+1}))} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta x(\rho(x_i) + \rho(x_{i-1}))} \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta x(\rho(x_i) + \rho(x_{i+1}))} - \frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta x(\rho(x_i) + \rho(x_{i-1}))} \right), \end{aligned} \quad (2.284)$$

($\tilde{A}(x_i, t^n)$ correspond à la quantité A_i (3.8) en remplaçant les $p_i^{n+1/2}$ et les $\beta_i^{n+1/2}$ par leurs valeurs définies par (2.239)-(2.241).)

On a immédiatement que $\tilde{A}(x_i, t^n) = O(\Delta t) + O(\Delta x)$ et donc on en déduit le développement de $RhoDemi$ à l'ordre 1 :

$$RhoDemi(x_i) = \frac{\rho(x_i, t^n)}{1 + O(\Delta t) + O(\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x})} = \rho(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x), \quad (2.285)$$

grâce à la condition CFL.

Pour le terme de concentration relative (2.244), on a :

$$CrDemi(x_i) := c_r(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r(x_{i+1}, t^n) - \rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r(x_{i-1}, t^n) \right). \quad (2.286)$$

A l'ordre 1, on a directement :

$$CrDemi(x_i) = c_r(x_i, t^n) + O(\Delta t). \quad (2.287)$$

En utilisant (2.281), (2.285) et (2.287), on obtient les termes d'ordre 0 du développement suivant :

$$C(x_i) := RhoDemi(x_i) \frac{1-(CrDemi(x_i))^2}{4} (UrDemi(x_i))^2, \quad (2.288)$$

($C(x_i)$ correspond à $\beta_i^{n+1/2}$). Sans exprimer les termes d'ordre 1, comme on a supposé que toutes les fonctions étaient de classe \mathcal{C}^2 , on sait qu'il existe deux fonctions $D_1(x, t)$ et $D_2(x, t)$ dérivables telles que :

$$\begin{aligned} C(x_i) &= \frac{1-(c_r(x_i))^2}{4} \rho(x_i, t^n) \underbrace{\lambda^2 (\partial_x p(x_i))^2}_{=(u_r)^2(x_i, t^n)} + D_1(x_i, t^n) \Delta t + D_2(x_i, t^n) \Delta x \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.289)$$

L'objectif est de calculer la quantité suivante à l'ordre 2 :

$$Z(x_i) := -\frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[\frac{C(x_{i+1}) - C(x_i)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} + \frac{C(x_i) - C(x_{i-1})}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right]. \quad (2.290)$$

Le développement limité (2.289) que l'on a obtenu à l'ordre 2 mais sans expliciter les fonctions D_1 et D_2 est suffisant : en effet, la différence $C(x_{i+1}) - C(x_i)$ transforme les termes d'ordre 1 de $C(x_i)$ dépendant des fonctions D_1 et D_2 en termes d'ordre 2 via l'apparition de leurs dérivées et d'un terme de la forme $O(\Delta x)$. Finalement,

$$\begin{aligned} Z(x_i) &= -\frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\frac{\partial(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_i)}{\partial x}}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} + \frac{\frac{\partial(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_{i-1})}{\partial x}}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right] + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x) \\ &= -\Delta t \frac{\frac{\partial(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_i)}{\partial x}}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.291)$$

Si l'on retourne maintenant à l'expression de k (2.251), on a grâce à (2.276) et (2.277) :

$$\begin{aligned} k &= \Delta t \left[\frac{u(x_{i-1/2}, t^n) + u(x_{i+1/2}, t^n)}{2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\frac{G}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} + \frac{H}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right) + Z(x_i) \right] \\ &= \Delta t u(x_i, t^n) + O(\Delta t (\Delta x)^2) - \frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \left[\frac{M(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ &\quad + (\Delta t) Z(x_i) + O((\Delta t)^3) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.292)$$

On s'est servi ici du fait que : $\Delta t = O(\Delta x)$ pour obtenir les O de k provenant des d.l. de G et de H .

Si on note :

$$K(x, t) = \frac{M(x, t)}{\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)}, \quad (2.293)$$

on a

$$\begin{aligned} & -\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \left[\frac{M(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ & = -\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \underbrace{[K(x_{i+1}, t^n) + K(x_i, t^n)]}_{2K(x_i, t^n) + \Delta x \frac{\partial K}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2)}. \end{aligned}$$

Comme $M(x_i, t^n) = O(\Delta x)$, on aura aussi que $\frac{\partial M}{\partial x} = O(\Delta x)$ en dérivant. Donc en dérivant la fonction K , on obtient que $\frac{\partial K}{\partial x} = O(\Delta x)$, et donc :

$$\begin{aligned} & -\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \left[\frac{M(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ & = -\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} K(x_i, t^n) + O((\Delta t)^2 \Delta x). \end{aligned} \quad (2.294)$$

Ainsi, en tenant compte de (2.294) et (2.291) dans (2.292), on obtient :

$$\begin{aligned} k & = \Delta t u(x_i, t^n) + O(\Delta t (\Delta x)^2) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \underbrace{K(x_i, t^n)}_{\frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}} \\ & - (\Delta t)^2 \frac{\partial(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} + O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x). \end{aligned} \quad (2.295)$$

En écrivant (2.251) sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} & = \frac{k}{h} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i^n, t^n) + \frac{\partial^1}{\partial t} (x_i^n, t^n) + \frac{k^2}{2h} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2} (x_i^n, t^n) \\ & + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2} (x_i^n, t^n) + k \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t} (x_i^n, t^n) + O(|h|^2) + O\left(\frac{|k|^3}{h}\right), \end{aligned} \quad (2.296)$$

et en utilisant (2.295) et en s'arrêtant à l'ordre 2 en espace et en temps, on obtient le d.l. suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} & = \left[u(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} - \Delta t \frac{\partial(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} \right] \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i^n, t^n) \\ & + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) \\ & + \frac{\partial^1}{\partial t} (x_i^n, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2} (x_i^n, t^n) \\ & + \frac{1}{2} \Delta t (u(x_i, t^n))^2 \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2} (x_i^n, t^n) \\ & + \Delta t u(x_i, t^n) \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t} (x_i^n, t^n), \end{aligned} \quad (2.297)$$

en effet, le terme : $\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}$ est un reste d'ordre 2 donc n'intervient pas dans le développement de k :

$$\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} = O((\Delta t)^2) \text{ car } M(x_i, t^n) = O(\Delta x). \quad (2.298)$$

De plus, en retournant à la définition de $M(x_i, t^n)$ (2.275) et (2.276), on voit que cette quantité s'exprime simplement avec la dérivée de la pression :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{\Delta x} M(x_i, t^n) &= \Delta t \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \\ &\quad + \Delta t \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) \\ &= \Delta t \frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.299)$$

On a donc finalement obtenu le développement limité du membre de gauche de notre équation en $\frac{1}{\rho}$:

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u(x_i, t^n) \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad - \Delta t \frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad - \Delta t \frac{\frac{\partial(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2)(x_i)}{\partial x}}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i^n, t^n) + \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial t}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta t (u(x_i, t^n))^2 \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \Delta t u(x_i, t^n) \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (2.300)$$

Phase A2

On va maintenant pouvoir se servir des équations du modèle HEM (2.228)-(2.232) afin de simplifier les dérivées secondes de $\frac{1}{\rho}$ qui interviennent dans cette expression : on va calculer la quantité

$$\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho}. \quad (2.301)$$

En dérivant l'équation de conservation de la masse (2.228) par rapport au temps et à l'espace, on obtient :

$$\partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + (\partial_t u)(\partial_x \frac{1}{\rho}) + u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} = (\partial_t \frac{1}{\rho})(\partial_x u) + \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u, \quad (2.302)$$

$$\text{et } \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} + u \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 u, \quad (2.303)$$

donc

$$\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} = -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) - \frac{\Delta t}{2} u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u, \quad (2.304)$$

grâce à (2.302), puis :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) - \frac{\Delta t}{2} u \underbrace{\partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho}}_{\substack{= -u \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 u \text{ par (2.303)}}} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) + \Delta t u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u. \end{aligned} \quad (2.305)$$

De plus, grâce à (2.303), on a :

$$\Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} = -\Delta t (u)^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 u. \quad (2.306)$$

Finalement, on obtient l'expression de (2.301) :

$$\begin{aligned} &\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) + \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u. \end{aligned} \quad (2.307)$$

Si on dérive maintenant l'équation de quantité de mouvement par rapport à x , on a :

$$\begin{aligned} \partial_{xt}^2 u + (\partial_x u)^2 + u \partial_{xx}^2 u &= -\frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 p - (\partial_x \frac{1}{\rho}) \partial_x p - (\partial_x \frac{1}{\rho}) \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) \\ &\quad - \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2). \end{aligned} \quad (2.308)$$

On réinjecte cette quantité dans (2.307) :

$$\begin{aligned} &\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) + \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_x u)^2}_{= \frac{\Delta t}{2} \partial_x u (-u \partial_x \frac{1}{\rho}) \text{ par (2.228)}} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) \partial_x p \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2), \end{aligned} \quad (2.309)$$

ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} &\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_x \frac{1}{\rho}) \left(\underbrace{(\partial_t u) + u (\partial_x u)}_{= -\frac{1}{\rho} \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) \text{ par (2.230)}} \right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) \partial_x p \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho^2} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2) \\ &= -\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2). \end{aligned} \quad (2.310)$$

De plus,

$$\Delta t \frac{1}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} = \Delta t \frac{1}{2\rho(x_i)} + O(\Delta t \Delta x), \quad (2.311)$$

et on obtient bien le développement limité de la partie gauche de l'équation de conservation de la masse de la Proposition 2.4.2 (2.254) :

$$\begin{aligned} \text{MbresGauche} &:= \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} = u(x_i, t^n) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &- \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2)(x_i)}{\partial x}}{\rho(x_i)} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &+ \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 (\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2) \\ &+ O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.312)$$

Partie B

Pour la partie droite de l'équation vérifiée par $\frac{1}{\rho}$, en repartant de (2.238), le schéma vérifie :

$$\begin{aligned} &\frac{u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n}{\Delta m_i} - \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} - \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{\left(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2\right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2\right)_i^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i+1}} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta m_i} \frac{\left(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2\right)_i^{n+1/2} - \left(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2\right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \end{aligned} \quad (2.313)$$

ce qui conduit à étudier la quantité :

$$\begin{aligned} \text{MbresDroiteRho}(x_i, t^n) &:= \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\ &+ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\ &- \frac{(\Delta t)}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i)} \underbrace{\left[\frac{C(x_{i+1}) - C(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} - \frac{C(x_i) - C(x_{i-1})}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right]}_{:=G_2}, \end{aligned} \quad (2.314)$$

où l'on rappelle que $C(x)$ (2.288) représente les $(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2)^{n+1/2}$ toujours en utilisant les relations suivantes : (2.244), (2.245), (2.246).

Proposition 2.4.4 *Le développement limité du membre de droite de l'équation (2.238) correspondant au schéma BBC modifié pour le modèle HEM est (sous la condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$) :*

$$\begin{aligned} \text{MembreDroiteRho}(x_i, t^n) &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \Delta t \frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\rho(x_i)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\rho(x_i)} \right) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)(\Delta t)). \end{aligned} \quad (2.315)$$

Dans ce membre de droite, on commence par traiter le terme G_2 (2.314) à l'ordre 2, ce qui nécessite un développement à l'ordre 3 des termes en $C(x)$. Cependant, un développement à l'ordre 3 de chacun des termes en $C(x)$ sans expliciter les termes d'ordre 1 et 2 est suffisant pour obtenir l'ordre 3 de G_2 . En effet, G_2 s'obtient en faisant deux fois une différence spatiale de la même fonction, ce qui conduit à l'apparition d'un terme $(\Delta x)^2$ en facteur et les termes d'ordre 1 et 2 de $C(x_i)$ vont faire partie des restes d'ordre 2 de G_2 grâce à la remarque suivante :

Remarque 2.4.5 *Soit une fonction L de classe \mathcal{C}^3 développée à l'ordre 1 selon Δx et Δt : $L(x) = D_0(x) + O(\Delta t) + O(\Delta x)$, et une fonction l également de classe \mathcal{C}^3 ne s'annulant pas. Alors*

$$\begin{aligned} \frac{L(x+\Delta x) - L(x)}{l(x)} - \frac{L(x) - L(x-\Delta x)}{l(x-\Delta x)} &= (\Delta x)^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial D_0(x)}{\partial x}}{l(x)} \right) \\ &+ O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^3) + O(\Delta t(\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2 \Delta x). \end{aligned} \quad (2.316)$$

En effet, via la double différence de termes en $L(x)$, il apparaît immédiatement un $(\Delta x)^2$ en facteur devant toutes les dérivées des termes et la connaissance du terme à l'ordre 0 de $L(x)$ suffit à obtenir un développement à l'ordre 3 de la quantité (2.316).

En appliquant cette remarque à $l(x) = \rho(x) + \rho(x + \Delta x)$ et $L(x) = C(x)$, on obtient immédiatement le d.l. de G_2 en utilisant (2.289) :

$$G_2 = - \frac{\Delta t}{\rho(x_i)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial x}}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right) \right) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta t)(\Delta x)). \quad (2.317)$$

En réutilisant (2.311), on obtient finalement que :

$$G_2 = - \frac{\Delta t}{2\rho(x_i)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\rho(x_i)} \right) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)(\Delta t)). \quad (2.318)$$

Il reste à traiter le terme :

$$- \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho} (x_i, t^n) \left[\frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right], \quad (2.319)$$

qui ressemble fortement au terme que l'on a déjà traité (les calculs se trouvent dans l'annexe A, section A.1) pour obtenir le d.l. du membre de droite de l'équation de la masse du schéma BBC classique. En effet, on considère les mêmes termes hormis que le terme G (qui représente dans les deux cas la quantité $p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2} = f(\frac{1}{\rho_{i+1}^{n+1/2}}, e_{i+1}^{n+1/2}) - f(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2})$) du schéma BBC-HEM possède des termes supplémentaires. En effet, dans notre cas, la fonction G s'écrit (2.255) alors que pour le schéma classique, on a (A.4). L'obtention de (2.319) à l'ordre 2 nécessite, comme pour le schéma classique, l'obtention de G et de H à l'ordre 3, le développement limité à effectuer est exactement le même que celui du schéma BBC classique (A.57) hormis que les nouveaux K_i contiennent des termes supplémentaires dépendant des grandeurs relatives. Cependant, on va voir que l'on a la proposition suivante :

Proposition 2.4.6 *Le d.l. de (2.319) à l'ordre 2 en espace et en temps reste identique à celui obtenu pour le schéma BBC classique ((A.120) sans la dérivée en u) : les termes dépendant des grandeurs relatives n'interviennent finalement pas.*

On reprend le d.l. de la fonction G à l'ordre 3 que l'on avait fait (A.57) dans l'Annexe A :

$$\begin{aligned}
G &= (K_1 - K_3)\partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + (K_2 - K_4)\partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
&\quad + \frac{K_1^2 - K_3^2}{2}\partial_{11}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + \frac{K_2^2 - K_4^2}{2}\partial_{22}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
&\quad + (K_1 K_2 - K_3 K_4)\partial_{12}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
&\quad + O(K_1^3) + O(K_2^3) + O(K_3^2) + O(K_4^2), \tag{2.320}
\end{aligned}$$

avec cette fois-ci les K_i définis par (2.258) au lieu de (A.16) pour K_1 , (2.259) au lieu de (A.17) pour K_2 , (2.260) au lieu de (A.18) pour K_3 et pour K_4 , (2.261) au lieu de (A.19). Pour K_1 et K_3 , on a en plus les termes dépendant de la fonction β : $\tilde{5}$, $\tilde{6}$, $\tilde{5bis}$, $\tilde{6bis}$. Pour K_2 et K_4 , en plus des termes en β , s'ajoutent les termes dépendant des fonctions γ et Ω : 20, 21, 20bis, 21bis ainsi que les deux termes de traînée.

En fait, comme H correspond à la même fonction que G mais décalée d'un pas d'espace ($-\Delta x$), on a vu dans l'annexe A que tous les termes d'ordre 2 du d.l. de G deviennent en faisant la différence entre G et H des termes d'ordre 3 via l'apparition de dérivées et donc d'un Δx en facteur : les termes en $\Delta t \Delta x$ de G deviennent des $O(\Delta t (\Delta x)^2)$ pour la quantité $G - H$, ceux en $((\Delta x)^2)$ pour G des $O((\Delta x)^3)$ pour $G - H$ et enfin ceux en $(\Delta t)^2$ de G des $O((\Delta t)^2 \Delta x)$ pour $G - H$ (A.96). De plus, les K_i (2.258)-(2.261) sont clairement des restes d'ordre 1 : $O(\Delta t) + O(\Delta x)$, donc les K_i^2 et les $K_i K_j$ sont des termes d'ordre 2 qui vont se retrouver dans des restes à l'ordre 3 via la différence entre G et H . Finalement, dans le d.l. de G (2.320) à l'ordre 3, les seuls termes que l'on a à expliciter sont les termes à l'ordre 1 des différences $K_1 - K_3$ ainsi que $K_2 - K_4$ pour obtenir le d.l. de (2.319) à l'ordre 3.

Du coup, en commençant par $K_1 - K_3$, les termes supplémentaires par rapport au schéma BBC classique sont ceux en β (i.e. $\tilde{5}$, $\tilde{6}$, $\tilde{5bis}$ et $\tilde{6bis}$ dans (2.258) et (2.260)), qui sont identiques à ceux relatifs à la pression 5 et 6 en remplaçant la fonction p par la fonction β . Les termes 5 et 6 intervenaient dans le d.l. de G du schéma BBC classique sous la forme de dérivée de la fonction z (A.29). En définissant Z par :

$$Z(x) = \frac{\beta(x) - \beta(x - \Delta x)}{\rho(x)(\rho(x) + \rho(x - \Delta x))}, \quad (2.321)$$

la même fonction mais dépendant de β et non plus de p , dans le développement de $K_1 - K_3$, on obtient le même développement que celui que l'on avait obtenu pour G (défini dans le cadre de l'étude de l'ordre du schéma BBC classique) (A.87) devant le $\partial_1 f$ avec en plus $\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial Z}{\partial x}$. La fonction Z est comme la fonction z un $O(\Delta x)$ de par sa définition et va aussi faire partie des termes *simpli1* de G (A.87) et qui vont devenir des restes d'ordre 3 via leur différence avec le terme similaire de H (A.92). Les termes à l'ordre 1 de $K_1 - K_3$ qui ne se simplifient pas via la différence $G - H$ vont donc être identiques à ceux obtenu pour le schéma BBC classique.

Pour la différence $K_2 - K_4$, les termes en β (i.e. 13 et 13bis dans (2.259)-(2.261)) ne vont pas non plus intervenir dans le développement de $G - H$ à l'ordre 3. En notant $Z_2 = pZ$ la fonction similaire à z_2 (A.63), ces termes seront aussi des *simpli1* et vont aussi disparaître dans les termes d'ordre 3 dans la différence $G - H$. Finalement, il nous reste à développer 20 - 20bis, 21 - 21bis, ainsi que la différence des termes de traînée de (2.259) et (2.261), on obtient :

$$20 - 20bis = -\frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \right) + O(\Delta t (\Delta x)^2), \quad (2.322)$$

$$21 - 21bis = -\frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho} (x_{i+1}) \frac{\partial \gamma}{\partial x} (x_{i+1}) \right) + O(\Delta t (\Delta x)^2), \quad (2.323)$$

$$TermeTrain = \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{F_D \cdot u_r}{\rho} (x_{i+1}) \right) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \quad (2.324)$$

Les termes que le schéma BBC-HEM rajoute sont des termes qui vont devenir des termes à l'ordre 3 lors de la différence entre G et H .

Ainsi, les termes à l'ordre 0 et 1 de $K_1 - K_3$ et de $K_2 - K_4$ du schéma BBC-HEM sont identiques à ceux du schémas BBC classique et le développement de (2.319) est finalement identique à celui obtenu pour le schéma BBC classique.

On obtient bien le d.l. du membre de droite de $\frac{1}{\rho}$ de la Proposition 2.4.4 (2.315) en utilisant (2.318) et (A.56) :

$$\begin{aligned} MbreDroite := & \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \Delta t \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} (x_i) \frac{\partial p}{\partial x} (x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \\ & - \frac{\Delta t}{2\rho(x_i)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\rho(x_i)} \right) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)(\Delta t)). \end{aligned} \quad (2.325)$$

On fait maintenant la différence entre le membre de gauche de $\frac{1}{\rho}$ (2.254) et le membre de droite (2.325), on obtient :

$$\begin{aligned}
& u \frac{\partial^1}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial^1}{\rho} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\partial x} \frac{\partial^1}{\rho} \\
& + \frac{\partial^1}{\partial t} - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right) \\
& - \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\frac{\partial^1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}}{\rho} \\
& + \frac{\Delta t}{2\rho(x_i)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\rho(x_i)} \right) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)(\Delta t)). \quad (2.326)
\end{aligned}$$

Or $\frac{1}{\rho}$ est solution de (2.228), donc :

$$u \frac{\partial^1}{\partial x} + \frac{\partial^1}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (2.327)$$

en dérivant par rapport à x l'expression suivante :

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right)}{\rho(x_i)} \right) = \frac{\Delta t}{2\rho} \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right), \quad (2.328)$$

et finalement, en utilisant (2.327) et (2.328) dans (2.326), tous les termes se simplifient et il ne reste plus que les termes d'ordre 2 en espace et en temps.

Ce qui prouve que l'on a bien le second point du Théorème 2.4.1 : l'équation discrétisée de conservation de la masse (2.238) du schéma BBC modifié pour le HEM (BBC-HEM) reste bien d'ordre 2 en espace et en temps.

2.4.2 Perte de l'ordre 2 dans l'équation sur la concentration relative pour le schéma BBC-HEM

On va maintenant voir que l'équation sur la concentration relative c_r est quant à elle seulement d'ordre 1 en espace et en temps.

On repart de l'équation discrétisée HEM pour la concentration relative (2.220) :

$$c_{r_i}^{n+1} = c_{r_i}^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i}, \quad (2.329)$$

avec toujours les quantités définies au temps $n + 1/2$ (2.244), (2.246) et (2.245). On réécrit cette équation pour faire apparaître le terme correspondant à la dérivée temporelle :

$$\frac{c_{r_i}^{n+1} - c_{r_i}^n}{\Delta t} = - \frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta m_i}. \quad (2.330)$$

Partie A Phase A_1

La concentration relative c_r étant définie elle aussi au centre de la maille, l'évolution du maillage suit toujours (2.249). On s'occupe toujours du membre de gauche de l'équation de (2.330), en écrivant la formule de Taylor cette fois-ci pour la concentration relative :

$$c_r(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - c_r(x_i^n, t^n) = k \frac{\partial c_r}{\partial x}(x_i^n, t^n) + h \frac{\partial c_r}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2 c_r}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 c_r}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) + hk \frac{\partial^2 c_r}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) + O(|h|^3) + O(|k|^3),$$

avec toujours $h = \Delta t$ et k défini par (2.251). On définit la quantité suivante :

$$MbreGaucheCr(x_i, t^n) := \frac{c_r(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - c_r(x_i^n, t^n)}{\Delta t}, \quad (2.331)$$

où on rappelle que x_i^{n+1} correspond au centre de la maille i qui a suivi le mouvement (2.249) :

$$x_i^{n+1} = x_i^n + k, \quad (2.332)$$

où k est défini par (2.251).

Proposition 2.4.7 *Le développement limité du membre de gauche de l'équation relative à c_r correspondant au schéma BBC modifié pour le HEM vérifie (sous la condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$) :*

$$MbreGaucheCr(x_i, t^n) = u(\partial_x c_r) + \partial_t c_r - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_{xt}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x u) (\partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r)) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \quad (2.333)$$

On obtient ainsi directement le développement limité du membre de gauche en utilisant le développement intermédiaire (i.e. avant le regroupement de termes de la **Phase A2**) de la conservation de la masse (2.300) et en l'appliquant à c_r (les dérivées de $\frac{1}{\rho}$ qui apparaissaient dans le développement de Taylor deviennent des dérivées de c_r).

Le développement limité du membre de gauche de notre équation en c_r est donc :

$$\begin{aligned} MbreGaucheCr(x_i, t^n) &= \frac{c_r(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - c_r(x_i^n, t^n)}{\Delta t} \\ &= u(x_i, t^n) \frac{\partial c_r}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \Delta t \frac{\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial c_r}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad - \Delta t \frac{\frac{\partial (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)(x_i)}{\partial x}}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} \frac{\partial c_r}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{\partial c_r}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 c_r}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta t (u(x_i, t^n))^2 \frac{\partial^2 c_r}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \Delta t u(x_i, t^n) \frac{\partial^2 c_r}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (2.334)$$

Phase A_2

L'étape qui change par rapport au calcul lié à la conservation de la masse est l'étape de recombinaison des termes à l'aide des équations du modèle HEM (2.228)-(2.236). On veut exprimer la quantité suivante :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 c_r}{\partial t^2} + \frac{u^2}{2} \frac{\partial^2 c_r}{\partial x^2} + u \frac{\partial^2 c_r}{\partial x \partial t}. \quad (2.335)$$

L'équation vérifiée par c_r fait intervenir des grandeurs relatives que l'on ne suit pas en temps et cela va rendre la simplification du paquet de terme ci-dessus moins efficace.

On dérive l'équation sur la concentration relative (2.229) par rapport à x puis à t et on obtient :

$$\partial_{xt}^2 c_r + (\partial_x u)(\partial_x c_r) + u \partial_{xx}^2 c_r = -\partial_x \left(\frac{1}{\rho} \right) \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) - \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right), \quad (2.336)$$

$$\partial_{tt}^2 c_r + (\partial_t u)(\partial_x c_r) + u \partial_{xt}^2 c_r = -\partial_t \left(\frac{1}{\rho} \right) \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) - \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right). \quad (2.337)$$

Donc en remplaçant dans (2.337) l'expression de $\partial_{xt}^2 c_r$ par sa valeur donnée par l'équation (2.336), on obtient que :

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 c_r + \Delta t u \partial_{xt}^2 c_r \\ & = -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x c_r) \\ & + \frac{\Delta t}{2} u \left[-(\partial_x u)(\partial_x c_r) - u \partial_{xx}^2 c_r - \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) - \left(\partial_x \frac{1}{\rho} \right) \left(\partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) \right) \right] \\ & \quad - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_{xt}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) - \frac{\Delta t}{2} \left(\partial_t \frac{1}{\rho} \right) \left(\partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) \right). \end{aligned} \quad (2.338)$$

En développant l'expression, on a :

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 c_r + \Delta t u \partial_{xt}^2 c_r + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 c_r \\ & = -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x c_r) - \frac{\Delta t}{2} u (\partial_x u)(\partial_x c_r) - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) \\ & \quad = -\frac{\Delta t}{2} (\partial_x c_r) \left(\partial_t u + u \partial_x u \right) \\ & \quad - \frac{\Delta t}{2} u \left(\partial_x \frac{1}{\rho} \right) \left(\partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) \right) - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_{xt}^2 \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) - \frac{\Delta t}{2} \left(\partial_t \frac{1}{\rho} \right) \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) \end{aligned} \quad (2.339)$$

Or d'après l'équation (2.230), on a :

$$\partial_t u + u(\partial_x u) = -\frac{1}{\rho} \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right), \quad (2.340)$$

et toujours (2.228),

$$\partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} (\partial_x u). \quad (2.341)$$

Donc en revenant à (2.339), on obtient finalement :

$$\begin{aligned}
& \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 c_r + \Delta t u \partial_{xt}^2 c_r + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 c_r \\
= & \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x c_r) (\partial_x p) + \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x c_r) (\partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2)) - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) \\
& - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_{xt}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x u) (\partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r)), \tag{2.342}
\end{aligned}$$

et on obtient bien le membre de gauche de l'équation sur la concentration relative c_r de la Proposition 2.4.7 (2.333) en injectant (2.342) dans (2.334). En plus des termes d'advection sur c_r , il reste les dérivées secondes de $\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r$ ainsi qu'un terme contenant la dérivée selon x de $\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r$.

Partie B

On s'occupe maintenant du membre de droite de (2.330),

$$\begin{aligned}
& MbreDroiteCr(x_i, t^n) := -\frac{1}{2\Delta x \rho(x_i, t^n)} \\
& \left[RhoDemi(x_{i+1}) \frac{1-CrDemi^2(x_{i+1})}{2} UrDemi(x_{i+1}) \right. \\
& \left. - RhoDemi(x_{i-1}) \frac{1-CrDemi^2(x_{i-1})}{2} UrDemi(x_{i-1}) \right], \tag{2.343}
\end{aligned}$$

où $RhoDemi$, $CrDemi$ et $UrDemi$ sont les fonctions correspondants aux expressions (2.246), (2.244) et (2.245) définies par (2.284), (2.286) et (2.280).

Proposition 2.4.8 *Le développement limité du membre de droite de l'équation en c_r correspondant au schéma BBC modifié pour le modèle HEM est (sous la condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$) :*

$$\begin{aligned}
MbreDroiteCr(x_i, t^n) = & -\frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) + \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) \left[\partial_x (c_r u_r) \right] \\
& - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) (\partial_t u_r) \\
& - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u) (\partial_x u_r) + \frac{\Delta t}{2\rho} c_r u_r \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1-c_r^2}{2} \left[\partial_{xt}^2 u_r + u \partial_{xx}^2 u_r \right] \\
& + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \tag{2.344}
\end{aligned}$$

Comme on veut obtenir le d.l. de (2.343) à l'ordre 2 en espace et en temps, et comme on a une différence de termes de la même fonction $RhoDemi \frac{1-CrDemi^2}{2} UrDemi$ prise en des points différents, il sera nécessaire d'obtenir un développement limité (d.l.) de cette fonction seulement à l'ordre 2 (car cette différence de termes va faire apparaître une dérivée spatiale et donc un Δx qui va simplifier la division par Δx pour avoir un d.l. à l'ordre 2 de tout le membre de droite).

On commence par se donner un d.l. à l'ordre 2 de $CrDemi$. On note la fonction $\Gamma(x) := \rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r$. On a d'après (2.244) :

$$\begin{aligned}
CrDemi(x_i) &= c_r(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{4\Delta x \rho(x_i, t^n)} \left[\Gamma(x_{i+1}) - \Gamma(x_{i-1}) \right] \\
&= c_r(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial \Gamma}{\partial x}(x_i) + O(\Delta t \Delta x), \tag{2.345}
\end{aligned}$$

d'où

$$(CrDemi(x_i))^2 = (c_r(x_i, t^n))^2 - c_r(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial \Gamma}{\partial x}(x_i) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x), \quad (2.346)$$

et ainsi

$$\frac{1 - CrDemi^2(x_i)}{2} = \frac{1 - (c_r(x_i, t^n))^2}{2} - \frac{\Delta t}{2\rho} c_r \frac{\partial \Gamma}{\partial x}(x_i) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.347)$$

On passe maintenant à *RhoDemi*. D'après (2.246) :

$$RhoDemi = \frac{2\Delta x \rho(x_i, t^n)}{2\Delta x + \Delta t \tilde{A}(x_i)}, \quad (2.348)$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{A}(x_i, t^n) &= u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \\ &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right) \\ &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} - \frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right). \end{aligned} \quad (2.349)$$

Dans $\tilde{A}(x_i)$, hormis le terme

$$u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) = \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2), \quad (2.350)$$

les termes restants sont des restes d'ordre 2 car on a deux fois une double différence de la même fonction (qui fait donc apparaître un terme en $(\Delta x)^2$) multiplié par $\frac{\Delta t}{\Delta x}$, et ces termes sont donc des $O(\Delta t \Delta x)$. On obtient ainsi :

$$\tilde{A}(x_i, t^n) = \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x), \quad (2.351)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x + \Delta t \tilde{A}(x_i, t^n)} &= \frac{1}{2\Delta x} \frac{1}{1 + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x)} \\ &= \frac{1}{2\Delta x} \left[1 - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x) \right]. \end{aligned} \quad (2.352)$$

En revenant à (2.348), il vient :

$$RhoDemi = \rho(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \rho(x_i, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.353)$$

La partie la plus importante de ce développement consiste en l'obtention du d.l. à l'ordre 2 de *UrDemi*(x_i), i.e. l'équation (2.245). On a :

$$\begin{aligned} UrDemi(x_i) &= \frac{\lambda}{2\Delta x} \left[\underbrace{\left(f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + K_1, e(x_i, t^n) + K_2\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \right)}_{:=A} \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{\left(f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + K_3, e(x_i, t^n) + K_4\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \right)}_{:=B} \right], \end{aligned} \quad (2.354)$$

avec

$$\begin{aligned}
K_1 &= \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + \underbrace{\frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right)}_3 \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+2}) + \rho(x_{i+1})}}_5 - \underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}) + \rho(x_i)}}_6 \right) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left(\underbrace{\frac{\beta(x_{i+2}, t^n) - \beta(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+2}) + \rho(x_{i+1})}}_5 - \underbrace{\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}) + \rho(x_i)}}_6 \right),
\end{aligned} \tag{2.355}$$

$$\begin{aligned}
K_2 &= e(x_{i+1}, t^n) - e(x_i, t^n) - p(x_{i+1}, t^n) \underbrace{\frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right)}_{11} \\
&\quad + p(x_{i+1}, t^n) \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+2}) + \rho(x_{i+1})} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}) + \rho(x_i)} \right)}_{12} \\
&\quad + p(x_{i+1}, t^n) \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left(\frac{\beta(x_{i+2}, t^n) - \beta(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+2}) + \rho(x_{i+1})} - \frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}) + \rho(x_i)} \right)}_{13} \\
&\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left[\gamma(x_{i+2}) - \gamma(x_i) \right]}_{20} - \underbrace{p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{4(\Delta x)} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \left[\Omega(x_{i+2}) - \Omega(x_i) \right]}_{21} \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)},
\end{aligned} \tag{2.356}$$

$$\begin{aligned}
K_3 &= \frac{1}{\rho}(x_{i-1}) - \frac{1}{\rho}(x_i) + \underbrace{\frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \left(u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n) \right)}_4 \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \left(\underbrace{\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})}}_{5bis} - \underbrace{\frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_{i-2})}}_{6bis} \right) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \left(\underbrace{\frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})}}_{5bis} - \underbrace{\frac{\beta(x_{i-1}, t^n) - \beta(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_{i-2})}}_{6bis} \right),
\end{aligned} \tag{2.357}$$

et

$$\begin{aligned}
K_4 = & e(x_{i-1}, t^n) - e(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n) \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \left(u(x_{i-1/2}, t^n) - u(x_{i-3/2}, t^n) \right) \\
& + p(x_{i-1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \left(\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} - \frac{p(x_{i-1}, t^n) - p(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_{i-2})} \right) \\
& + p(x_{i-1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \left(\frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} - \frac{\beta(x_{i-1}, t^n) - \beta(x_{i-2}, t^n)}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_{i-2})} \right) \\
& - \underbrace{\frac{\Delta t}{4(\Delta x)} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} [\gamma(x_i) - \gamma(x_{i-2})]}_{20bis} - \underbrace{p(x_{i-1}, t^n) \frac{\Delta t}{4(\Delta x)} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} [\Omega(x_i) - \Omega(x_{i-2})]}_{21bis} \\
& + \frac{\Delta t}{2} \frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)}, \tag{2.358}
\end{aligned}$$

et l'on veut obtenir un d.l. au point (x_i, t^n) de cette quantité à l'ordre 2 en espace et en temps. Le terme K_3 (2.357) est le même que K_1 (2.355) décalé de deux pas d'espace $(-2\Delta x)$ sauf pour la différence de $\frac{1}{\rho}$. De même, le terme K_4 (2.358) est le même que le terme K_2 (2.356) décalé lui aussi de deux pas d'espace sauf pour la partie liée à la différence d'énergie. Comme on veut obtenir un d.l. de u_r à l'ordre 2, on veut donc obtenir un d.l. à l'ordre 3 de A et B de (2.354).

Proposition 2.4.9 *Le développement limité de $UrDemi(x_i)$ (2.354) est (sous condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$) :*

$$\begin{aligned}
UrDemi(x_i) = & u_r + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t u_r + u \partial_x u_r + u_r (\partial_x u)) \\
& + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \tag{2.359}
\end{aligned}$$

En effet par la formule de Taylor, on a :

$$\begin{aligned}
A = & K_1 \partial_1 f + K_2 \partial_2 f + \frac{K_1^2}{2} \partial_{11} f + \frac{K_2^2}{2} \partial_{22} f + K_1 K_2 \partial_{12}^2 f + O((K_1)^3) + O((K_2)^3), \tag{2.360}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B = & K_3 \partial_1 f + K_4 \partial_2 f + \frac{K_3^2}{2} \partial_{11} f + \frac{K_4^2}{2} \partial_{22} f + K_3 K_4 \partial_{12}^2 f + O((K_3)^3) + O((K_4)^3). \tag{2.361}
\end{aligned}$$

Les quantités (2.355), (2.356), (2.357) et (2.358) étant des termes d'ordre 1, les restes des formules de Taylor sont bien des restes d'ordre 3.

On obtient pour K_1 (2.355) le développement suivant :

$$\begin{aligned}
K_1 = & \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x_i, t^n) + O((\Delta x)^3) \\
& + \frac{\Delta t}{2\rho(x_{i+1})} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}) + O(\Delta t (\Delta x)^2) - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i+1}) + \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} (x_{i+1})}_{=O((\Delta t)^2 \Delta x)} \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial b}{\partial x} (x_{i+1}) + \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} (x_{i+1})}_{=O((\Delta t)^2 \Delta x)} + O((\Delta t)^2 \Delta x), \tag{2.362}
\end{aligned}$$

avec

$$a(x) = \frac{p(x + \Delta x) - p(x)}{\rho(x + \Delta x) + \rho(x)}, \quad (2.363)$$

$$\text{et } b(x) = \frac{\beta(x + \Delta x) - \beta(x)}{\rho(x + \Delta x) + \rho(x)}. \quad (2.364)$$

Les fonctions $a(x)$ et $b(x)$ ainsi que leurs dérivées sont des termes d'ordre 1 ($O(\Delta x)$) (d'après le Lemme 2.4.3) donc les termes de la forme $(\Delta t)^2 \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}(x_{i+1})$ ainsi que $(\Delta t)^2 \frac{\partial^2 b}{\partial x^2}(x_{i+1})$ sont des termes d'ordre 3, i.e. des $O((\Delta t)^2 \Delta x)$.

On obtient pour K_1^2 :

$$\begin{aligned} K_1^2 &= (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \right)^2(x_i) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2(x_{i+1}) + \Delta t \Delta x \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) \frac{\partial^1}{\partial x}(x_i) \\ &\quad + O((\Delta x)^3) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta t)^3). \end{aligned} \quad (2.365)$$

Pour K_2 (2.356), on a :

$$\begin{aligned} K_2 &= \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^3) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) + O(\Delta t (\Delta x)^2) \\ &\quad + \frac{(\Delta t)^2}{4 \Delta x} \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial a}{\partial x}(x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4 \Delta x} \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial b}{\partial x}(x_{i+1}) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i+1}) - \frac{\Delta t}{2} \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i+1}) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} + O((\Delta t)^2 \Delta x), \end{aligned} \quad (2.366)$$

et en élevant au carré (en se souvenant que $\frac{\partial a}{\partial x}(x_{i+1})$ et $\frac{\partial b}{\partial x}(x_{i+1})$ sont des $O(\Delta x)$) :

$$\begin{aligned} K_2^2 &= (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2(x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \right)^2(x_{i+1}) \\ &\quad + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right)^2(x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \right)^2 \\ &\quad - \underbrace{\Delta t (\Delta x) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) - \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i+1})}_{\text{termes d'ordre 2 dans } K_2^2 - K_4^2} \\ &\quad - \underbrace{\Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i+1}) + \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right)}_{\text{termes d'ordre 2 dans } K_2^2 - K_4^2} \\ &\quad + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i+1})}{(\rho(x_{i+1}))^2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i+1})}{(\rho(x_{i+1}))^2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i+1}) \\ &\quad - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i+1})}{(\rho(x_{i+1}))^2} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i+1}) \\ &\quad - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{1}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i+1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right) - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i+1})}{\rho(x_{i+1})} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i+1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right) \\ &\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O((\Delta t)^3). \end{aligned} \quad (2.367)$$

On s'occupe maintenant des termes croisés :

$$\begin{aligned}
K_1 K_2 &= \left(\Delta x\right)^2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) \\
&\quad - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} (x_{i+1}) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} (x_{i+1}) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) \\
&+ \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right) + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}) \frac{\partial e}{\partial x} (x_i, t^n) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{p}{(\rho)^2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 (x_{i+1}) - \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{1}{\rho} \right)^2 \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{p}{(\rho)^2} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right) \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O((\Delta t)^3). \tag{2.368}
\end{aligned}$$

On fait le même travail pour les termes K_3 et K_4 :

$$\begin{aligned}
K_3 &= -\Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x_i, t^n) + O((\Delta x)^3) \\
&+ \frac{\Delta t}{2\rho(x_{i-1})} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1}) + O(\Delta t (\Delta x)^2) - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i-1}) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial b}{\partial x} (x_{i-1}) + O((\Delta t)^2 \Delta x), \tag{2.369}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_3^2 &= (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \right)^2 (x_i) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 (x_{i-1}) - \Delta t \Delta x \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1}) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i) \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta t)^3). \tag{2.370}
\end{aligned}$$

Enfin, pour K_4 , hormis les dérivées de l'énergie, on obtient le même développement que pour K_2 décalé de $(-2\Delta x)$:

$$\begin{aligned}
K_4 &= -\Delta x \frac{\partial e}{\partial x} (x_i, t^n) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} (x_i, t^n) + O((\Delta x)^3) \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i-1}) + O(\Delta t (\Delta x)^2) \\
&+ \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial a}{\partial x} (x_{i-1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial b}{\partial x} (x_{i-1}) \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial \gamma}{\partial x} (x_{i-1}) - \frac{\Delta t}{2} \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial \Omega}{\partial x} (x_{i-1}) \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right) + O((\Delta t)^2 \Delta x), \tag{2.371}
\end{aligned}$$

et pour la même quantité élevée au carré :

$$\begin{aligned}
K_4^2 &= (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2(x_{i-1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \right)^2(x_{i-1}) \\
&\quad + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right)^2(x_{i-1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \right)^2 \\
&+ \underbrace{\Delta t (\Delta x) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) + \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i-1})}_{\text{termes d'ordre 2 dans } K_2^2 - K_4^2} \\
&+ \underbrace{\Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i-1}) - \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right)}_{\text{termes d'ordre 2 dans } K_2^2 - K_4^2} \\
&+ \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i-1})}{(\rho(x_{i-1}))^2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i-1}) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{(p(x_{i-1}))^2}{(\rho(x_{i-1}))^2} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i-1}) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i-1})}{(\rho(x_{i-1}))^2} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i-1}) \\
&- \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{1}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i-1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right) - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p(x_{i-1})}{\rho(x_{i-1})} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i-1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right) \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O((\Delta t)^3). \tag{2.372}
\end{aligned}$$

Enfin pour les termes croisés, on obtient :

$$\begin{aligned}
K_3 K_4 &= \left(\Delta x \right)^2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i, t^n) + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i, t^n) \\
&+ \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_{i-1}) \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i, t^n) + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_{i-1}) \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i, t^n) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right) \\
&- \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{p}{(\rho)^2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2(x_{i-1}) - \frac{(\Delta t)^2}{4} \left(\frac{1}{\rho} \right)^2 \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \\
&- \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{p}{(\rho)^2} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1}) \left(\frac{[F_D \cdot u_r](x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_{i-1}, t^n)} \right) \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O((\Delta t)^3). \tag{2.373}
\end{aligned}$$

Pour obtenir le d.l. de $A - B$ de (2.354), on utilise les deux relations suivantes :

Remarque 2.4.10 *Si Y est une fonction de classe C^3 , on a les relations suivantes :*

$$Y(x_{i+1}) - Y(x_{i-1}) = 2\Delta x \frac{\partial Y}{\partial x}(x_i) + O((\Delta x)^3), \tag{2.374}$$

$$Y(x_{i+1}) + Y(x_{i-1}) = 2Y(x_i) + O((\Delta x)^2). \tag{2.375}$$

Pour obtenir la différence $K_1 - K_3$, on se sert de (2.362) et de (2.369) :

$$\begin{aligned}
K_1 - K_3 &= 2\Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) + \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)(x_i) + O((\Delta x)^3) \\
&\quad + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2), \tag{2.376}
\end{aligned}$$

tandis que pour $K_2 - K_4$, on se sert de (2.366) et de (2.371) :

$$\begin{aligned}
K_2 - K_4 &= 2\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i) \right) \\
&- \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_i) \right) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) + \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{[F_D \cdot u_r]}{\rho} \right) \\
&+ O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \tag{2.377}
\end{aligned}$$

On obtient donc en utilisant (2.368) et (2.373) :

$$\begin{aligned}
K_1 K_2 - K_3 K_4 &= -\Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i) \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i) - \Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_i) \\
&- \Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i) \frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_i) + \Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i) \frac{[F_D \cdot u_r](x_i)}{\rho(x_i)} + \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i) \\
&+ O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \tag{2.378}
\end{aligned}$$

Pour $\frac{K_1^2 - K_3^2}{2}$ ainsi que pour $\frac{K_2^2 - K_4^2}{2}$, tous les termes de même signe de K_1^2 (resp. K_2^2) et de K_3^2 (resp. K_4^2) mais décalés de deux pas d'espace sont des termes d'ordre 2 et vont donc devenir des restes d'ordre 3 via l'apparition de la dérivée (et donc d'un Δx) en utilisant (2.374). On a finalement grâce à (2.375) :

$$\begin{aligned}
\frac{K_1^2 - K_3^2}{2} &= \Delta t \Delta x \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i, t^n) \\
&+ O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \tag{2.379}
\end{aligned}$$

Seuls les termes marqués comme étant d'ordre 2 de K_2^2 (2.367) et de K_4^2 (2.372) ne sont pas des termes d'ordre 3 :

$$\begin{aligned}
\frac{K_2^2 - K_4^2}{2} &= -\Delta t \Delta x \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) - \Delta t \Delta x \frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \\
&- \Delta t \Delta x \frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \\
&+ \Delta t \Delta x \frac{[F_D \cdot u_r]}{\rho} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \tag{2.380}
\end{aligned}$$

On obtient ainsi le d.l. de u_r (2.354) en retournant à (2.360) et (2.361) :

$$UrDemi(x_i) = \frac{\lambda}{2\Delta x} [A - B], \tag{2.381}$$

avec (en utilisant (2.376), (2.377), (2.378), (2.379) et (2.380)) :

$$\begin{aligned}
A - B &= (K_1 - K_3)\partial_1 f + (K_2 - K_4)\partial_2 f + \frac{K_1^2 - K_3^2}{2}\partial_{11}^2 f + \frac{K_2^2 - K_4^2}{2}\partial_{22}^2 f \\
&\quad + (K_1 K_2 - K_3 K_4)\partial_{12}^2 f + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2) \\
&= \left[2\Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) + \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)(x_i) + O((\Delta x)^3) \right] \partial_1 f \\
&+ \left[2\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)(x_i) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \right)(x_i) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) \right. \\
&\quad \left. + \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{[F_D \cdot u_r]}{\rho} \right) \right] \partial_2 f \\
&+ \left[-\Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i) - \Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x}(x_i) - \Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x}(x_i) \right. \\
&\quad \left. + \Delta t \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \frac{[F_D \cdot u_r]}{\rho}(x_i) + \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i) \right] \partial_{12}^2 f \\
&\quad + \left[\Delta t \Delta x \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n) \right] \partial_{11}^2 f \\
&+ \left[-\Delta t \Delta x \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) - \Delta t \Delta x \frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) - \Delta t \Delta x \frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \right. \\
&\quad \left. + \Delta t \Delta x \frac{[F_D \cdot u_r]}{\rho} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \right] \partial_{22}^2 f \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \tag{2.382}
\end{aligned}$$

On sait que (comme $p = f(\frac{1}{\rho}, e)$) :

$$2\Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \partial_1 f + 2\Delta x \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f = 2\Delta x \partial_x p. \tag{2.383}$$

Comme dans le membre de gauche (2.333), il apparaît des dérivées temporelles et la dérivée selon x de u_r , on veut simplifier cette expression (2.382) à l'aide des équations du modèle HEM (2.228)-(2.236) : on veut faire apparaître les dérivées de u_r via celles de la pression (on rappelle que $u_r = \lambda \partial_x p$). En dérivant l'équation sur l'énergie (2.231) en se souvenant des définitions de γ (2.242) et de Ω (2.243), les termes en $\Delta t \Delta x$ devant $\partial_2 f$ de (2.382) deviennent :

$$\begin{aligned}
&-\Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right)(x_i) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \right)(x_i) - \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{p}{\rho} \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) + \Delta t \Delta x \partial_x \left(\frac{[F_D \cdot u_r]}{\rho} \right) \\
&= \Delta t \Delta x \left[\partial_x (\partial_t e + u \partial_x e) \right]. \tag{2.384}
\end{aligned}$$

Ceux devant $\partial_{12}^2 f$ que l'on note "*Terme12*" donnent :

$$Terme12 = \Delta t \Delta x \left[(\partial_t e + u \partial_x e) \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \right]. \tag{2.385}$$

Et pour ceux devant $\partial_{22}^2 f$ (notés "*Terme22*"), il vient :

$$Terme22 = \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x} \left[\partial_t e + u \partial_x e \right]. \tag{2.386}$$

Enfin grâce à l'équation continue de conservation de la masse (2.228), on a :

$$\partial_x \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \partial_x \left(\partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \right) \right). \quad (2.387)$$

On obtient finalement que :

$$\begin{aligned} A - B &= 2\Delta x \partial_x p + \Delta t \Delta x \partial_x \left(\partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \right) \right) \partial_1 f \\ &\quad + \Delta t \Delta x \left[\partial_x (\partial_t e + u \partial_x e) \right] \partial_2 f \\ &\quad + \left[\Delta t \Delta x \quad \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \quad \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \right] \partial_{11}^2 f \\ &\quad = \partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \left(\frac{1}{\rho} \right) \text{ par (2.228)} \\ &\quad + \Delta t \Delta x \frac{\partial e}{\partial x} \left[\partial_t e + u \partial_x e \right] \partial_{22}^2 f \\ &\quad + \Delta t \Delta x \left[(\partial_t e + u \partial_x e) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial e}{\partial x} \quad \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} \right] \partial_{12}^2 f \\ &\quad = \partial_t \frac{1}{\rho} + u \partial_x \frac{1}{\rho} \text{ par (2.228)} \\ &\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.388)$$

Afin de simplifier les dérivées partielles secondes de f , on veut faire apparaître la dérivée seconde de la pression, selon xx :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \left(\frac{1}{\rho} \right)}{\partial x^2} \partial_1 f + \left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \right)^2 \partial_{11}^2 f + 2 \left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} \right) \partial_{12}^2 f + \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} \partial_2 f + \left(\frac{\partial e}{\partial x} \right)^2 \partial_{22}^2 f,$$

et selon xt :

$$\begin{aligned} \partial_{xt}^2 p &= \partial_{xt}^2 \left(\frac{1}{\rho} \right) \partial_1 f + (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_t \frac{1}{\rho}) \partial_{11}^2 f + \left((\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_t e) + (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x e) \right) \partial_{12}^2 f \\ &\quad + (\partial_{xt}^2 e) \partial_2 f + ((\partial_x e) (\partial_t e)) \partial_{22}^2 f. \end{aligned} \quad (2.389)$$

La quantité $A - B$ (2.388) devient :

$$\begin{aligned} A - B &= 2\Delta x \partial_x p + u \Delta t \Delta x \partial_{xx}^2 p \\ &\quad + \Delta t \Delta x \partial_{xt}^2 p + \Delta t \Delta x (\partial_x u) (\partial_x p) + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (2.390)$$

Ainsi, en retournant à (2.354),

$$\begin{aligned} UrDemi(x_i) &= \lambda \partial_x p + \lambda \frac{\Delta t}{2} (\partial_{xt}^2 p + u \partial_{xx}^2 p) + \lambda \frac{\Delta t}{2} (\partial_x u) (\partial_x p) \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.391)$$

En se souvenant de la définition de u_r ($u_r = \lambda \partial_x p$), cela termine la preuve de la Proposition 2.4.9 (2.359) :

$$\begin{aligned} UrDemi(x_i) &= u_r + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t u_r + u \partial_x u_r + u_r (\partial_x u)) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) \\ &\quad + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.392)$$

En utilisant (2.392), (2.347) et (2.353), on obtient finalement le développement à l'ordre 2 de :

$$\begin{aligned} \frac{1-CrDemi^2(x_i)}{2} RhoDemi(x_i)UrDemi(x_i) &= \rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r(x_i) - \frac{\Delta t}{2} c_r u_r \frac{\partial \lambda}{\partial x} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \rho u_r \frac{1-c_r^2}{2} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1-c_r^2}{2} \rho (\partial_t u_r + u \partial_x u_r + u_r \partial_x u) \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.393)$$

On obtient maintenant le d.l. du membre de droite en revenant à (2.343) et en utilisant (2.374) et (2.393) :

$$\begin{aligned} MbreDroiteCr(x_i) &= -\frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_x (c_r u_r \frac{\partial \Gamma}{\partial x}) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \frac{\partial u}{\partial x}) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} (\partial_t u_r + u (\partial_x u_r) + u_r (\partial_x u)) \right) \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x), \end{aligned} \quad (2.394)$$

ce qui donne après simplification :

$$\begin{aligned} MbreDroiteCr(x_i) &= -\frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_x (c_r u_r \frac{\partial \Gamma}{\partial x}) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} (\partial_t u_r + u (\partial_x u_r))) \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x) \\ &= -\frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) + \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right) \left[\partial_x (c_r u_r) \right] - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2}) (\partial_t u_r) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u) (\partial_x u_r) + \frac{\Delta t}{2\rho} c_r u_r \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1-c_r^2}{2} \left[\partial_{xt}^2 u_r + u \partial_{xx}^2 u_r \right] \\ &\quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.395)$$

Donc si l'on soustrait le membre de gauche de l'équation sur c_r (2.333) au membre de droite (2.395), on obtient :

$$\begin{aligned} MbreGaucheCr(x_i) - MbreDroiteCr(x_i) &= \underbrace{u (\partial_x c_r) + \partial_t c_r + \frac{1}{\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r)}_{=0 \text{ car } c_r \text{ vérifie l'équation (2.229)}} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_{xx}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) \left[u + c_r u_r \right] - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) \left[\partial_x u + \partial_x (c_r u_r) \right] \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u) (\partial_x u_r) - \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_{xt}^2 (\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r) + \frac{\Delta t}{2\rho} \partial_x (\rho \frac{1-c_r^2}{2}) (\partial_t u_r) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{1-c_r^2}{2} \left[\partial_{xt}^2 u_r + u \partial_{xx}^2 u_r \right] + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.396)$$

L'objet de la suite de cette sous-section est de constater que les termes d'ordre 1 de la différence des membres de gauche et de droite de l'équation sur c_r (2.396) ne se simplifient pas en des restes d'ordre 2. Afin de simplifier au maximum cette expression, on développe les différentes dérivées de la fonction Γ ($\Gamma(x) =$

$\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r$) pour faire apparaître explicitement les dérivées de u_r . Si on note $\Upsilon := \rho \frac{1-c_r^2}{2} = \frac{\Gamma}{u_r}$, on a les dérivées suivantes :

$$\partial_x(\Gamma) = \Upsilon \partial_x(u_r) + u_r \partial_x(\Upsilon), \quad (2.397)$$

$$\partial_{xt}(\Gamma) = (\partial_t \Upsilon)(\partial_x u_r) + \Upsilon \partial_{xt}^2 u_r + (\partial_t u_r)(\partial_x \Upsilon) + u_r \partial_{xt}^2 \Upsilon, \quad (2.398)$$

$$\partial_{xx}^2(\Gamma) = 2(\partial_x \Upsilon)(\partial_x u_r) + u_r \partial_{xx}^2 \Upsilon + \Upsilon \partial_{xx}^2 u_r. \quad (2.399)$$

Finalement, toutes les dérivées temporelles de (2.396) disparaissent et ce terme devient :

$$\begin{aligned} & \text{MbreGaucheCr}(x_i) - \text{MbreDroiteCr}(x_i) = \\ & -\frac{\Delta t}{2\rho}(\partial_x u_r) \left[u(\partial_x \Upsilon) + 2c_r u_r(\partial_x \Upsilon) + \partial_t \Upsilon + \partial_x(c_r u_r) \right] \\ & -\frac{\Delta t}{2\rho} u_r \left[(\partial_{xx}^2 \Upsilon)(u + c_r u_r) + \partial_x \Upsilon(\partial_x u + (\partial_x c_r u_r)) + \partial_{xt}^2 \Upsilon \right] \\ & -\frac{\Delta t}{2} \frac{1-c_r^2}{2} c_r u_r (\partial_{xx}^2 u_r) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (2.400)$$

Il reste encore à simplifier les dernières dérivées temporelles présentes dans ce terme : en dérivant la fonction Υ par rapport à x et t et en utilisant à la fois les équations continues sur ρ :

$$\partial_t \rho + u(\partial_x \rho) = -\rho(\partial_x u), \quad (2.401)$$

et c_r (2.229) ainsi que (2.397), on obtient :

$$\partial_t \Upsilon + u \partial_x \Upsilon = -\Upsilon(\partial_x u) + c_r \Upsilon(\partial_x u_r) + c_r u_r(\partial_x \Upsilon). \quad (2.402)$$

Enfin, en dérivant $\partial_x \Upsilon$ par rapport à x et t , on a :

$$\begin{aligned} & \partial_{xt}^2 \Upsilon + u \partial_{xx}^2 \Upsilon = \partial_x \left(\frac{\Upsilon}{\rho} \right) \left[\underbrace{\partial_t \rho + u \partial_x \rho}_{=-\rho(\partial_x u)} \right] \\ & + \frac{\Upsilon}{\rho} \left[\underbrace{\partial_{xt}^2 \rho + u(\partial_{xx}^2 \rho)}_{=-2(\partial_x \rho)(\partial_x u) - \rho(\partial_{xx}^2 u)} \right] - \partial_x(\rho c_r) \left[\underbrace{\partial_t c_r + u \partial_x c_r}_{-\frac{\Upsilon}{\rho}(\partial_x u_r) - \frac{u_r}{\rho}(\partial_x \Upsilon)} \right] \\ & - \rho c_r \left[\underbrace{\partial_{xt}^2 c_r + u \partial_{xx}^2 c_r}_{=-(\partial_x u)(\partial_x c_r) - \Upsilon(\partial_x \frac{1}{\rho})(\partial_x u_r) - u_r(\partial_x \frac{1}{\rho})(\partial_x \Upsilon) - \frac{2}{\rho}(\partial_x \Upsilon)(\partial_x u_r) - \frac{u_r}{\rho} \partial_{xx}^2 \Upsilon - \frac{\Upsilon}{\rho} \partial_{xx}^2 u_r} \right], \end{aligned} \quad (2.403)$$

en utilisant (2.229) ainsi que (2.401) et leurs dérivées par rapport à x . En injec-

tant ces deux dernières relations dans (2.400), il vient finalement :

$$\begin{aligned}
& MbreGaucheCr(x_i) - MbreDroiteCr(x_i) = \\
& -\frac{\Delta t}{\rho}(\partial_x u_r)(\partial_x \Upsilon)u_r \left[3c_r \right] \\
& -\frac{\Delta t}{2\rho}u_r(\partial_x u_r)(\partial_x c_r) - \frac{\Delta t}{2\rho}c_r(1 + \Upsilon)\left(\partial_x u_r\right)^2 \\
& +\frac{\Delta t}{2\rho}\Upsilon(\partial_x u)(\partial_x u_r) - \frac{\Delta t}{2\rho}u_r(\partial_x \Upsilon)(\partial_x u) \\
& -\frac{\Delta t}{2\rho}(u_r)^2\left(c_r - \frac{1}{\rho}\right)(\partial_{xx}^2 \Upsilon) - \frac{\Delta t}{2\rho}\Upsilon u_r\left(c_r - \frac{1}{\rho}\right)(\partial_{xx}^2 u_r) \\
& -\frac{\Delta t}{2\rho}(u_r)^2(\partial_x \Upsilon)\left[\partial_x c_r - \partial_x \frac{1}{\rho}\right] + \frac{\Delta t}{2\rho}u_r(\partial_x u)(\partial_x c_r) \\
& +\frac{\Delta t}{2\rho}u_r\Upsilon\left(\partial_x \frac{1}{\rho}\right)(\partial_x u_r). \tag{2.404}
\end{aligned}$$

Or, par définition de la fonction Υ , on a :

$$\partial_x \Upsilon = \frac{\Upsilon}{\rho}\partial_x \rho - \rho c_r(\partial_x c_r), \tag{2.405}$$

$$\partial_{xx}^2 \Upsilon = -2c_r(\partial_x c_r)(\partial_x \rho) + \frac{\Upsilon}{\rho}\partial_{xx}^2 \rho - (\partial_x(\rho c_r))(\partial_x c_r) - \rho c_r \partial_{xx}^2 c_r. \tag{2.406}$$

Cette dernière relation montre que dans (2.404), il va apparaître la dérivée seconde de ρ et de c_r provenant du terme en $\partial_{xx}^2 \Upsilon$ qui ne se simplifieront avec aucun autre terme. La partie du schéma BBC-HEM relative à la concentration relative c_r est donc seulement d'ordre 1 en temps et en espace car il reste des termes d'ordre 1 en temps que l'on ne peut pas simplifier.

Cette perte d'ordre peut s'expliquer par le fait que les équations de mélange classiques ne faisaient intervenir que des quantités dont on connaissait l'équation en temps (hormis la pression), ce qui permettait de simplifier un certain nombre de termes par dérivation de ces équations. Avec le jeu d'équations HEM, cette fois-ci, les recombinaisons dépendent de la vitesse relative u_r dont on ne connaît qu'une formule algébrique et pas d'évolution spatio-temporelle.

2.4.3 Consistance (ordre 1) du schéma BBC-modifié

Comme la concentration relative n'est pas solution du schéma à l'ordre 2, on va vérifier que le schéma BBC-modifié est bien consistant avec les équations du modèle HEM (2.228)-(2.236). Comme cette fois-ci, il ne s'agit que de vérifier l'ordre 1 du schéma, on va considérer la vraie dépendance des équations en pression : on va prendre en compte le fait que la loi donnant la pression dépend aussi de la concentration relative c_r (contrairement à l'hypothèse que l'on a fait dans les deux sous-sections précédentes (sous-sections 2.4.1 et 2.4.2) où l'on avait considéré que p suivait la loi (2.203) pour simplifier les calculs). Dorénavant, dans cette section : on considère que la pression p suit la loi d'état suivante :

$$p = f\left(\frac{1}{\rho}, e, c_r\right). \tag{2.407}$$

On rappelle que la résolution du système permettant d'obtenir la pression (2.46)-(2.48), permet aussi d'obtenir des quantités propres au deux fluides du mélange :

les quantités e_r ainsi que ρ^\pm sont données par trois fonctions b, d et g vérifiant les équations (2.10) (Equ. (2.43)-(2.45)), i.e. :

$$\rho^+ = b(\rho, e, c_r), \quad (2.408)$$

$$\rho^- = d(\rho, e, c_r), \quad (2.409)$$

$$e_r = g(\rho, e, c_r). \quad (2.410)$$

Ainsi, les équations du modèle HEM que l'on considère sont constituées des équations (2.228)-(2.236) mais avec cette fois-ci les équations (2.407)-(2.410) qui remplacent les relations de fermeture (2.233)-(2.236).

Dorénavant, dans le schéma discrétisé BBC-HEM (2.208)-(2.227), à la place de (2.212), on a :

$$p_i^{n+1/2} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}\right), \quad (2.411)$$

et à la place de (2.215)-(2.217)

$$e_{r_i}^{n+1/2} = g\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}\right), \quad (2.412)$$

$$\rho_i^{-,n+1/2} = d\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}\right), \quad (2.413)$$

$$\rho_i^{+,n+1/2} = b\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}\right). \quad (2.414)$$

$$(2.415)$$

Enfin, à la place de (2.225)-(2.227) :

$$e_{r_i}^{n+1} = g\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}\right), \quad (2.416)$$

$$\rho_i^{-,n+1} = d\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}\right), \quad (2.417)$$

$$\rho_i^{+,n+1} = b\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}}, e_i^{n+1}, c_{r_i}^{n+1}\right), \quad (2.418)$$

et la dérivée en espace de la pression (2.407) s'écrit :

$$\partial_x p = \left(\partial_x \frac{1}{\rho}\right) \partial_1 f + (\partial_x e) \partial_2 f + (\partial_x c_r) \partial_3 f. \quad (2.419)$$

2.4.3.1 Consistance de l'équation en énergie

On considère (pour l'équation vérifiée par l'énergie), la discrétisation suivante (2.219) et (2.221) :

$$\begin{aligned}
\frac{e_i^{n+1} - e_i^n}{\Delta t} &= -\frac{p_i^{n+1/2}}{\Delta x \rho_i^n} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}) \\
&- \underbrace{\frac{1}{2\Delta x} \frac{1}{\rho_i^n} \left[\left(\rho e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho e_r \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2} \right]}_{=Terme1Ener} \\
&- p_i^{n+1/2} \underbrace{\frac{1}{2\Delta x \rho_i^n} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1 - c_r^2}{4} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2} \right]}_{=Terme2Ener} \\
&\quad + \underbrace{\left(\frac{F_D}{\rho} \cdot u_r \right)_i^{n+1/2}}_{=TraineeDemi}. \tag{2.420}
\end{aligned}$$

On commence cette fois-ci par traiter le membre de droite de cette équation.

Partie B

On s'occupe des termes dépendants des grandeurs relatives : *Terme1Ener* et *Terme2Ener* du membre de droite de (2.420) : pour cela, on a besoin des développements limités à l'ordre 1 des membres de droite lorsque l'on introduit des fonctions prises en x_i au lieu de la discrétisation de c_r (2.210), e (2.211) ainsi que ρ définie par (2.209) au temps intermédiaires $n + 1/2$. A l'ordre 1, les formules (2.210) et (2.211) fournissent les développements suivants :

$$CrDemi(x_i) = c_r(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x), \tag{2.421}$$

$$EnerDemi(x_i) = e(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \tag{2.422}$$

Pour la quantité ρ au temps $n + 1/2$, définie par (2.209) et (2.208), la seule chose qui change par rapport au développement obtenu à la sous-section précédente (2.284) est que la pression dépend également de c_r (2.407) mais $\tilde{A}(x_i, t^n)$ reste toujours un terme à l'ordre 1. Ainsi, on a toujours grâce à (2.285) le développement suivant :

$$RhoDemi(x_i) = \rho(x_i) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \tag{2.423}$$

Enfin, il reste à obtenir le développement correspondant à la vitesse relative à $n + 1/2$ (2.278) : comme la pression dépend en plus de c_r , pour obtenir le développement limité de la quantité K , il faut cette fois-ci introduire la quantité $-f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n), c_r(x_i, t^n)) + f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n), c_r(x_i, t^n))$ dans K et cela conduit au même développement (2.279) avec en plus le terme $2\Delta x \frac{\partial c_r}{\partial x}(x_i) \partial_3 f$. Grâce à (2.419), on obtient toujours le développement à l'ordre 1 de *UrDemi* (2.281) :

$$UrDemi(x_i, t^n) = u_r(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \tag{2.424}$$

Ainsi, le développement à l'ordre 1 du produit de termes suivants est immédiat en utilisant (2.423), (2.421) et (2.424) :

$$\begin{aligned} EnerDemi1 &:= RhoDemi \frac{1-CrDemi^2}{2} UrDemi \\ &= \rho(x_i, t^n) \frac{1-c_r(x_i)}{4} u_r(x_i) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.425)$$

$$(2.426)$$

Les termes $Terme1Ener$ et $Terme2Ener$ de (2.420) font apparaître en plus les quantités relatives e_r ainsi que $\frac{1}{\rho_r}$ au temps $n+1/2$. Comme on a $\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho^*} - \frac{1}{\rho^+}$, d'après (2.408)-(2.408), on a :

$$\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{d(\rho, e, c_r)} - \frac{1}{b(\rho, e, c_r)}. \quad (2.427)$$

Si l'on considère la quantité $\frac{1}{\rho_r}$ au pas de temps $n+1/2$ en x_i (que l'on note $InvRhoRelDemi$), on a :

$$\begin{aligned} InvRhoRelDemi &:= \frac{1}{d(RhoDemi(x_i), EnerDemi(x_i), CrDemi(x_i))} \\ &\quad - \frac{1}{b(RhoDemi(x_i), EnerDemi(x_i), CrDemi(x_i))}. \end{aligned} \quad (2.428)$$

Comme on a les d.l. à l'ordre 1 (2.421)-(2.423), il vient immédiatement :

$$\begin{aligned} InvRhoRelDemi &= \frac{1}{d(\rho(x_i), e(x_i), c_r(x_i))} \\ &\quad - \frac{1}{b(\rho(x_i), e(x_i), c_r(x_i))} + O(\Delta t) + O(\Delta x), \end{aligned} \quad (2.429)$$

$$= \frac{1}{\rho_r}(x_i) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.430)$$

Enfin l'énergie relative prise aux points x_i au pas de temps $n+1/2$, notée $EnerRelDemi$, est une approximation à l'ordre 1 de :

$$\begin{aligned} EnerRelDemi &:= g(RhoDemi(x_i), EnerDemi(x_i), CrDemi(x_i)) \\ &= g(\rho(x_i), e(x_i), c_r(x_i)) + O(\Delta t) + O(\Delta x) \\ &= e_r(x_i) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.431)$$

On connaît donc maintenant les termes à l'ordre 0 de $EnerDemi1$ $EnerRelDemi$ ainsi que $EnerDemi1$ $InvRhoRelDemi$. Comme ils apparaissent dans $Terme1Ener$ ou $Terme2Ener$ sous la forme d'une différence d'une quantité au point x_{i+1} moins la même quantité au point x_{i-1} , les termes à l'ordre 1 de ces quantités (en Δt ou en Δx) vont devenir des termes à l'ordre 2 via l'apparition d'un Δx . Ainsi, ces termes seront des $O(\Delta t) + O(\Delta x)$ des termes $Terme1Ener$ et $Terme2Ener$ et on obtient finalement le d.l. à l'ordre 1 des termes relatifs à l'énergie de l'équation (2.420) :

$$Terme1Ener = -\frac{1}{\rho}(x_i) \partial_x \left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right) + O(\Delta t) + O(\Delta x), \quad (2.432)$$

$$Terme2Ener = -\frac{1}{\rho}(x_i) \partial_x \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.433)$$

Il reste encore à s'occuper du terme de traînée de (2.420) : on a grâce à (2.39) et (2.40) :

$$\frac{F_D}{\rho} \cdot u_r = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+} \frac{3}{8} \frac{C_d}{r_{moy}} \frac{1 - c_r^2}{4} |u_r|^3. \quad (2.434)$$

Or $c^- = \frac{1+c_r}{2}$, donc la quantité c^- au pas de temps $n + 1/2$ et au point x_i est :

$$cMoinsDemi(x_i) := \frac{1+CrDemi(x_i)}{2} \quad (2.435)$$

$$= \frac{1+c_r(x_i, t^n)}{2} + O(\Delta t) + O(\Delta x) \text{ par (2.421)} \quad (2.436)$$

$$= c^-(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.437)$$

On prend l'approximation du coefficient de traînée valable pour des vitesses intermédiaires :

$$C_d \sim \frac{24}{Re} = \frac{12\eta}{r\rho^-|u_r|}. \quad (2.438)$$

En utilisant (2.424), comme pour l'énergie relative à $n + 1/2$ (2.431), on obtient $RhoMoinsDemi(x_i) = \rho^-(x_i) + O(\Delta t) + O(\Delta x)$. Grâce à (2.409) ainsi que (2.421)-(2.423), le coefficient de traînée au pas de temps $n + 1/2$ vaut :

$$CdDemi(x_i) := \frac{12\eta}{rRhoMoinsDemi(x_i)|UrDemi(x_i)|} \quad (2.439)$$

$$= \frac{12\eta}{r\rho^-(x_i)|u_r(x_i)|} + O(\Delta t) + O(\Delta x) \quad (2.440)$$

$$= C_d(x_i) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.441)$$

De la même manière, le rapport $\frac{\rho^-}{\rho^+}$ pris au temps $n + 1/2$ donne en utilisant (2.421)-(2.423) ainsi que (2.408)-(2.410) :

$$\begin{aligned} RapportDensite(x_i) &= \frac{d(RhoDemi(x_i), EnerDemi(x_i), CrDemi(x_i))}{b(RhoDemi(x_i), EnerDemi(x_i), CrDemi(x_i))} \\ &= \frac{d(\rho(x_i), e(x_i), c_r(x_i))}{b(\rho(x_i), e(x_i), c_r(x_i))} + O(\Delta t) + O(\Delta x) \\ &= \frac{\rho^-(x_i)}{\rho^+(x_i)} + O(\Delta t) + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.442)$$

On obtient ainsi le développement du terme de traînée au pas de temps $n + 1/2$ à l'ordre 1 pris en x_i :

$$TraineeDemi(x_i) = \frac{F_D}{\rho} \cdot u_r(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.443)$$

On a donc traité tous les termes dépendant des grandeurs relatives de l'équation (2.420). La partie en $-p_i^{n+1/2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2})$ fait intervenir la pression qui dépend dorénavant de la concentration relative c_r (2.407). On va noter J la quantité $p_i^{n+1/2}$ définie par (2.411), (2.209), (2.211) et (2.210) :

$$J = f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + K_1, e(x_i, t^n) + K_2, c_r(x_i, t^n) + K_3\right), \quad (2.444)$$

avec

$$\begin{aligned}
K_1 &= \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \underbrace{\left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right)}_3 \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_5 - \underbrace{\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_6 \right) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_{\tilde{5}} - \underbrace{\frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_{\tilde{6}} \right), \quad (2.445)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_2 &= -p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \underbrace{\left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right)}_{11} \\
&\quad + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_{12} - \underbrace{\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_{12} \right) \\
&\quad + p(x_i, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{\beta(x_{i+1}, t^n) - \beta(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_{13} - \underbrace{\frac{\beta(x_i, t^n) - \beta(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_{13} \right) \\
&\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{4\Delta m_i} [\gamma(x_{i+1}) - \gamma(x_{i-1})]}_{20} - \underbrace{p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{4\Delta m_i} [\Omega(x_{i+1}) - \Omega(x_{i-1})]}_{21} + \frac{\Delta t}{2} \frac{F_D}{\rho} \cdot u_r(x_i, t^n),
\end{aligned}$$

$$K_3 = -\frac{\Delta t}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r(x_{i+1}) - \rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r(x_{i-1}) \right). \quad (2.446)$$

Il est également immédiat que K_1 , K_2 et K_3 sont des $O(\Delta t)$, J vaut donc à l'ordre 1 :

$$J = f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n), c_r(x_i, t^n)\right) + O(\Delta t) + O(\Delta x) \quad (2.447)$$

$$= p(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x) \text{ par (2.407)}. \quad (2.448)$$

Comme pour l'équation de l'énergie du schéma BBC classique, on a l'expression $\frac{1}{\Delta m_i}(u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2})$ prise aux points x_i qui correspond toujours au membre de droite de l'équation de conservation de la masse (2.314) :

$$\begin{aligned}
\text{MbreDroiteRho} &:= \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\
&\quad + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\
&\quad - \underbrace{\frac{(\Delta t)}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i)} \left[\frac{C(x_{i+1}) - C(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} - \frac{C(x_i) - C(x_{i-1})}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right]}_{:=G_2}. \quad (2.449)
\end{aligned}$$

Dans la sous-section 2.4.1, la fonction G était la fonction qui représentait la formule $p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}$ prise aux points x_i (2.255). Cependant, comme la pression dépend dorénavant aussi de la concentration relative, G est une fonction de trois variables avec :

$$G = f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + K_1, e(x_{i+1}, t^n) + K_2, c_r(x_{i+1}, t^n) + K_5\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + K_3, e(x_{i+1}, t^n) + K_4, c_r(x_{i+1}, t^n) + K_6\right). \quad (2.450)$$

Les termes K_1 , K_2 , K_3 et K_4 sont toujours définis par (2.258), (2.259), (2.260) et (2.261), et les deux termes supplémentaires suivants sont définis par :

$$K_5 = -\frac{\Delta t}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r(x_{i+2}) - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r(x_i) \right), \quad (2.451)$$

et

$$K_6 = c_r(x_i, t^n) - c_r(x_{i+1}, t^n) - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r(x_{i+1}) - \rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r(x_{i-1}) \right). \quad (2.452)$$

Le d.l. de G à l'ordre 1 s'écrit (comme f est une fonction de 3 variables (2.407)) :

$$G = (K_1 - K_3) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + (K_2 - K_4) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + (K_5 - K_6) \partial_3 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + \sum_i O(K_i^2). \quad (2.453)$$

Comme les termes de pression de $K_1 - K_3$ et $K_2 - K_4$ sont des termes d'ordre 2, ils n'interviennent pas ici et on avait obtenu qu'à l'ordre 1 [équations (2.271) et (2.273)] :

$$K_1 - K_3 = \Delta x \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} + O(\Delta t) + O(\Delta x), \quad (2.454)$$

$$K_2 - K_4 = \Delta x \frac{\partial e}{\partial x} + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.455)$$

Il vient immédiatement :

$$K_5 - K_6 = \Delta x \frac{\partial c_r}{\partial x} + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.456)$$

D'où le d.l. de G à l'ordre 1 (grâce à (2.419)) :

$$G = \Delta x \partial_x p + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.457)$$

Comme H est encore la même quantité que G , mais décalée d'un pas d'espace, le terme d'ordre 1 en $\Delta x \partial_x p$ de G devient dans $G - H$ un terme en $O((\Delta x)^2)$, et ainsi :

$$-\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} = O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.458)$$

Le reste du membre de droite reste inchangé (2.449), et on avait obtenu (2.325) à l'ordre 1 que :

$$MbresDroiteRho = \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.459)$$

Par (2.448), on a la différence de termes :

$$-J + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n), c_r(x_i, t^n)\right) = O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.460)$$

Ainsi, la partie en $-p_i^{n+1/2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2})$ du membre de droite de (2.420) vaut :

$$\begin{aligned} & -\left(J - f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n), c_r(x_i, t^n)\right)\right) MbresDroiteRho \\ & - f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n), c_r(x_i, t^n)\right) MbresDroiteRho \\ & = -\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.461)$$

Finalement, le d.l. du membre de droite de l'équation en énergie (2.420) à l'ordre 1 s'écrit grâce à (2.432), (2.433), (2.443) et (2.461) :

$$\begin{aligned} MbresDroiteEner(x_i) & := -\frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_i) \partial_x \left(\rho e_r \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right) - \frac{1}{\rho}(x_i) \partial_x \left(\frac{\rho}{\rho_r} \frac{1-c_r^2}{4} u_r \right) \\ & + \frac{F_D}{\rho} \cdot u_r + O(\Delta t) + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.462)$$

Il nous reste maintenant à obtenir le développement limité du membre de gauche de (2.420) à l'ordre 1. On reprend ce qu'on avait fait pour la conservation de la masse du schéma BBC-HEM (sous-section 2.4.1) dans la phase A_1 . L'équation du maillage est toujours définie par (2.249) et en s'arrêtant à l'ordre 2 cette fois-ci, on a comme pour la relation (2.250) :

$$e(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - e(x_i^n, t^n) = k \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) + h \frac{\partial^2 e}{\partial t^2}(x_i, t^n) + O(|h|^2) + O(|k|^2), \quad (2.463)$$

avec toujours h et k définis par (2.251). La seule différence est que les termes en pression de k (2.251) dépendent dorénavant aussi de la concentration relative. L'objectif est d'obtenir un développement de la quantité $\frac{k}{h}$ à l'ordre 1, donc le développement de k à l'ordre 2. On a déjà obtenu le développement de G , la fonction qui représente la quantité $p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}$ prise aux points x_i pour le membre de droite (2.457) (c'est un terme à l'ordre 1). Comme dans k , le terme G apparaît sous la forme $-\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \frac{G}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})}$, ce terme (ainsi que le terme similaire en H) sont des termes d'ordre 2 et n'apparaissent pas dans le d.l. à l'ordre 2. On a immédiatement en reprenant le résultat obtenu pour la conservation de la masse et en s'arrêtant à l'ordre 1 (2.251) :

$$k = \Delta t u(x_i, t^n), \quad (2.464)$$

si bien qu'en retournant à (2.463), il vient :

$$\frac{e(x_{i+1}, t^{n+1}) - e(x_i, t^n)}{h} = u(x_i, t^n) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) + \frac{\partial e}{\partial t}(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.465)$$

Ceci entraîne la consistance de l'équation relative à l'énergie en faisant la différence entre (2.465) et (2.462) et en utilisant (2.231).

2.4.3.2 Consistance de l'équation d'impulsion

On vérifie que l'équation de l'impulsion du schéma BBC modifié définie par (2.222) ainsi que (2.214), et la loi de pression donnée maintenant par

$$p_i^{n+1/2} = f\left(\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}\right) \quad (2.466)$$

à la place de (2.212) (avec les quantités $\frac{1}{\rho_i^{n+1/2}}, e_i^{n+1/2}, c_{r_i}^{n+1/2}$ définies par (2.209), (2.210) et (2.211)), est bien consistante avec l'équation continue du système HEM (2.230). En réécrivant cette équation discrétisée en une seule étape, on a :

$$\begin{aligned} \frac{u_{i-1/2}^{n+1} - u_{i-1/2}^n}{\Delta t} &= -\frac{2}{\Delta x} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\ &\quad - \frac{2}{\Delta x} \frac{\left(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2\right)_i^{n+1/2} - \left(\rho^{\frac{1-c_r^2}{4}} u_r^2\right)_{i-1}^{n+1/2}}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}. \end{aligned} \quad (2.467)$$

On commence par traiter le membre de gauche de l'équation d'impulsion (2.467) : on veut obtenir le développement limité à l'ordre 1 de la quantité suivante :

$$\frac{u_{i-1/2}^{n+1} - u_{i-1/2}^n}{\Delta t}, \quad (2.468)$$

prise aux points x_i . L'équation du maillage [définie aux cloisons (2.110)] fait intervenir la différence $p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}$, cette quantité prise aux points x_i correspond à la fonction G (2.450) mais décalée d'un pas en espace, et que l'on va noter H :

$$H := G(x - \Delta x). \quad (2.469)$$

L'équation du maillage prise aux cloisons $x_{i-1/2}$ s'écrit toujours (2.112) :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}. \quad (2.470)$$

La formule de Taylor donne (comme pour le schéma BBC classique (2.113) mais en s'arrêtant à l'ordre 2 cette fois-ci) :

$$\begin{aligned} u(x_{i-1/2}^{n+1}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n) &= k \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\partial u}{\partial t}(x_{i-1/2}, t^n) \\ &\quad + O(|h|^2) + O(|k|^2) + O(|hk|), \end{aligned} \quad (2.471)$$

avec k défini par (2.114) et $h = \Delta t$:

$$k = \Delta t u(x_{i-1/2}, t^n) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}. \quad (2.472)$$

Comme on veut un développement à l'ordre 1 de la quantité (2.467) prise aux points x_i , on veut obtenir un d.l. de $\frac{k}{h}$ à l'ordre 1 et donc de k à l'ordre 2. Comme dans la section précédente, on avait obtenu le développement limité de G au point x_{i+1} , à l'ordre 2 en espace et en temps (2.457), et comme $\partial_x p(x_{i+1}) = \partial_x p(x_{i-1/2}) + O(\Delta x)$, on obtient immédiatement le développement limité de H à l'ordre 2 en espace et en temps :

$$H = \Delta x \partial_x p(x_{i-1/2}) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) + O(\Delta t \Delta x). \quad (2.473)$$

On voit ainsi immédiatement que H est un terme d'ordre 1 et donc :

$$\frac{k}{h} = u(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x), \quad (2.474)$$

$$\text{et } O(|h|^2) + O(|k|^2) + O(|hk|) = O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.475)$$

En revenant à (2.471), le développement limité du membre de gauche de l'équation d'impulsion à l'ordre 1 est :

$$\frac{u(x_{i-1/2}^{n+1}, t^{n+1}) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta t} = u(x_{i-1/2}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-1/2}, t^n) + \frac{\partial u}{\partial t}(x_{i-1/2}, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.476)$$

On passe maintenant au membre de droite de l'équation d'impulsion : la partie droite de l'équation (2.467) prise aux points x_i s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{MbresDroiteVitMod}(x_{i-1/2}) &:= - \frac{2H}{\Delta x (\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} \\ &- \frac{2}{\Delta x (\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} \left(\text{RhoDemi}^{1-\frac{CrDemi^2}{4}} \text{UrDemi}^2(x_i) \right. \\ &\quad \left. - \text{RhoDemi}^{1-\frac{CrDemi^2}{4}} \text{UrDemi}^2(x_{i-1}) \right), \end{aligned} \quad (2.477)$$

et on veut obtenir son développement à l'ordre 1. Comme on a déjà le développement de H à l'ordre 2 (2.473), le premier terme de (2.477) a pour développement (comme $\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n) = 2\rho(x_{i-1/2}, t^n) + O((\Delta x)^2)$) :

$$- \frac{2H}{\Delta x (\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n))} = - \frac{1}{\rho(x_{i-1/2})} \partial_x p(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.478)$$

Enfin pour le terme dépendant des quantités relatives, on a déjà obtenu les termes à l'ordre 0 du produit $\text{RhoDemi}^{1-\frac{CrDemi^2}{4}} \text{UrDemi}^2$ (2.425) et il n'est

pas nécessaire d'exprimer les termes à l'ordre 1. Finalement, le développement limité à l'ordre 1 du membre de droite de l'équation d'impulsion s'écrit :

$$\begin{aligned} MbreDroiteVitMod(x_{i-1/2}) &= -\frac{1}{\rho(x_{i-1/2})} \partial_x p(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho(x_{i-1/2})} \partial_x \left(\rho \frac{1-c_r^2}{4} u_r^2 \right) \\ &+ O(\Delta t) + O(\Delta x). \end{aligned} \quad (2.479)$$

En faisant la différence entre (2.476) et (2.479), et grâce à (2.230), on obtient la consistance de l'équation d'impulsion.

Dans les deux sous-sections consacrées à l'étude d'ordre de l'équation sur ρ et sur c_r (sous-sections 2.4.1 et 2.4.2), on avait obtenu au moins l'ordre 1 pour ces équations mais sous l'hypothèse que la pression ne dépendait pas de c_r . Dans la suite, on va vérifier que ces deux équations restent bien consistantes avec les équations du modèle HEM en considérant que la loi de pression dépend cette fois-ci aussi de c_r (2.407).

2.4.3.3 Consistance de l'équation de la masse

La densité du mélange étant comme l'énergie définie au centre des mailles, si on reprend l'étude du schéma associé à la discrétisation de l'équation de la masse (2.238), le développement limité du membre de gauche de cette équation est le même que celui obtenu pour l'équation d'énergie (2.465), hormis que les dérivées portent sur la variable $\frac{1}{\rho}$ au lieu de l'énergie.

$$\frac{\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i, t^n)}{h} = u(x_i, t^n) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.480)$$

Enfin, le membre de droite de l'équation de la masse a déjà été obtenu pour la consistance de l'équation en énergie (2.449) et a donné le développement limité suivant (2.459) :

$$MbreDroiteRho = \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.481)$$

Ainsi en faisant la différence des deux équations, et comme $\frac{1}{\rho}$ vérifie l'équation (2.228), on obtient immédiatement la consistance du schéma pour cette équation.

2.4.3.4 Consistance de l'équation de concentration relative c_r

Le schéma BBC-HEM pour l'équation de la concentration relative s'écrit (2.330) :

$$\frac{c_{r_i}^{n+1} - c_{r_i}^n}{\Delta t} = -\frac{\left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i+1}^{n+1/2} - \left(\rho \frac{1-c_r^2}{2} u_r \right)_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta m_i}. \quad (2.482)$$

La concentration relative c_r étant définie elle aussi au centre de la maille, le développement limité à l'ordre 1 du membre de gauche vient lui aussi immédiatement de celui de l'énergie (2.465) en remplaçant les dérivées de e par des dérivées de c_r :

$$\frac{c_r(x_{i+1}, t^{n+1}) - c_r(x_i, t^n)}{h} = u(x_i, t^n) \frac{\partial c_r}{\partial x}(x_i) + \frac{\partial c_r}{\partial t}(x_i, t^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.483)$$

Pour le membre de droite définis pas (2.343) (avec les termes de pression intervenant dans les quantités $RhoDemi$, $CrDemi$ ainsi que $UrDemi$ qui dépendent aussi de la concentration relative c_r), on a déjà obtenu le développement limité de toutes ces quantités à l'ordre 1 dans le paragraphe consacré à l'énergie interne (§2.4.3.1) (2.421), (2.423) et (2.424). Dans (2.482), on voit que les termes d'ordre 1 de $RhoDemi$, $CrDemi$ ainsi que $UrDemi$ n'interviendront pas dans le développement limité à l'ordre 1 car ils deviendront des termes d'ordre 2 via l'apparition de la dérivée. Ainsi d'après (2.421), (2.423) et (2.424), le développement limité du membre de droite de l'équation sur c_r est :

$$-\frac{1}{\rho} \partial_x \left(\rho \frac{1 - c_r^2}{2} u_r \right) + O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (2.484)$$

Ainsi en faisant la différence de (2.483) avec ce dernier terme, on obtient (comme c_r vérifie l'équation (2.229)) que le schéma est bien consistant avec l'équation sur la concentration relative. Finalement, on peut voir que :

Théorème 2.4.11 *Le schéma BBC-HEM (2.208)-(2.224) est consistant (d'ordre 1) pour le jeu d'équations HEM (2.228)-(2.236) (en supposant que la fermeture de la vitesse relative s'écrit $u_r = \lambda \partial_x p$ où λ est une constante, au lieu de (1.123)).*

Conclusion 2.4.1 *La phase de projection du code d'étude du CEA n'est en réalité pas à l'ordre 2 en dimension 2 (communications de Florian de Vuyst)¹. Obtenir l'ordre 2 pour la discrétisation de la phase lagrangienne du schéma BBC-HEM n'était donc pas prioritaire pour la validation du modèle.*

Il serait cependant possible d'obtenir cet ordre : en effet, la montée en ordre du schéma BBC classique se produit car dans les quatre équations du mélange classique (2.30)-(2.33), le membre de droite a sa dérivée spatiale qui dépend uniquement de la vitesse u pour laquelle on dispose d'une valeur intermédiaire (à $n + 1/4$) supplémentaire :

$$D_t \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_x u, \quad (2.485)$$

$$D_t c_r = 0, \quad (2.486)$$

$$D_t u = -\frac{1}{\rho} \partial_x (p), \quad (2.487)$$

$$D_t e = -\frac{(p)}{\rho} \partial_x u. \quad (2.488)$$

1. cela provient du fait que les vitesses selon x et y sont projetées toutes les deux après la phase lagrangienne du schéma alors qu'il faudrait alterner pour chaque direction une résolution lagrangienne suivie immédiatement de la projection avant de s'occuper de l'autre direction

Une manière d'obtenir l'ordre 2 pour le schéma BBC-modifié serait d'ajouter au schéma BBC-modifié des étapes supplémentaires (dans la phase de prédiction à $n+1/4$) qui consisterait à rajouter la prédiction à $n+1/4$ de toutes les variables apparaissant dans les dérivées spatiales des équations du modèle HEM (2.34) - (2.38), à savoir ρ , c_r ainsi que e (l'énergie e est nécessaire afin de pouvoir obtenir e_r et $\frac{1}{\rho_r}$ aussi à $n + 1/4$ via la résolution du système pour obtenir la pression). L'ajout de ces trois étapes au schéma BBC-modifié devrait pouvoir permettre d'obtenir la montée en ordre.

Analyse mathématique du modèle HEM

L'objectif de ce chapitre est d'étudier au niveau théorique le modèle HEM.

La première section de ce chapitre (section 3.1) va utiliser des formules simplifiées de la formule de prédiction de la vitesse relative (1.123). La présence de u_r dans l'équation de vitesse moyenne du modèle HEM (1.121) introduit de la diffusion dans le système du fait de la dépendance en ∇p de la formule sur u_r (1.123). Dans la première sous-section 3.1.1, on va considérer que la vitesse relative u_r est constante, ce qui revient à négliger la partie diffusive du schéma et on peut, dans ce cadre là, étudier le caractère hyperbolique du système. La seconde sous-section (sous-section 3.1.2) va utiliser une forme simplifiée de l'équation sur la vitesse relative (1.123) dépendant du gradient de pression et on va étudier un système linéarisé autour d'un état constant. Pour faire ces différentes études, on va se placer dans le cadre où les équations d'état de la pression sont barotropes (i.e. la loi de pression ne dépend que de la densité moyenne), ce qui permet de ne pas prendre en compte l'équation en énergie du modèle HEM (1.122) et ainsi de simplifier les calculs. On se place dans la section 3.1 en dimension 1.

Enfin, la seconde partie de ce chapitre consiste quant à elle (section 3.2) à montrer que lorsque u_r tend vers 0, le modèle HEM dégénère vers le modèle de mélange classique via un procédé d'adimensionnement des équations (sans restriction sur la dimension étudiée).

3.1 Analyse du modèle HEM

3.1.1 Etude en 1D de l'hyperbolicité du système dans le cas simplifié où $u_r = \text{cste} = K$

On se place dans le cadre d'un gaz barotrope, i.e. la pression est fonction seulement de la densité moyenne ρ :

$$p = f(\rho). \quad (3.1)$$

On va étudier un cadre très simplifié, dans lequel on suppose que la vitesse relative est une constante :

$$u_r = \text{cste} = K. \quad (3.2)$$

Le modèle HEM (1.119)-(1.123) devient alors simplement :

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \quad (3.3)$$

$$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho(u^2 + \frac{1-c_r^2}{4}K^2)) + \partial_x p = 0, \quad (3.4)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \partial_x(\rho(c_r u + \frac{1-c_r^2}{2}K)) = 0. \quad (3.5)$$

Du fait de la loi de pression (3.1) indépendante de l'énergie interne e , il suffit en effet de considérer les 3 premières équations du modèle. Comme la vitesse relative est supposée constante ici (3.2), il n'y a pas de termes du second ordre et on va étudier le caractère hyperbolique du modèle simplifié : (3.3)-(3.5), complété de la relation (3.1) ainsi que (3.2).

On choisit comme variables d'étude de l'hyperbolicité le triplet :

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho c_r \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \rho \\ q \\ b \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

On réécrit les trois équations du système précédant (3.3)-(3.5) en fonction des dérivées premières des composantes du vecteur U (3.6) : le système (3.3)-(3.5) avec (3.1) se réécrit sous la forme :

$$\partial_t U + A \partial_x U = 0, \quad (3.7)$$

avec la matrice A donnée par :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{(\rho u)^2}{\rho^2} + \frac{K^2}{4} + f'(\rho) + \frac{K^2(\rho c_r)^2}{4\rho^2} & \frac{2\rho u}{\rho} & \frac{-K^2 \rho c_r}{2\rho} \\ \frac{-\rho c_r \rho u}{\rho^2} + \frac{K \rho^2 c_r^2}{2\rho^2} + \frac{K}{2} & \frac{\rho c_r}{\rho} & \frac{\rho u}{\rho} - \frac{K \rho c_r}{\rho} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Le polynôme caractéristique de cette matrice est :

$$\begin{aligned} P &= \lambda^3 + \underbrace{\left(\frac{Kb}{\rho} - \frac{3q}{\rho}\right)}_{:=a_2} \lambda^2 \\ &+ \underbrace{\left(3\left(\frac{q}{\rho}\right)^2 - \frac{2qKb}{\rho^2} + \frac{K^2 b^2}{4\rho^2} - \frac{K^2}{4} - f'(\rho)\right)}_{:=a_1} \lambda \\ &- \underbrace{\left(\frac{q^3}{\rho^3} + \frac{K^2 b^2 q}{4\rho^3} - f'(\rho)\left(\frac{q}{\rho} - \frac{Kb}{\rho}\right) - \frac{Kbq^2}{\rho^3} - \frac{K^2 q}{4\rho}\right)}_{:=a_0}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Afin d'étudier si les racines de ce polynôme de degré 3 sont réelles ou non, on va utiliser la méthode de Cardan [AF87]. La première étape consiste à transformer le polynôme P (dépendant de la variable λ), en un polynôme sans termes du

second degré $P2$ via le changement de variables suivant : $\lambda = Z - \frac{a_2}{3a_3}$, qui conduit au polynôme dépendant de Z :

$$P2 := Z^3 + dZ + e, \quad (3.10)$$

avec :

$$d = -\frac{1}{3}a_2^2 + a_1, \quad (3.11)$$

$$e = \frac{2}{27}a_2^3 - \frac{a_1a_2}{3} + a_0, \quad (3.12)$$

où les a_i sont les coefficients de degré i du polynôme P (3.9). Le discriminant de ce polynôme de degré 3 est :

$$\begin{aligned} \Delta_{cardan} &:= 4d^3 + 27e^2 \\ &= -\frac{b^4K^6}{16\rho^4} + \frac{b^4K^4f'(\rho)}{4\rho^4} + \frac{b^2K^6}{8\rho^2} - \frac{7b^2K^4f'(\rho)}{2\rho^2} \\ &\quad + \frac{11b^2K^2f'(\rho)^2}{\rho^2} - \frac{K^6}{16} - \frac{3K^4f'(\rho)}{4} - 3K^2(f'(\rho))^2 - 4(f'(\rho))^3, \end{aligned} \quad (3.13)$$

et on le réécrit en remplaçant b et q par leur valeur (3.6). Le discriminant devient une fonction de K , ρ , c_r :

$$\begin{aligned} D(K, \rho, c_r) &= -\frac{K^6c_r^4}{16} + f'(\rho)\frac{K^4c_r^4}{4} \\ &\quad + \frac{K^6c_r^2}{8} - \frac{7}{2}f'(\rho)K^4c_r^2 + 11(f'(\rho))^2K^2c_r^2 \\ &\quad - \frac{K^6}{16} - \frac{3}{4}f'(\rho)K^4 - 3(f'(\rho))^2K^2 - 4(f'(\rho))^3. \end{aligned} \quad (3.14)$$

D'après les formules de Cardan [AF87], la condition pour que le polynôme n'ait que des racines réelles est que $D(K, \rho, c_r) \leq 0$, condition nécessaire pour que le système (3.7) soit hyperbolique.

Remarque 3.1.1 *Si on considère le cas où la vitesse relative est nulle : $u_r = 0$, le système (3.3)-(3.5) s'écrit :*

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix} + A_0 \partial_x \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix} = 0, \quad (3.15)$$

où

$$A_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -u^2 + f'(\rho) & 2u \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

et la condition pour que le système soit hyperbolique vient immédiatement :

$$f'(\rho) > 0. \quad (3.17)$$

La suite de cette section va permettre de démontrer le résultat suivant :

Théorème 3.1.2 $\forall K, \forall \rho > 0, \forall -1 \leq c_r \leq 1$, si $f'(\rho) > 0$ la matrice A n'a que des valeurs propres réelles et le système (3.7) est hyperbolique.

Preuve du Théorème 3.1.2 : La démonstration de ce théorème va se faire en regroupant les termes de (3.14), et en les majorant à l'aide des conditions de valeurs prises par la concentration relative c_r (1.41) et de la condition sur la pression provenant du cas où $u_r = 0$ (3.17) (cas particulier du cas $u_r = K$) :

$$-1 \leq c_r \leq 1, \quad (3.18)$$

$$f'(\rho) > 0. \quad (3.19)$$

Pour démontrer le Théorème 3.1.2, on va construire une suite $(\theta_n)_{\geq 0}$ croissante, avec

$$\theta_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 1$$

telle que $\forall f'(\rho) > 0, \forall K, \forall c_r^2 \in [\theta_{n-1}, \theta_n]$ ($n \geq 1$), on ait le discriminant (3.14) négatif (si bien que la matrice A (3.8) sera à valeurs propres réelles sur ce domaine). De plus $\forall c_r^2 \in [0, \theta_0]$, la propriété reste vraie.

1 On commence par définir la valeur θ_0 de la suite en regroupant les termes du polynôme de trois variables (3.14) par paquets :

– on commence par les termes en K^6

$$A1 := -\frac{K^6}{16}(c_r^4 - 2c_r^2 + 1) = -\frac{K^6}{16}(c_r^2 - 1)^2. \quad (3.20)$$

Ce groupement de termes est donc toujours négatif.

– Ensuite, grâce aux deux conditions (3.18)-(3.19), on a l'inégalité suivante : $f'(\rho)K^4c_r^4 \leq f'(\rho)K^4c_r^2$, ce qui permet de majorer :

$$\frac{f'(\rho)K^4c_r^4}{4} \leq \frac{7}{2}f'(\rho)K^4c_r^2, \quad (3.21)$$

et on a un deuxième groupement de termes négatifs :

$$B := \frac{f'(\rho)K^4c_r^4}{4} - \frac{7}{2}f'(\rho)K^4c_r^2 \leq 0. \quad (3.22)$$

– Il reste encore à comparer une dernière série de termes :

$$\begin{aligned} C &:= 11(f'(\rho))^2K^2c_r^2 - \frac{3}{4}f'(\rho)K^4 - 3(f'(\rho))^2K^2 - 4(f'(\rho))^3 \\ &= f'(\rho)\left(-\frac{3}{4}K^4 - 4(f'(\rho))^2 + f'(\rho)K^2(11c_r^2 - 3)\right). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Comme $D(K, \rho, c_r) = A1 + B + C$, on voit que si $11c_r^2 - 3 \leq 0$, grâce à la condition (3.19) le troisième terme est aussi négatif. On a ainsi obtenu une première condition suffisante pour que A n'ait que des racines réelles :

Si $f'(\rho) > 0$ et $-\sqrt{\frac{3}{11}} \leq c_r \leq \sqrt{\frac{3}{11}}$, alors $\forall K, \forall \rho > 0$,
le discriminant (3.14) est négatif et A n'a que des valeurs propres réelles.

On obtient ainsi la première valeur de la suite $(\theta_n)_{n \geq 0}$:

$$\theta_0 = \frac{3}{11}. \quad (3.24)$$

2 On va ici définir le deuxième terme de la suite $(\theta_n)_{n \geq 0}$: pour ce faire, on va majorer plus finement les deux derniers paquets de termes B (3.22) et C (3.23) en se plaçant sur l'intervalle $c_r^2 \geq \theta_0 = \frac{3}{11}$. On considère la fonction :

$$k(x) = x\left(\frac{x}{4} - \frac{7}{2}\right), \quad (3.25)$$

sur l'intervalle $[\frac{3}{11}, 1]$. Elle atteint son maximum en $\frac{3}{11}$ car elle est décroissante sur $[0, 1]$. Donc, on obtient la majoration plus fine pour le deuxième groupement de termes (3.22) :

$$B = f'(\rho)K^4 c_r^2 \left(\frac{c_r^2}{4} - \frac{7}{2}\right) \leq -\frac{453}{484} f'(\rho)K^4. \quad (3.26)$$

Ainsi, en majorant ensemble le deuxième et le troisième groupement de terme (3.22)-(3.23), on obtient :

$$\begin{aligned} B + C &= \\ f'(\rho)K^4 c_r^2 \left(\frac{c_r^2}{4} - \frac{7}{2}\right) + 11(f'(\rho))^2 K^2 c_r^2 - \frac{3}{4} f'(\rho)K^4 - 3(f'(\rho))^2 K^2 - 4(f'(\rho))^3 \\ &\leq -\frac{204}{121} f'(\rho)K^4 + 11(f'(\rho))^2 K^2 c_r^2 - 3(f'(\rho))^2 K^2 - 4(f'(\rho))^3. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Pour avoir le discriminant (3.14) négatif, il suffit donc d'avoir

$$f'(\rho) \left(-\frac{204}{121} K^4 - 4(f'(\rho))^2 + f'(\rho)K^2(11c_r^2 - 3)\right) \leq 0, \quad (3.28)$$

et comme $f'(\rho) \geq 0$ (3.19), il suffit d'avoir :

$$(f'(\rho))^2 - \frac{K^2(11c_r^2 - 3)}{4} f'(\rho) + \frac{51}{121} K^4 \geq 0. \quad (3.29)$$

Cette condition est vérifiée si le discriminant (3.30) associé à cette inégalité du second degré en $f'(\rho)$ reste négatif; ce discriminant s'écrit :

$$\Delta = K^4 \underbrace{\left(\frac{121}{16} c_r^4 - \frac{33}{8} c_r^2 - \frac{2175}{1936}\right)}_{:=Q(c_r^2)}. \quad (3.30)$$

On obtient les racines du polynôme Q en c_r^2 : $c_{r_1}^2 = \frac{3}{11} - \frac{8\sqrt{51}}{121} \leq 0$ et $c_{r_2}^2 = \frac{3}{11} + \frac{8\sqrt{51}}{121} \geq \frac{3}{11}$. On prend la racine supérieure à $\frac{3}{11}$, $c_{r_2}^2$. Si $\frac{3}{11} \leq c_r^2 \leq \frac{3}{11} + \frac{8\sqrt{51}}{121}$, alors Q est négatif et (3.28) est vérifié, i.e. le discriminant (3.14) est négatif :

Si $f'(\rho) > 0$, $K \geq 0$ et si $\underbrace{\frac{3}{11}}_{\theta_0} \leq c_r^2 \leq \underbrace{\frac{3}{11} + \frac{8\sqrt{51}}{121}}_{\theta_1}$, alors la matrice A (3.8) n'a que des valeurs propres réelles.

La seconde valeur de la suite vaut :

$$\theta_1 := \frac{3}{11} + \frac{8\sqrt{51}}{121}. \quad (3.31)$$

3 Soit $n \in \mathbb{N}$. On suppose que l'on a construit les n premières valeurs de la suite croissante : $\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_{n-1}$, avec les $(\theta_i)_{i=1, \dots, n-1} \in [0, 1]$. On considère l'intervalle $c_r^2 \geq \theta_{n-1}$.

Sur cet intervalle, on peut majorer le deuxième groupement de termes (3.22) de la manière suivante :

$$B = f'(\rho)K^4 c_r^2 \left(\frac{c_r^2}{4} - \frac{7}{2} \right) \leq f'(\rho)K^4 k(\theta_{n-1}), \quad (3.32)$$

car k atteint son maximum en θ_{n-1} sur l'intervalle $[\theta_{n-1}, 1]$, $\theta_{n-1} > 0$. En majorant le deuxième et le troisième groupement de terme ensemble, il vient :

$$\begin{aligned} B + C &= \\ f'(\rho)K^4 c_r^2 \left(\frac{c_r^2}{4} - \frac{7}{2} \right) + 11(f'(\rho))^2 K^2 c_r^2 - \frac{3}{4} f'(\rho)K^4 - 3(f'(\rho))^2 K^2 - 4(f'(\rho))^3 \\ &\leq K^2(11c_r^2 - 3)(f'(\rho))^2 - 4(f'(\rho))^3 + K^4(k(\theta_{n-1}) - \frac{3}{4})f'(\rho). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Comme $f'(\rho) > 0$ (3.19), on obtient comme condition suffisante pour avoir toutes les valeurs propres de la matrice A (3.8) réelles :

$$f'(\rho)^2 - \frac{K^2(11c_r^2 - 3)}{4} f'(\rho) - \frac{K^4}{4}(k(\theta_{n-1}) - \frac{3}{4}) \geq 0. \quad (3.34)$$

On veut montrer que le discriminant (3.35) de ce polynôme reste négatif afin d'avoir l'inégalité (3.34) vérifiée. On pose :

$$\Delta_1(K, c_r^2, \theta_{n-1}) = K^4 \underbrace{\left(\frac{121}{16} c_r^4 - \frac{33}{8} c_r^2 + \left(-\frac{3}{16} + k(\theta_{n-1}) \right) \right)}_{:=Q(c_r^2, \theta_{n-1})}. \quad (3.35)$$

Le discriminant de Q est :

$$\Delta_2(\theta_{n-1}) = \left(\frac{33}{8} \right)^2 - \frac{121}{4} \left(-\frac{3}{16} + k(\theta_{n-1}) \right). \quad (3.36)$$

Si $\Delta_2(\theta_{n-1}) \geq 0$, les racines du polynôme Q sont : $h(\theta_{n-1})$ et $g(\theta_{n-1})$, où les fonctions h et g sont définies par :

$$g(x) := \frac{3}{11} + \frac{2}{121} \sqrt{363 - 484k(x)}, \quad (3.37)$$

et

$$h(x) := \frac{3}{11} - \frac{2}{121} \sqrt{363 - 484k(x)}. \quad (3.38)$$

Lemme 3.1.3 *La suite définie par :*

$$\begin{aligned}\theta_n &:= g(\theta_{n-1}), \quad n \geq 1, \\ \theta_0 &:= \frac{3}{11},\end{aligned}\tag{3.39}$$

(avec les fonctions k , g et h définies par (3.25), (3.37) et (3.38)) est telle que $\theta_n \in [0, 1]$, $\forall n \geq 1$. De plus, la suite $(\theta_n)_{n \geq 0}$ est croissante et converge vers 1 et $\forall n \geq 1$, $h(\theta_{n-1}) \leq \theta_{n-1} \leq g(\theta_{n-1})$.

On aura ainsi $\forall n \in \mathbb{N} : \Delta_1(K, c_r^2, \theta_{n-1}) \leq 0$, sur l'intervalle $[\theta_{n-1}, g(\theta_{n-1})]$, si bien qu'en faisant tendre $n \rightarrow +\infty$, la condition (3.34) assurant que $D(K, \rho, c_r) \leq 0$ sera vérifiée $\forall K$, $\forall f'(\rho) > 0$ et $\forall -1 < c_r < 1$. Enfin la matrice A (3.8) aura toutes ses valeurs propres réelles dans ce domaine.

Preuve du Lemme 3.1.3 :

Pour ce faire, on étudie la fonction g (3.37) sur l'intervalle $[0, 1]$: sur cet intervalle, le terme sous la racine $(363 - 484k(x))$ est toujours positif donc g est bien définie. La fonction g est croissante et continue ; $g(0) = \frac{3}{11} + \frac{2}{121}\sqrt{363} \approx 0,5876$ et $g(1) = 1$ donc $g([0, 1]) \subset [0, 1]$. On a bien ainsi comme $\theta_0 \in [0, 1]$, que : $\theta_n \in [0, 1] \forall n \geq 1$. Comme g est croissante, $(\theta_n)_{n \geq 1}$ est monotone. De plus, d'après (3.24) et (3.31) :

$$\theta_1 - \theta_0 = \frac{8}{121}\sqrt{51} \geq 0,\tag{3.40}$$

donc $(\theta_n)_{n \geq 0}$ est croissante et bornée par 1 donc convergente. On cherche les points fixes de g , on obtient comme seul point fixe 1, donc la suite (3.39) converge vers 1 : $(\theta_n)_{n \geq 1} \rightarrow 1$.

On s'intéresse maintenant à la fonction h (3.38) : h est décroissante et $h(0) = \frac{3}{11} - \frac{2}{121}\sqrt{363} \approx -0,004$ donc on a bien

$$h(\theta_{n-1}) \leq 0 \leq \theta_{n-1} \quad \forall n,\tag{3.41}$$

ce qui termine la preuve du Lemme 3.1.3.

De plus, le discriminant est négatif pour $c_r^2 = 1$: en effet,

$$D(K, \rho, \pm 1) = -4f'(\rho)K^4 + 8f'(\rho)^2K^2 - 4(f'(\rho))^3\tag{3.42}$$

$$= -4f'(\rho)(K^2 - f'(\rho))^2 \leq 0.\tag{3.43}$$

On a donc finalement démontré le Théorème 3.1.2.

Enfin, pour que le système (3.3)-(3.5) soit strictement hyperbolique, il faut et il suffit que la matrice A (3.8) soit diagonalisable à valeurs propres réelles. D'après les formules de Cardan, si $D < 0$, la matrice A n'a que des valeurs propres réelles distinctes et le système (3.3)-(3.5) est alors strictement hyperbolique.

D'après la démonstration précédente, si on a le premier groupement de termes $A1 = -\frac{K^6}{16}(c_r^2 - 1)^2 < 0$, alors $D < 0$ et le système est strictement hyperbolique. Sinon, on a $K = 0$ ou $c_r^2 = 1$ et on a trois possibilités :

- • Si $K = 0$, alors $D(0, \rho, c_r) = -4(f'(\rho))^3 < 0$ d'après la condition d'hyperbolicité du cas $u_r = 0$ (3.19).
- • Si $c_r^2 = 1$, $D(K, \rho, \pm 1) = -4f'(\rho)(K^2 - f'(\rho))^2$ donc si

$$c_r^2 = 1 \text{ et } K^2 = f'(\rho)$$

alors le discriminant D est nul. Dans ce cas, on a $d = -\frac{4}{3}f'(\rho) \neq 0$ et si $c_r = 1$ alors $e = -\frac{16}{27}f'(\rho)\sqrt{f'(\rho)} \neq 0$ (et si $c_r = -1$ alors $e = \frac{16}{27}f'(\rho)\sqrt{f'(\rho)} \neq 0$). (On rappelle que d et e sont les coefficients du polynôme $P2$: cf. (3.10)). Comme $d \neq 0$, par la méthode de Cardan, on sait qu'on a une racine simple et une racine double.

- Si $c_r = 1$, la racine double de $P2$ (3.10) est : $z1 = -\frac{3e}{2d} = -\frac{2}{3}\sqrt{f'(\rho)}$ donc en repassant aux variables originales, on a la racine double : $\lambda_1 = -\sqrt{f'(\rho)} + u$ et $\dim(\text{Ker}(A - \lambda_1 I)) = 1$ donc la matrice A n'est pas diagonalisable et le système n'est pas strictement hyperbolique.
- Si $c_r = -1$ et $K^2 = f'(\rho)$, on obtient pour la racine double :

$$\lambda_{-1} = \sqrt{f'(\rho)} + u$$

et la dimension du noyau est aussi 1 donc le système n'est pas non plus strictement hyperbolique.

Remarque 3.1.4 *Cependant, le cas $c_r^2 = 1$ correspond au cas où il n'y a que du fluide lourd ou que du fluide léger ($c^\pm = 1$) et dans ce cadre là, la vitesse relative est nulle donc $K = 0$. Or d'après la condition (3.19) nécessairement, si $c_r^2 = 1$, $0 = K^2 \neq f'(\rho) > 0$. Tous les cas d'intérêt pour notre problème conduisent donc à un système strictement hyperbolique.*

On a donc démontré une condition nécessaire et suffisante de stricte hyperbolicité du système (3.3)-(3.5) :

Le système (3.3)-(3.5) complété de l'équation d'état barotrope (3.1) est strictement hyperbolique lorsque la vitesse relative u_r est constante ($u_r = K$), $\forall K, \forall \rho > 0, \forall -1 < c_r < 1$, sous la condition $f'(\rho) > 0$ (3.19).

Remarque 3.1.5 *La condition (3.19) est déjà la condition d'hyperbolicité des équations d'Euler classiques (i.e. avec une vitesse relative nulle) pour un gaz barotrope (3.1).*

Remarque 3.1.6 - *Valeurs propres du système HEM lorsque la vitesse relative $u_r = K$ et $p = f(\rho)$:*

L'étude d'hyperbolicité des équations du modèle HEM faite dans cette section dans le cadre où la vitesse relative u_r est une constante (et la pression suit une loi d'état barotrope) permet d'exhiber les valeurs propres de ce système. Les valeurs propres de la matrice A (3.8) du système HEM mis sous la forme (3.7) sont les racines $(\lambda_k)_{k=0,1,2}$ du polynôme caractéristique (3.9). En faisant le changement de variable : $\lambda = z - \frac{Kc_r}{3} + u$ (en remplaçant les a_i par leurs valeurs (3.9)), on s'est ramené à étudier si les racines $(z_k)_{k=0,1,2}$ du polynôme P_2 (3.10) étaient réelles. On a montré que sous la condition $f'(\rho) > 0$, pour toutes les valeurs admissibles de la concentration relative c_r et de K , les racines de ce polynôme étaient bien réelles. Cependant, les formules de Cardan permettent aussi d'obtenir la valeur de ces racines : tous calculs faits, on obtient :

$$z_k = 2r^{1/3} \cos \left[1/3 \arccos(-e/(2r)) + \frac{2k\Pi}{3} \right], k = 0, 1, 2 \quad (3.44)$$

avec

$$r = \left(\frac{f'(\rho)}{3} + \frac{(3 + c_r^2)K^2}{36} \right)^{3/2}, \quad (3.45)$$

et

$$-\frac{e}{2r} = c_r K \left[\frac{72f'(\rho) + (c_r^2 - 9)K^2}{(12f'(\rho) + (3 + c_r^2)K^2)^{3/2}} \right]. \quad (3.46)$$

Les valeurs propres de la matrice A du système des équations HEM s'écrivent :

$$\lambda_k = 2\sqrt{\frac{f'(\rho)}{3} + \frac{(3+c_r^2)K^2}{36}} \cos \left[1/3 \arccos \left(c_r K \left[\frac{72f'(\rho) + (c_r^2 - 9)K^2}{(12f'(\rho) + (3 + c_r^2)K^2)^{3/2}} \right] \right) + \frac{2k\Pi}{3} \right] - \frac{Kc_r}{3} + u, \quad k = 0, 1, 2. \quad (3.47)$$

[Dans le cadre des équations d'Euler sans vitesse relative ($K = 0$), on a pour racines du polynôme P_2 les $(z_k)_{k=0,1,2}$ (3.44) :

$$0, \pm \sqrt{f'(\rho)},$$

(le rapport $-\frac{e}{2r}$ est nul dans ce cas) qui donnent bien les valeurs propres usuelles des équations d'Euler barotropes, à savoir : $\lambda = u, u \pm \sqrt{f'(\rho)}$].

– Modification du critère de stabilité du schéma Lagrange-projection BBC-modifié pour le HEM dans le cadre $u_r = \text{cste} = K$:

Le jeu d'équations du modèle HEM est discrétisé dans le code via un schéma Lagrange+projection (c.f. chapitre 2). Pour ce type de schémas [Des10], deux critères de stabilité interviennent : un pour la phase lagrangienne et un autre pour la phase de projection. La condition de stabilité de la phase lagrangienne est dictée par les valeurs propres du système lagrangien :

$$\text{Max}_k(\lambda'_k) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (3.48)$$

où les (λ'_k) sont les valeurs propres du système lagrangien. Dans notre cas des équations du modèle HEM lorsque u_r est une constante K , ces valeurs propres lagrangiennes (3.47) sont :

$$\lambda'_k = 2\sqrt{\frac{f'(\rho)}{3} + \frac{(3+c_r^2)K^2}{36}} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(c_r K \left[\frac{72f'(\rho) + (c_r^2 - 9)K^2}{(12f'(\rho) + (3+c_r^2)K^2)^{3/2}} \right] \right) + \frac{2k\pi}{3} \right] - \frac{Kc_r}{3}, \quad k = 0, 1, 2. \quad (3.49)$$

En majorant :

$$|\lambda'_k| \leq 2\sqrt{\frac{f'(\rho)}{3} + \frac{(3+c_r^2)K^2}{36}} + \frac{|Kc_r|}{3}, \quad (3.50)$$

et comme $-1 \leq c_r \leq 1$, on obtient comme condition de stabilité pour les équations du modèle HEM :

$$\left[2\sqrt{\frac{f'(\rho)}{3} + \frac{K^2}{9}} + \frac{|K|}{3} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (3.51)$$

à la place de :

$$\sqrt{f'(\rho)} \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (3.52)$$

pour les équations d'Euler, i.e. les équations HEM avec $u_r = 0$.

La phase de projection du schéma Lagrange-projection impose la condition $\max(|u|) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{2}$ (où u est la vitesse moyenne du mélange) afin que les mailles déformées ne se croisent pas. La condition de stabilité provenant des équations du modèle HEM (3.51) est vérifiée en particulier si :

$$|K| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{2}, \quad (3.53)$$

$$\sqrt{f'(\rho)} \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{\sqrt{3}}{4}. \quad (3.54)$$

Dans le cadre d'un modèle de drift, on admet que la vitesse relative u_r soit plus petite ou du même ordre de grandeur que la vitesse moyenne du mélange, la première condition de stabilité (3.53) n'est pas plus restrictive que celle liée à la phase de projection du schéma. Pour ce qui est de la seconde condition (3.54), les équations du modèle HEM imposent une condition un peu plus restrictive sur le pas de temps que celle des équations d'Euler classique (3.52).

Cette étude d'hyperbolicité nous a ainsi aussi permis d'exhiber une condition de stabilité (3.54) du schéma numérique pour les équations HEM présenté au chapitre précédant (Chap. 2).

3.1.2 Etude du modèle HEM lorsque la vitesse relative vérifie la relation simplifiée $u_r = \lambda \frac{\partial_x p}{((\partial_x p)^2 + \delta)^{1/4}}$

L'objectif de cette sous-section est d'étudier le modèle HEM en utilisant une formule pour u_r se rapprochant plus de la formule de fermeture utilisée

(1.123) dépendant du gradient de pression. Comme dans l'équation sur la vitesse moyenne u du modèle HEM (1.121), on a des termes en $\text{div}u_r$, la formule sur u_r (1.123) va introduire de la diffusion dans le système. Cette étude se fait en dimension 1.

Dans cette sous-section, on considère toujours que la loi suivie par la pression est barotrope :

$$p = f(\rho), \quad (3.55)$$

mais cette fois-ci, on considère la formule simplifiée sur la vitesse relative suivante qui dépend du gradient de pression :

$$u_r = \lambda \frac{\partial_x p}{((\partial_x p)^2 + \delta)^{1/4}}, \quad (3.56)$$

où δ est un petit paramètre fixé strictement positif et λ est une constante.

Comme le système est diffusif dans ce cas, il n'est plus question de regarder le caractère hyperbolique mais on va étudier son comportement autour d'un état initial constant : on ne va pas étudier directement le jeu de trois équations du modèle HEM (1.119)-(1.121) mais le linéarisé de ce système autour d'un état initial constant [KL89, Ram00]. Dans les équations HEM (1.119)-(1.121),

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \quad (3.57)$$

$$\partial_t(\rho c_r) + \partial_x(\rho(c_r u + \frac{1 - c_r^2}{2} u_r)) = 0, \quad (3.58)$$

$$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho(u^2 + \frac{1 - c_r^2}{4} u_r^2)) + \partial_x p = 0, \quad (3.59)$$

complétées par les équations (3.55) et (3.56), on pose

$$V = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho c_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Soit \underline{V} une solution stationnaire du système. Soit $\epsilon > 0$ petit, la technique de linéarisation consiste à insérer $V = \underline{V} + \epsilon W$ dans (3.57)-(3.59) et à obtenir un système linéarisé en la variable W à partir du système (3.57)-(3.59). On note $(\underline{V}_i)_{i=1,2,3}$ les composantes de \underline{V} et $(W_i)_{i=1,2,3}$ les composantes du vecteur W . Dans toute la suite, comme \underline{V} est un état stationnaire, on a :

$$\partial_x \underline{V}_i = 0, \quad (3.61)$$

$$\text{et } \partial_t \underline{V}_i = 0, \quad \forall i = 1, 2, 3. \quad (3.62)$$

Ainsi, W est solution au premier ordre du système linéaire à coefficients constants suivant dans le cadre où $u_r = \lambda \frac{\partial_x p}{((\partial_x p)^2 + \delta)^{1/4}}$:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + A(\underline{V}) \frac{\partial W}{\partial x} = D(\underline{V}) \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}, \quad (3.63)$$

où les matrices A et D dépendent de l'état stationnaire \underline{V} :

$$A(\underline{V}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{V_2^2}{V_1^2} + f'(V_1) & \frac{2V_2}{V_1} & 0 \\ -\frac{V_2V_3}{V_1^2} & \frac{V_3}{V_1} & \frac{V_2}{V_1} \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

et

$$D(\underline{V}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\lambda}{2}V_1f'(V_1)\delta^{-1/4} + \frac{\lambda}{2}f'(V_1)\frac{V_3^2}{V_1}\delta^{-1/4} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

On donne l'exemple de l'obtention de l'équation linéarisée sur la variable W_3 , obtenue à partir de l'équation vérifiée par la concentration relative c_r (3.58).

On considère le terme faisant intervenir la vitesse relative u_r (3.56) en $\partial_x(\rho\frac{1-c_r^2}{2}u_r)$, qui s'écrit en fonction des composantes du vecteur V (3.60) :

$$\frac{d}{dx}(\rho\frac{1-c_r^2}{2}u_r) = \frac{\lambda}{2}\frac{d}{dx}\left(V_1\frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}}\right) - \frac{\lambda}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{(V_3)^2}{V_1}\frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}}\right). \quad (3.66)$$

On veut en particulier obtenir un développement à l'ordre 2 en ϵ de (3.66). Si l'on note :

$$D := \frac{d}{dx}\left[\frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}}\right] = \frac{u_r}{\lambda}, \quad (3.67)$$

on a :

$$D = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{-1/4} - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{-5/4}. \quad (3.68)$$

Comme $p = f(V_1)$ grâce à (3.55), on a

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{f'(V_1)}{f'(V_1) + \epsilon W_1 f''(V_1) + O(\epsilon^2)} \frac{\partial V_1}{\frac{\partial x}}{\epsilon \frac{\partial W_1}{\partial x}} \\ &= \epsilon f'(V_1) \frac{\partial W_1}{\partial x} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.69)$$

Pour la dérivée seconde :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = f'(V_1) \frac{\partial^2 V_1}{\partial x^2} + f''(V_1) \left(\frac{\partial V_1}{\partial x}\right)^2. \quad (3.70)$$

Or

$$\frac{\partial V_1}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial W_1}{\partial x}, \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial^2 V_1}{\partial x^2} = \epsilon \frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2}, \quad (3.72)$$

donc

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \epsilon f'(\underline{V}_1) \frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2} + O(\epsilon^2). \quad (3.73)$$

Ensuite, on considère la quantité :

$$\begin{aligned} \frac{1}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}} &= \delta^{-1/4} \frac{1}{(1 + \frac{1}{\delta} (f'(\underline{V}_1) \epsilon \frac{\partial W_1}{\partial x})^2)^{1/4}} \\ &= \delta^{-1/4} \left(1 - \frac{1}{4} \epsilon^2 \frac{(f'(\underline{V}_1))^2}{\delta} \left(\frac{\partial W_1}{\partial x} \right)^2 \right) \\ &= \delta^{-1/4} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.74)$$

En se servant de (3.69), (3.73), (3.74), on obtient finalement en s'arrêtant à l'ordre 2 le développement de la quantité D :

$$D = \epsilon \delta^{-1/4} f'(\underline{V}_1) \frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2} + O(\epsilon^2). \quad (3.75)$$

Si on définit

$$E := \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}}, \quad (3.76)$$

alors toujours avec (3.69) et (3.74), on obtient :

$$E = \epsilon f'(\underline{V}_1) \frac{\partial W_1}{\partial x} \delta^{-1/4} + O(\epsilon^2). \quad (3.77)$$

Par conséquent :

$$\begin{aligned} &\frac{\lambda}{2} \frac{d}{dx} \left(V_1 \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}} \right) \\ &= \frac{\lambda}{2} \frac{d}{dx} (V_1) E + \frac{\lambda}{2} V_1 D \\ &= \epsilon \delta^{-1/4} \frac{\lambda}{2} \underline{V}_1 f'(\underline{V}_1) \frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

On s'occupe maintenant du deuxième terme de (3.66) :

$$- \frac{\lambda}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{(V_3)^2}{V_1} \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}} \right). \quad (3.79)$$

On a :

$$\frac{(V_3)^2}{V_1} = \frac{(V_3 + \epsilon W_3)^2}{\underline{V}_1 (1 + \epsilon \frac{W_3}{\underline{V}_1})} = \frac{(V_3)^2}{\underline{V}_1} + O(\epsilon), \quad (3.80)$$

et

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{(V_3)^2}{V_1} \right) = 2\epsilon \frac{V_3}{\underline{V}_1} W_3 - \epsilon \frac{(V_3)^2}{(\underline{V}_1)^2} W_1. \quad (3.81)$$

Ainsi, comme :

$$-\frac{\lambda}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{(V_3)^2}{V_1} \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}} \right) = -\frac{\lambda}{2} \frac{(V_3)^2}{V_1} D - \frac{\lambda}{2} E \frac{d}{dx} \left(\frac{(V_3)^2}{V_1} \right), \quad (3.82)$$

on obtient toujours grâce à (3.75) et (3.77) :

$$-\frac{\lambda}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{(V_3)^2}{V_1} \frac{\frac{\partial p}{\partial x}}{((\frac{\partial p}{\partial x})^2 + \delta)^{1/4}} \right) = -\frac{\lambda}{2} \frac{(V_3)^2}{V_1} \epsilon \delta^{-1/4} f'(V_1) \frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2} + O(\epsilon^2). \quad (3.83)$$

Finalement, on obtient l'équation linéarisée autour d'un état constant à partir de l'équation sur la variable c_r (3.58) (après simplification par ϵ) :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial W_3}{\partial t} - \frac{V_2 V_3}{V_1^2} \frac{\partial W_1}{\partial x} + \frac{V_3}{V_1} \frac{\partial W_2}{\partial x} + \frac{V_2}{V_1} \frac{\partial W_3}{\partial x} \\ &= \left(-\frac{\lambda}{2} V_1 f'(V_1) + \frac{\lambda}{2} f'(V_1) \frac{V_3^2}{V_1} \right) \delta^{-1/4} \frac{\partial^2 W_1}{\partial x^2} + O(\epsilon). \end{aligned} \quad (3.84)$$

Sans détailler l'obtention de l'équation linéarisée sur la vitesse moyenne (3.59), on peut noter que comme la vitesse relative apparaît sous la forme $\partial_x u_r^2$, les termes provenant de u_r seront d'ordre 2 en ϵ (d'après (3.75) car $D = \frac{u_r}{\lambda}$) et n'apparaîtront pas dans l'équation linéarisée sur la variable W_2 .

Afin de réaliser l'étude de l'équation linéarisée (3.63), on lui applique la transformée de Fourier sur sa variable d'espace, on note $\hat{W}(\xi, t)$ l'image de $W(x, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{W}(\xi, t) = -i\xi A(\underline{V}) \hat{W}(\xi, t) - \xi^2 D(\underline{V}) \hat{W}(\xi, t). \quad (3.85)$$

Pour $\xi \in \mathbb{R}$ fixé, on a l'équation différentielle :

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{W}(\xi, t) = -M(\underline{V}, \xi) \hat{W}(\xi, t), \quad (3.86)$$

où $M(\underline{V}, \xi) = \xi^2 D(\underline{V}) + i\xi A(\underline{V})$.

Si on prend pour norme de l'espace H^p :

$$\|\hat{W}(t, \cdot)\|_{H^p} = \int |\hat{W}(t, \xi)|^2 (1 + |\xi|^2)^p d\xi, \quad (3.87)$$

on va montrer que l'on peut majorer la solution de (3.86) en fonction de la condition initiale :

$$\|\hat{W}(t, \cdot)\|_{H^p} \leq \text{cste} \|\hat{W}(0, \cdot)\|_{H^{p+1}}, \quad (3.88)$$

sous la condition $f'(V_1) > 0$.

Sous cette condition $f'(V_1) > 0$ d'hyperbolicité (identique à celle de la section 3.1.1 (3.17)), les valeurs propres de $M(\underline{V}, \xi)$ sont distinctes :

$$X_1 = i\xi \left[\frac{V_2}{V_1} - \sqrt{f'(V_1)} \right],$$

$$X_2 = i\xi \left[\frac{V_2}{V_1} + \sqrt{f'(V_1)} \right],$$

$$X_3 = i\xi \frac{V_2}{V_1},$$

et la matrice $M(\underline{V}, \xi)$ est diagonalisable. De plus pour tout état stationnaire \underline{V} et pour tout $\xi \in \mathbb{R}$, le spectre de $M(\underline{V}, \xi)$ est à parties réelles nulles.

Remarque 3.1.7 La matrice de diffusion $D(\underline{V}, \xi)$ n'intervient pas dans l'obtention des valeurs propres de la matrice $M(\underline{V}, \xi)$ car les valeurs propres de la matrice $A(\underline{V})$ sont les : $\frac{X_i}{i\xi}, i = 1, 2, 3$. La condition pour que la matrice $M(\underline{V}, \xi)$ ait trois valeurs propres distinctes $f'(V_1) > 0$ est similaire à celle de la section précédente sur la matrice (3.8) ($f'(\rho) > 0$), où \underline{V}_1 est l'état stationnaire de ρ . En effet, la matrice (3.64) est identique à (3.8) en remplaçant ρ, ρ_u, ρ_r par leurs états stationnaires et en mettant la constante λ à zéro.

Afin d'obtenir la majoration de \hat{W} (3.88), comme la matrice M est diagonalisable, on va chercher à obtenir sa matrice P de passage. On obtient P comme base de vecteurs propres :

$$P(\underline{V}, \xi) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \frac{V_2}{V_3} - \sqrt{f'(V_1)} & \frac{V_2}{V_3} + \sqrt{f'(V_1)} & 0 \\ \frac{V_3}{V_3} + i\xi \frac{\lambda}{2} \sqrt{f'(V_1)} \delta^{-1/4} \left[\frac{(V_3)^2}{V_1} - V_1 \right] & \frac{V_3}{V_3} - i\xi \frac{\lambda}{2} \sqrt{f'(V_1)} \delta^{-1/4} \left[\frac{(V_3)^2}{V_1} - V_1 \right] & 1 \end{pmatrix}.$$

Il faut noter que la matrice de passage dépend de l'état initial constant de départ ainsi que de ξ .

L'inverse de $P(\underline{V}, \xi)$ est :

$$P^{-1}(\underline{V}, \xi) = \frac{1}{2\sqrt{f'(V_1)}} \quad (3.89)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{V_2}{V_1} + \sqrt{f'(V_1)} & -1 & 0 \\ -\frac{V_2}{V_1} + \sqrt{f'(V_1)} & 1 & 0 \\ -2\frac{V_3}{V_1} + \sqrt{f'(V_1)} - i\xi \lambda \sqrt{f'(V_1)} \delta^{-1/4} \frac{V_2}{V_1} \left[\frac{(V_3)^2}{V_1} - V_1 \right] & i\xi \lambda \sqrt{f'(V_1)} \delta^{-1/4} \left[\frac{(V_3)^2}{V_1} - V_1 \right] & 2\sqrt{f'(V_1)} \end{pmatrix}.$$

On a comme solution de l'équation différentielle (3.86) :

$$\hat{W}(\xi, t) = e^{-tM(\underline{V}, \xi)} \hat{W}(\xi, 0) = P(\underline{V}, \xi) e^{-i\xi t \text{Diag}(\underline{V}, \xi)} \hat{W}(\xi, 0), \quad (3.90)$$

où

$$\text{Diag}(\underline{V}, \xi) = \begin{pmatrix} \frac{V_2}{V_1} - \sqrt{f'(V_1)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{V_2}{V_1} + \sqrt{f'(V_1)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{V_2}{V_1} \end{pmatrix}. \quad (3.91)$$

On va étudier le comportement de la solution \hat{W} par rapport à sa solution initiale $\hat{W}(0, \xi)$. La norme de l'espace H^p :

$$\|\hat{W}(t, \cdot)\|_{H^p} = \sum_{i=1}^p \int |\hat{W}(t, \xi)|^2 |\xi|^{2i} d\xi, \quad (3.92)$$

est équivalente à :

$$\begin{aligned} \|\hat{W}(t, \cdot)\|_{H^p} &= \int |\hat{W}(t, \xi)|^2 (1 + |\xi|^2)^p d\xi \\ &\leq \int \|P^{-1}(\underline{V}, \xi)\|_{\infty}^2 \|P(\underline{V}, \xi)\|_{\infty}^2 |\hat{W}(0, \xi)|^2 (1 + |\xi|^2)^p d\xi. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Or, comme l'état initial \underline{V} est fixé et le paramètre $\delta > 0$ est lui aussi fixé, on a pour ξ suffisamment grand :

$$\|P\|_{\infty} \leq \text{cste} |\xi|, \quad (3.94)$$

$$\text{et } \|P^{-1}\|_{\infty} \leq \text{cste}' |\xi|. \quad (3.95)$$

On a finalement la majoration suivante :

$$\begin{aligned} \|\hat{W}(t, \cdot)\|_{H^p} &\leq \text{cste} \int |\hat{W}(0, \xi)|^2 \xi^2 (1 + |\xi|^2)^p d\xi \\ &\leq \text{cste} \int |\hat{W}(0, \xi)|^2 (1 + |\xi|^2)^{p+1} d\xi = \text{cste} \|\hat{W}(0, \cdot)\|_{H^{p+1}}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Ainsi, si on introduit une petite perturbation initiale au sein du système linéarisé autour d'un état initial constant (3.63), on n'aura pas de croissance exponentielle de cette instabilité (sous l'hypothèse $f'(V_1) > 0$).

On voit que le modèle HEM que l'on considère (sous réserve que certaines simplifications soient effectuées) a des propriétés mathématiques raisonnables : hyperbolicité si l'on suppose que $u_r = \text{cste}$; stabilité du système linéarisé autour d'un point d'équilibre pour u_r donné par une formule très proche de celle utilisée en pratique.

3.2 Comportement à la limite du modèle HEM

L'objectif de cette section est d'étudier le comportement du modèle HEM lorsque la vitesse relative u_r tend vers 0. On va voir que le modèle HEM dégénère bien vers un modèle de mélange dans ce cas. Pour ce faire, on va réaliser une étude dimensionnelle des équations. L'idée est, en considérant la formule de vitesse relative u_r (1.123) qui est proportionnelle à la racine carrée du rayon r_{moy} des gouttelettes, de faire tendre ce rayon r_{moy} vers 0 et de regarder le comportement limite du modèle HEM.

3.2.1 Grandeurs caractéristiques des équations HEM

Pour réaliser l'adimensionnement des équations, il faut déterminer les grandeurs caractéristiques de notre modèle. Ces grandeurs caractéristiques sont propres au type d'écoulement considéré. Dans notre modèle, on va considérer deux longueurs caractéristiques différentes :

$$r = R\tilde{r}, \quad (3.97)$$

$$x = L\tilde{x}. \quad (3.98)$$

En effet, l'hypothèse des modèles HEM est que le rayon des gouttelettes r est petit devant la longueur caractéristique d'une maille. On définit le temps caractéristique de l'écoulement T :

$$t = T\tilde{t}. \quad (3.99)$$

Le modèle faisant intervenir deux vitesses : une moyenne u ainsi qu'une relative u_r (que l'on veut faire tendre vers 0), on va avoir besoin de deux vitesses typiques différentes :

$$u = u_0\tilde{u}, \quad (3.100)$$

$$u_r = u_{r_0}\tilde{u}_r. \quad (3.101)$$

On définit les grandeurs typiques de la pression, de la gravité ainsi que de la force de traînée du problème :

$$p = P_1\tilde{p}, \quad (3.102)$$

$$F_D = f\tilde{F}_D, \quad (3.103)$$

$$g = g_0\tilde{g}. \quad (3.104)$$

Enfin, il reste à déterminer les grandeurs typiques relatives à la densité et à l'énergie interne. Dans le jeu d'équations HEM, les quantités moyennes ρ et e apparaissent ainsi que les quantités relatives $\frac{1}{\rho_r}$ et e_r . On va considérer une seule grandeur caractéristique pour l'énergie moyenne et relative :

$$e = e_0\tilde{e}, \quad (3.105)$$

$$e_r = e_0\tilde{e}_r. \quad (3.106)$$

L'hypothèse sous jacente est que les énergies de chacune des deux phases sont du même ordre de grandeur : $e^- = e_0\tilde{e}^-$ et $e^+ = e_0\tilde{e}^+$ (ce que l'on peut fixer par un simple changement de l'énergie interne de référence d'un des deux fluides). Enfin dans le système HEM, interviennent à la fois la densité moyenne ρ et le rapport de densité entre les deux phases : $\frac{\rho^-}{\rho^+}$ (dans la formule algébrique sur la vitesse relative u_r (1.123)) ; on définit donc deux densités caractéristiques différentes ρ_1 et ρ_2 qui sont suffisantes pour adimensionner toutes les quantités dépendant de densités dans le système HEM, i.e. ρ , ρ^- , $\frac{\rho^-}{\rho^+}$ ainsi que $\frac{1}{\rho_r}$:

$$\rho := \rho_1\tilde{\rho}, \quad (3.107)$$

$$\frac{\rho^-}{\rho^+} := \rho_2\frac{\tilde{\rho}^-}{\tilde{\rho}^+}, \quad (3.108)$$

si bien que :

$$\rho^- = \rho_1 \tilde{\rho}^-, \quad (3.109)$$

$$\frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho_1} \frac{1}{\tilde{\rho}^r}. \quad (3.110)$$

Le modèle HEM suppose que la densité du fluide léger ρ^- est différente de la densité du fluide lourd ρ^+ . En se donnant deux grandeurs caractéristiques différentes pour chacune des densités des fluides :

$$\rho^- = \rho_4 \tilde{\rho}^-, \quad (3.111)$$

$$\rho^+ = \rho_5 \tilde{\rho}^+, \quad (3.112)$$

on a alors $\frac{\rho^-}{\rho^+} = \frac{\rho_4}{\rho_5} \frac{\tilde{\rho}^-}{\tilde{\rho}^+}$, et on a $\rho_4 \ll \rho_5$. On retourne à la définition de la densité moyenne ρ (1.36) :

$$\rho = \frac{\rho^+ \rho^-}{c^+ \rho^- + c^- \rho^+} \quad (3.113)$$

$$= \rho_4 \rho_5 \frac{\tilde{\rho}^+ \tilde{\rho}^-}{c^+ \rho_4 \tilde{\rho}^- + c^- \rho_5 \tilde{\rho}^+} \quad (3.114)$$

$$= \rho_5 \frac{c^+ \tilde{\rho}^- + c^- \tilde{\rho}^+}{c^+ \tilde{\rho}^- + c^- \frac{\rho_5}{\rho_4} \tilde{\rho}^+} \tilde{\rho}. \quad (3.115)$$

En se plaçant dans une situation où il n'y a pas trop de fluide lourd (i.e. c^+ ne tend pas vers 1) et comme $\frac{\rho_5}{\rho_4} \gg 1$, on obtient que :

$$\rho \simeq \frac{\rho_4}{c^-} \tilde{\rho}. \quad (3.116)$$

On voit que l'on peut prendre ρ du même ordre de grandeur que ρ^- si $c^- \simeq 0.5$. Ainsi, en posant $\rho_4 = \rho_1$, on obtient bien le système (3.107)-(3.109). Pour (3.110), comme $\rho^- \ll \rho^+$, $\frac{1}{\rho_r} \sim \frac{1}{\rho^-}$ et on peut donc adimensionner $\frac{1}{\rho_r}$ par $\frac{1}{\rho_1} : \frac{1}{\rho_r} = \frac{1}{\rho_1} \frac{1}{\tilde{\rho}^r}$.

On se place dans un cadre où le fluide lourd et le fluide léger sont en quantités comparables (i.e. dans un cadre où ni la concentration de fluide lourd c^+ ni celle de fluide léger c^- ne tendent vers 0.) La quantité relative c_r étant une grandeur sans dimension, on ne l'adimensionne pas.

On dispose maintenant de toutes les grandeurs caractéristiques de notre système.

3.2.2 Grandeurs adimensionnées du système HEM

A partir des grandeurs caractéristiques du système exhibées dans la sous-section précédente, on obtient les équations HEM (1.119)-(1.132) s'exprimant en fonction des variables adimensionnées ($\tilde{\cdot}$) et des grandeurs caractéristiques

(3.97) à (3.108) :

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}} + \frac{u_0 T}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u}) = 0, \quad (3.117)$$

$$\frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{c}_r)}{\partial \tilde{t}} + \frac{T u_0}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{c}_r \tilde{u}) + \frac{T u_{r0}}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \frac{1-c_r^2}{2} \tilde{u}_r) = 0, \quad (3.118)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{u})}{\partial \tilde{t}} + \frac{T u_0}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \otimes \tilde{u}) + \frac{T(u_{r0})^2}{L u_0} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \frac{1-c_r^2}{2} \tilde{u}_r \otimes \tilde{u}_r) \\ + \frac{T P_1}{L \rho_1 u_0} \tilde{\nabla}(\tilde{p}) = \frac{T g_0}{u_0} \tilde{\rho} \tilde{g}, \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{e})}{\partial \tilde{t}} + \frac{T u_0}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{e} \tilde{u}) + \frac{T u_{r0}}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{e}_r \frac{1-c_r^2}{4} \tilde{u}_r) + \frac{T P_1 u_0}{\rho_1 e_0 L} \tilde{p} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{u} \\ + \frac{T P_1 u_{r0}}{L \rho_1 e_0} \tilde{p} \cdot \tilde{\nabla} \left(\frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_r} \frac{1-c_r^2}{4} \tilde{u}_r \right) = \frac{T f u_{r0}}{\rho_1 e_0} \tilde{F}_D \cdot \tilde{u}_r. \end{aligned} \quad (3.120)$$

Enfin, les relations explicites sur la vitesse relative (1.123) et la force de traînée (1.127) vont donner immédiatement deux relations entre les grandeurs caractéristiques du système. On rappelle que la relation de fermeture de vitesse relative obtenue dans [GP06] est :

$$u_r = -\sqrt{\frac{r^*}{C^* \theta_\rho}} \sqrt{\frac{1}{\rho_r} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}}, \quad (3.121)$$

avec

$$\theta_\rho = \frac{\rho^-}{c^- \rho^+} \quad \text{et} \quad \frac{r^*}{C^*} = \frac{8 r_{moy}}{3 C_d}, \quad (3.122)$$

où r_{moy} est le rayon moyen des gouttelettes et C_d le coefficient de traînée. La force de traînée s'écrit alors :

$$F_D = \rho \theta_\rho \frac{C^*}{r^*} \frac{1-c_r^2}{4} |u_r| u_r. \quad (3.123)$$

On a avec (3.108) l'adimensionnement de θ_ρ :

$$\theta_\rho = \rho_2 \frac{1}{c^-} \frac{\tilde{\rho}^-}{\tilde{\rho}^+} \quad (3.124)$$

$$= \rho_2 \tilde{\theta}_\rho. \quad (3.125)$$

Pour la vitesse relative, on suppose que le coefficient de traînée est constant et ne dépend pas des grandeurs caractéristiques du système. En adimensionnant l'équation (3.121), on va faire apparaître la grandeur adimensionnée \tilde{u}_r de chaque côté de l'équation grâce à la relation (3.101) :

$$\tilde{u}_r = \frac{R^{1/2} P_1^{1/2}}{u_{r0} \rho_2^{1/2} L^{1/2} \rho_1^{1/2}} \tilde{u}_r, \quad (3.126)$$

ce qui donne comme condition sur les grandeurs caractéristiques du système :

$$R^{1/2} = \frac{u_{r0} \rho_2^{1/2} \rho_1^{1/2} L^{1/2}}{P_1^{1/2}}. \quad (3.127)$$

On s'occupe du terme de traînée : de l'équation (3.123), on obtient :

$$\tilde{F}_D = \frac{\rho_1 \rho_2 (u_{r0})^2}{Rf} \tilde{F}_D, \quad (3.128)$$

ce qui conduit à une nouvelle relation sur le rayon caractéristique de l'écoulement :

$$R = \frac{\rho_1 \rho_2 (u_{r0})^2}{f}. \quad (3.129)$$

En injectant (3.129) dans (3.127), on obtient la relation suivante :

$$f^{1/2} = \frac{P_1^{1/2}}{L^{1/2}}. \quad (3.130)$$

Remarque 3.2.1 Si on ne suppose plus que le coefficient de traînée est constant, mais qu'il suit la relation : $C_d \sim \frac{24}{Re} = \frac{12\eta}{r\rho^-|u_r|}$, alors (3.121) devient :

$$u_r = -\frac{2}{9} r^2 \frac{c^- \rho^+}{\eta} \frac{1}{\rho_r} \nabla p. \quad (3.131)$$

Les relations que l'on obtient de cette formule et de la traînée sont :

$$R^2 = \frac{\rho_2 u_{r0} L}{P_1} \text{ à la place de (3.127),} \quad (3.132)$$

$$\text{ainsi que } R^2 = \frac{\rho_2 u_{r0}}{f} \text{ à la place de (3.129),} \quad (3.133)$$

ce qui conduit toujours à la relation $f = \frac{P_1}{L}$.

Remarque 3.2.2 L'utilisation de l'autre formule sur la vitesse relative (à C_d constant) non dépendante de la concentration de léger c^- (1.242) :

$$u_r = -\sqrt{\frac{8}{3}} \sqrt{\frac{r}{C_d}} \sqrt{\frac{\rho^+ - \rho^-}{\rho^2}} \frac{\nabla p}{|\nabla p|^{1/2}}, \quad (3.134)$$

conduit à (comme $\rho^+ - \rho^- \sim \frac{\rho_1}{\rho_2} (\tilde{\rho}^+ - \tilde{\rho}^-)$ par (3.108), (3.109) et $\rho^+ \gg \rho^-$) :

$$\tilde{u}_r = \frac{R^{1/2} P_1^{1/2}}{u_{r0} (\rho_2)^{1/2} (\rho_1)^{1/2} L^{1/2}} \tilde{u}_r, \quad (3.135)$$

i.e.

$$R^{1/2} = \frac{u_{r0} (\rho_1)^{1/2} (\rho_2)^{1/2} L^{1/2}}{P_1^{1/2}}, \quad (3.136)$$

qui est exactement la même condition que celle pour la première formule de vitesse relative (3.127). Comme la force de traînée correspondante est :

$$F_D = \frac{3}{8} \frac{C_d}{r} \rho^2 \frac{1}{\rho^+ - \rho^-}, \quad (3.137)$$

on obtient :

$$R = \frac{\rho_1 \rho_2 (u_{r0}^2)}{f} \quad (3.138)$$

qui donne de nouveau la relation :

$$f^{1/2} = \frac{P^{1/2}}{L^{1/2}}. \quad (3.139)$$

L'objectif est de faire tendre R vers 0 dans le système adimensionné (3.117)-(3.120). On commence par traiter les paramètres (caractéristiques du système) non relatifs (i.e. les termes des équations HEM déjà présents dans les équations d'Euler sans vitesse relative) qui ne dépendent pas de ce paramètre R . La première valeur qui apparaît dans les équations adimensionnées est la quantité sans dimension suivante : $\frac{u_0 T}{L}$. Vu que notre écoulement est macroscopique, la longueur caractéristique L est du même ordre de grandeur que la distance parcourue par le fluide à sa vitesse de référence pendant un temps de référence, on a $\frac{u_0 T}{L} = 1$.

Ensuite, sous cette première condition, la seconde quantité apparaissant dans l'équation en énergie (3.120) se réécrit :

$$\frac{TP_1 u_0}{\rho_1 e_0 L} = \frac{P_1}{\rho_1 e_0}. \quad (3.140)$$

En supposant que le fluide léger suit une équation d'état de type "gaz parfaits", on a tout de suite que : $p = (\gamma - 1)\rho e$, où γ est une constante, et

$$P_1 \tilde{p} = (\gamma - 1)\rho_1 e_0 \tilde{\rho} \tilde{e}. \quad (3.141)$$

Ainsi,

$$\tilde{p} = \frac{\rho_1 e_0}{P_1} \tilde{\rho} \tilde{e}, \quad (3.142)$$

ce qui implique bien que

$$\frac{P_1}{\rho_1 e_0} = 1. \quad (3.143)$$

La quantité (3.140) est alors égale à 1. Dans l'équation en vitesse adimensionnée (3.119), on a deux conditions à définir sur deux grandeurs adimensionnées qui ne dépendent pas des grandeurs relatives :

$$\frac{TP_1}{L\rho_1 u_0} \quad (3.144)$$

$$\text{ainsi que } \frac{Tg_0}{u_0}. \quad (3.145)$$

On va les traiter ensemble en se plaçant dans un cadre où on a une pression hydrostatique : $p = P_0 + \rho g z$ où P_0 est une grandeur qui n'a que de petites variations. Dans ce cadre, on a :

$$\nabla p = \nabla(P_0 + \rho g z) = g z \nabla \rho + \rho g. \quad (3.146)$$

Faire cette hypothèse permet de traiter ensemble les deux derniers termes de l'équation en vitesse (1.121) et de refaire l'adimensionnement de cette équation :

$$\frac{\partial \tilde{p}\tilde{u}}{\partial \tilde{t}} + \frac{T u_0}{L} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}\tilde{u} \otimes \tilde{u}) + \frac{T(u_{r0})^2}{L u_0} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \frac{1-c_r^2}{2} \tilde{u}_r \otimes \tilde{u}_r) + \frac{T g_0}{u_0} \tilde{g} \tilde{z} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}) = 0,$$

ce qui fait ressortir uniquement la quantité : $\frac{T g_0}{u_0}$. Pour des vitesses caractéristiques de l'ordre de 10 m.s⁻¹ et des temps de l'ordre de la seconde, on a que $\frac{T g_0}{u_0} = 1$. Toutes les quantités ne dépendant pas des grandeurs relatives sont ainsi fixées.

Si maintenant, on fait tendre vers 0 le paramètre R dans l'équation (3.127), comme toutes les grandeurs hormis u_{r0} sont fixées, on a immédiatement que $u_{r0} \rightarrow 0$ lorsque $R \rightarrow 0$ (le cas $C_d \sim \frac{24}{Re}$ (3.132) ainsi que l'autre formule sur la vitesse relative (3.136) conduisent à la même condition). De (3.130), on voit que f est un terme d'ordre 1 qui ne dépend pas de R . Par contre, dans l'équation en énergie (3.120), le terme de traînée adimensionné s'exprime sous la forme :

$$\frac{T f u_{r0}}{\rho_1 e_0} \tilde{F}_D \cdot \tilde{u}_r. \quad (3.147)$$

Ainsi, ce terme de traînée tend vers 0 aussi vite que la vitesse relative u_{r0} . A la limite, lorsque $R \rightarrow 0$, à concentration relative fixée, pour un écoulement macroscopique tel que $\rho^+ \gg \rho^-$ et sous pression hydrostatique, le système HEM adimensionné (3.117)-(3.120) devient :

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}\tilde{u}) = 0, \quad (3.148)$$

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}\tilde{c}_r)}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}\tilde{c}_r\tilde{u}) = 0, \quad (3.149)$$

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}\tilde{u})}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}\tilde{u} \otimes \tilde{u}) + \tilde{\nabla} \tilde{p} = \tilde{\rho}\tilde{g}, \quad (3.150)$$

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}\tilde{e})}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}\tilde{e}\tilde{u}) + \tilde{p} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{u} = 0, \quad (3.151)$$

qui correspond aux équations de mélange classique.

On a obtenu (sous les conditions précédentes) que le modèle HEM (1.120)-(1.122) dégénère lorsque l'on fait tendre le rayon caractéristique des gouttelettes vers 0 vers le modèle de mélange classique.

Dans la chapitre suivant (Chapitre 4), on va vérifier ce résultat en comparant le code qui résout le modèle HEM au code qui résout les équations de mélange sans vitesse relative.

Résultats obtenus avec le schéma BBC pour le modèle HEM

Ce chapitre va présenter des simulations numériques réalisées avec le code d'étude du CEA utilisant le schéma BBC modifié pour les équations HEM décrit au chapitre 2. On comparera les résultats obtenus avec ceux d'autres modèles : d'abord le modèle homogène équilibré sans drift (mélange classique isobare-isovitesse et isotherme), i.e. celui correspondant au modèle HEM lorsque la vitesse relative vérifie $u_r = 0$ (c'est le modèle de mélange déjà implémenté dans le code d'étude *via* le schéma BBC classique du chapitre 2), puis avec un modèle de sprays [Bar04b, Mat06] dans la sous-section 4.2.2.

On rappelle que l'enjeu était de pouvoir simuler des mélanges de deux fluides qui sont à l'équilibre en pression et en température mais pour lesquels il existe un différentiel de vitesse entre les phases, sans utiliser de modèles de type gaz-particules (car trop coûteux en temps de calcul et non valides en présence d'un trop grand nombre de gouttelettes). Au début de cette thèse, le seul modèle à disposition au CEA-DAM était un modèle de mélange classique (au sens où les deux phases étaient supposées à la même pression/température et vitesse) ne permettant pas de simuler ce type de cas.

Toutes les simulations que l'on présente ont été réalisées avec de l'eau pour fluide lourd et de l'air pour fluide léger. On va présenter les simulations suivantes :

- une instabilité de type Rayleigh-Taylor (sous-section 4.1) : un fluide lourd est placé au dessus d'un fluide léger. Ces deux fluides sont soumis à la gravité et leur interface initiale est perturbée. Ce cas est aussi testé avec plusieurs perturbations initiales de la frontière entre fluide lourd et fluide léger.
- des résultats obtenus avec des équations d'état barotropes. Pour le premier cas test, on va d'abord comparer les résultats obtenus par le modèle HEM lorsque l'on prend un rayon moyen de gouttelettes de plus en plus petit (ce qui revient à faire tendre u_r vers 0) aux résultats obtenus avec le modèle de mélange isovitesse (i.e. avec la vitesse relative nulle) afin de vérifier que le modèle HEM se rapproche du modèle de mélange isovitesse lorsque $u_r \rightarrow 0$ (résultats de la sous-section 3.2 du chapitre 3). Les deux simulations précédentes s'effectuent à vitesse moyenne nulle.
- Enfin, on va présenter (toujours avec des équations d'état barotropes) les

résultats obtenus lorsque l'on soumet des gouttelettes aux effets de la gravité et à un vent latéral. Ce test va nous amener à effectuer des comparaisons qualitatives avec un autre code d'étude du CEA qui utilise quant à lui un modèle de type sprays (gaz-particules).

4.1 Simulations d'une instabilité de type Rayleigh-Taylor

L'objectif de cette première simulation est de tester si le modèle HEM permet de traiter une situation où un fluide plus dense se trouve au dessus d'un fluide moins dense. La frontière entre le fluide lourd et le fluide léger est initialement perturbée par une ou plusieurs imperfections. Cette situation, connue sous le nom d'instabilité de Rayleigh-Taylor, est instable et on s'attend à la formation d'un champignon (on pourra consulter [PCCT06] pour une présentation claire de cette instabilité typique).

On considère un mélange d'eau et d'air sur de l'air pur (plus léger). A noter que la composante graphique du code représente les cas couchés vers la gauche par rapport à l'orientation réelle : le haut (réel) est situé à gauche dans les simulations et le bas (réel) à droite. La gravité que l'on impose constante est donc orientée de gauche à droite.

Dans la figure (Fig. 4.1), on a représenté la situation initiale : à gauche (donc au dessus normalement), on dispose un mélange composé de gouttelettes d'eau et d'air, et en dessous un lit d'air avec une frontière imparfaite entre les deux. Le nombre de points dans la direction x est : $NX = 56$ et celui dans la direction y est : $NY = 60$, ce qui donne un pas d'espace : $\Delta x = 1,23.10^{-3}$ m pour la première direction et $\Delta y = 1,667.10^{-3}$ m pour la seconde.

– Equations d'état employées :

Les équations d'état que l'on considère sont composées d'une loi de pression par fluide compressible, et d'une loi d'énergie par fluide : l'air est traité en "gaz parfait" et l'eau (le fluide lourd) est incompressible.

Les équations d'état sont les suivantes : pour l'air,

$$p = (\gamma_{\text{air}} - 1)\rho^- C_{v_{\text{air}}} T, \quad (4.1)$$

$$e^- = C_{v_{\text{air}}} T, \quad (4.2)$$

$$\text{avec } \gamma_{\text{air}} = 1,4, \quad (4.3)$$

$$C_{v_{\text{air}}} = 6,44496.10^2 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}, \quad (4.4)$$

et pour l'eau (liquide) incompressible (la pression n'est donc pas définie) :

$$\rho^+ = 1000 \text{ kg/m}^3, \quad (4.5)$$

$$e^+ = C_{v_{\text{eau}}} T^+, \quad (4.6)$$

$$\text{avec } C_{v_{\text{eau}}} = 4186 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}. \quad (4.7)$$

Comme les équations d'état sont simples, il n'est pas utile de résoudre le système d'équations d'état (2.11) par une méthode de Newton : on va seulement, comme ρ^+ est constant, récupérer ρ^- à partir des quantités ρ et c^\pm à l'aide de l'équation :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \quad (4.8)$$

ce qui, grâce à (4.1), fournit la pression du système. Ensuite par définition de l'énergie interne du mélange e (1.35) et grâce à (4.2), (4.6) :

$$T = \frac{e}{c^- c_{v_{air}} + c^+ c_{v_{eau}}}. \quad (4.9)$$

En utilisant à nouveau (4.2)-(4.6), on en déduit immédiatement les énergies des deux fluides e^\pm .

- Initialisation :

La concentration initiale du fluide lourd est : $c^+ = 8,9 \cdot 10^{-1}$ ($c^- = 0$ dans le domaine où il n'y a que de l'air), la vitesse de mélange u est nulle et les conditions aux limites sont de type MUR. Ces simulations ont été obtenues en utilisant la formule de coupure sur la vitesse relative (2.79) mais le limiteur MIN-MOD (Remarque 2.1.7) n'était quant à lui pas activé. Au départ, la pression est uniformément égale à 10^5 Pa et la température à 300 K. Les autres valeurs initiales s'obtiennent ainsi : à partir de (4.1), on obtient ρ^- , puis à partir de (4.8), on obtient ρ . Les pressions de chaque fluide e^\pm découlent de (4.2)-(4.6), ce qui permet d'obtenir e (1.35).

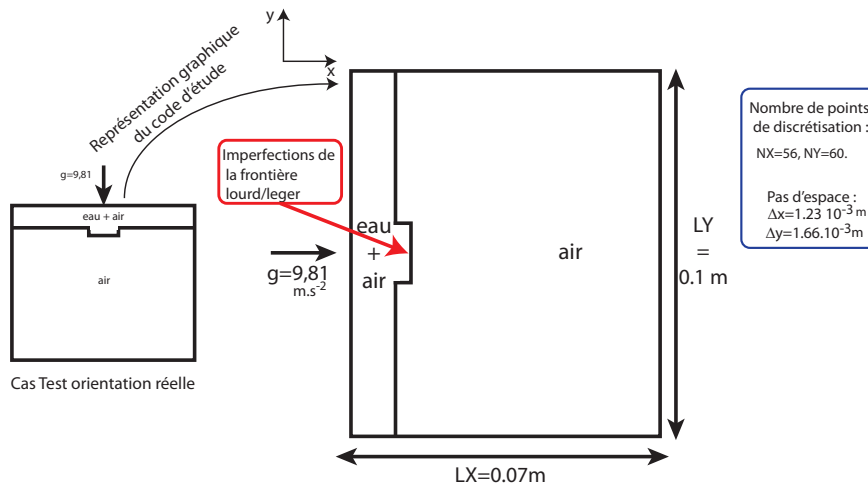


FIGURE 4.1 – Cas-tests de type “instabilité de type Rayleigh-Taylor”

Les résultats de cette simulation sont présentés dans la figure 4.2 où l'on peut observer le développement progressif de l'instabilité jusqu'à la formation d'un champignon de type Rayleigh-Taylor.

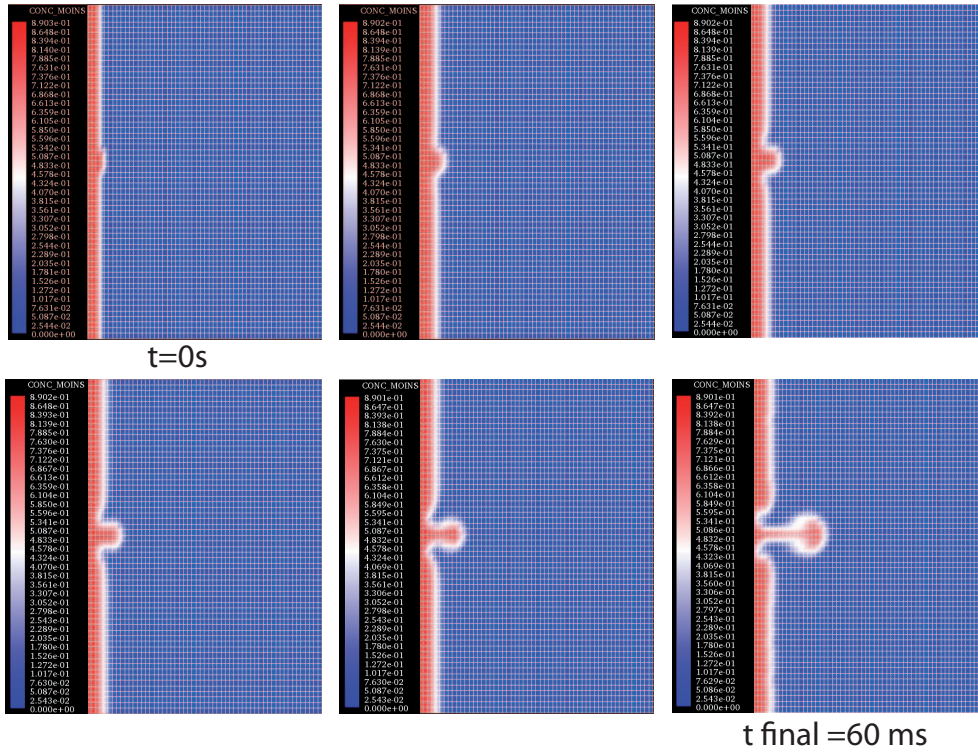


FIGURE 4.2 – La donnée d’un fluide lourd au dessus d’un fluide plus léger soumis à la gravité est instable : au fur et à mesure que le temps augmente, on voit l’instabilité initiale de la frontière se creuser de plus en plus jusqu’à former un champignon de type Rayleigh-Taylor. Le temps final est $t_{\text{final}} = 60\text{ms}$.

Le modèle HEM répond donc à l’instabilité lourd/léger soumis à la gravité par la formation de ce champignon qui prend naissance au niveau de l’imperfection de l’interface initiale. A l’initialisation, la pression est uniforme donc la vitesse relative (proportionnelle au gradient de pression) est nulle. Ensuite, au fur et à mesure que la pression se déstabilise, la vitesse relative s’enclenche et permet la formation du champignon.

Afin de s’assurer que ce comportement n’est pas dû à des effets du maillage, on relance la même simulation mais en perturbant plus la frontière (Fig. 4.3) : on observe alors que chaque perturbation de la frontière conduit à la formation d’un champignon.

4.2 Résultats des simulations eau/air barotropes

Dans cette section, toutes les équations d’état considérées sont barotropes, i.e. les lois de pression des deux fluides lourd et léger ne dépendent pas de l’énergie interne moyenne e du mélange. Ce choix d’équations d’état facilite les initialisations des cas-tests et permet de comparer les résultats du modèle HEM à des résultats issus d’autres codes. Avec de telles lois de pression, l’équation

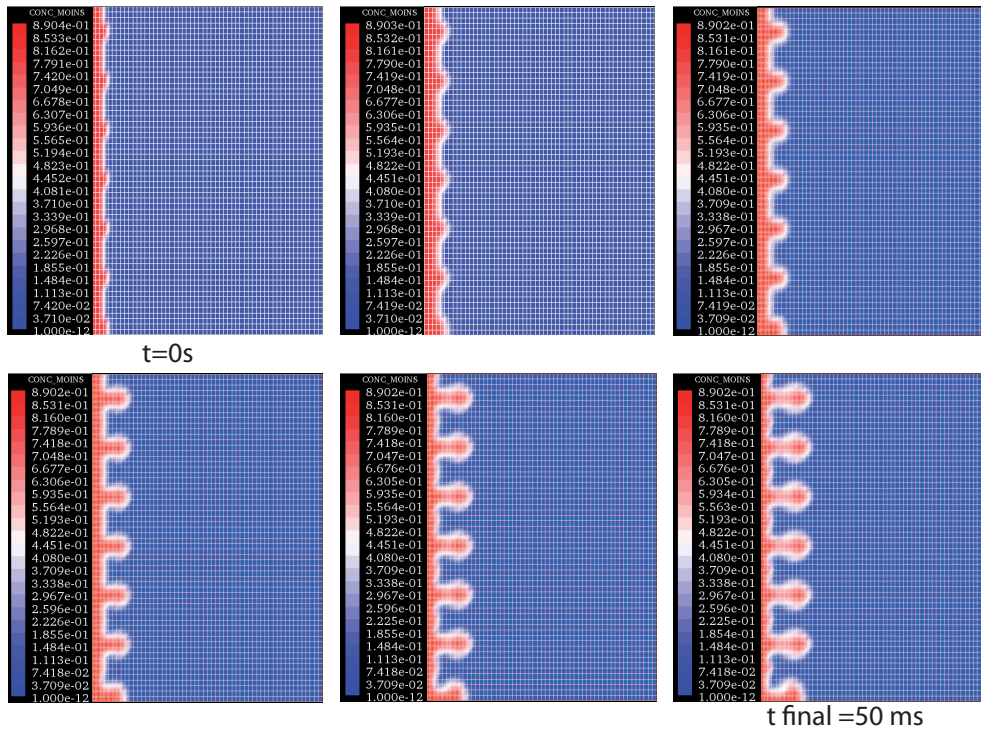


FIGURE 4.3 – La situation physique dans laquelle un fluide lourd est au dessus d’un fluide plus léger soumis à la gravité est instable : on a réparti 7 perturbations sur la frontière fluide lourd/fluide léger. Le code numérique répond bien à ces 7 instabilités par la formation de 7 champignons. Le temps final est à $t_{\text{final}} = 50\text{ms}$.

d’énergie est découplée des autres équations et on peut considérer (d’un point de vue dynamique) que le modèle HEM est ainsi constitué d’une équation sur la densité moyenne ρ , une sur la concentration relative c_r ainsi qu’une sur la vitesse moyenne u et une relation sur la vitesse relative u_r (l’équation en énergie interne n’intervient plus).

De plus, (pour le modèle HEM uniquement), la formule de coupure pour la vitesse relative n’est pas activée mais le limiteur MIN-MOD l’est quant à lui (cf. Remarque 2.1.7).

4.2.1 Comparaisons modèle HEM/ mélange classique pour des rayons de gouttelettes de plus en plus petits

L’objectif du cas-test qui suit est de vérifier le résultat que l’on a obtenu dans le chapitre précédent (sous-section 3.2) par un adimensionnement des équations du modèle HEM, à savoir que le modèle HEM dégénère vers le modèle de mélange classique (i.e. avec $u_r = 0$) lorsque les gouttelettes deviennent très petites (on rappelle que lorsque le rayon tend vers 0, la vitesse relative tend vers 0).

Pour faire ce test, on se donne une boîte de longueur 190 m par 100 m avec un nombre de mailles $NX = 152$ selon la direction x et un nombre de mailles

$NY = 60$ selon la direction y . Du fait de la symétrie, le cas que l'on considère est "quasi 1D". On impose une gravité constante à $9,81 \text{ m.s}^{-2}$, ainsi qu'une vitesse initiale nulle. Les conditions aux limites sont de type FLUX (à gauche et à droite) et de type MUR (en haut et en bas) (cf. Fig. 4.4).

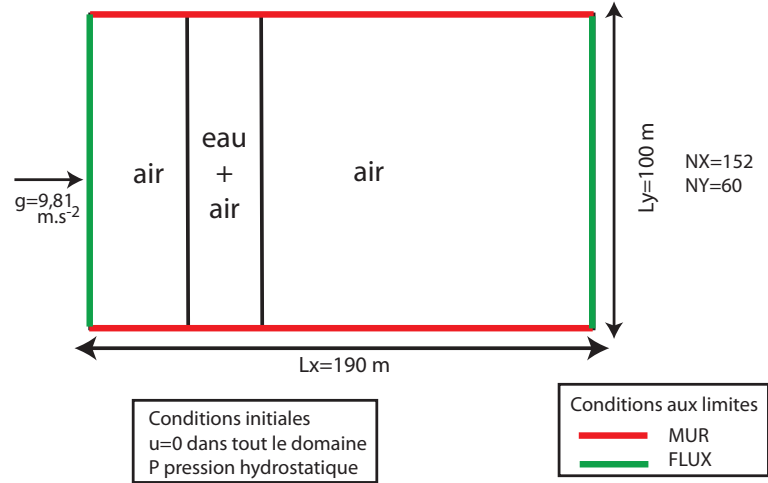


FIGURE 4.4 – Cas-test de comparaisons de l'évolution du modèle HEM lorsque la vitesse relative tend vers 0. Le cas est lancé avec une vitesse moyenne de mélange nulle dans tout le domaine et une pression hydrostatique sur le fluide léger : $p = P_0 + \rho^- gz$, où $P_0 = 10^5 \text{ Pa}$. Sur ce cas, on va pouvoir comparer le modèle de mélange classique avec le comportement du modèle HEM avec des rayons de gouttelettes de plus en plus petits (et donc des vitesses relatives de plus en plus petites). Le modèle de mélange classique n'est pas sensible au rayon des gouttelettes car celui-ci est pris en compte uniquement grâce à la vitesse relative du modèle HEM.

Sur ce cas, on va faire tourner le modèle de mélange classique avec une vitesse moyenne nulle jusqu'au temps $t_{\text{final}} = 20 \text{ s}$. On impose une pression hydrostatique p sur le fluide léger : $p = P_0 + \rho^- gz$. Ce modèle de mélange ne dépend pas du rayon moyen des gouttelettes et va donc nous servir de cas de référence. Ensuite, on va présenter les résultats obtenus avec le modèle HEM avec différents rayons moyens de gouttelettes.

– Equations d'état :

Il reste à définir le jeu d'équations d'état barotropes utilisé pour faire ce test. On a utilisé celui qui est défini dans [GDLP07] pour de l'eau faiblement compressible couplée à de l'air. Les équations d'état que l'on considère sont les suivantes :

$$\rho^- = \frac{p}{a_2^2}, \quad (4.10)$$

$$\rho^+ = \rho_L + \frac{p - P_0}{a_1^2}, \quad (4.11)$$

avec

$$P_0 = 10^5, \quad (4.12)$$

$$\rho_L = 1000 \text{ kg.m}^{-3}, \quad (4.13)$$

et a_1^2 et a_2^2 sont des constantes qui représentent la célérité du son de l'eau et de l'air respectivement (les constantes sont en S.I.). On pose $a_1 = 1486 \text{ m.s}^{-1}$ et $a_2 = 288,1952 \text{ m.s}^{-1}$. Dans le cadre de l'article de Guillard/Panescu *et al.* [GDLP07], ces équations d'état sont utilisées dans un cadre de modèles à deux pressions (i.e. avec une pression interfaciale), on conserve ces mêmes équations d'état dans nos modèles isobares.

La pression p du système est alors donnée en fonction des inconnues ρ et c_r connues au cours du temps via la résolution des équations d'évolution du modèle HEM. Elle vérifie :

$$p(\rho, c_r) = \frac{-\rho_L a_1^2 + P_0 + \rho[c^- a_2^2 + c^+ a_1^2] + \sqrt{\Delta}}{2}, \quad (4.14)$$

avec

$$\Delta = [\rho_L a_1^2 - 10^5 - \rho[c^- a_2^2 + c^+ a_1^2]]^2 - 4\rho_L a_2^2 c^- \rho[10^2 - a_1^2], \quad (4.15)$$

$$\text{et } c_{\pm} = \frac{1 \mp c_r}{2}. \quad (4.16)$$

En effet en utilisant la relation

$$\frac{1}{\rho} = \frac{c^+}{\rho^+} + \frac{c^-}{\rho^-}, \quad (4.17)$$

on obtient :

$$\rho^+ = c^+ \frac{\rho \rho^-}{\rho^- - c^- \rho}, \quad (4.18)$$

et de plus, d'après (4.11), on a :

$$p = P_0 + (\rho^+ - \rho_L) a_1^2. \quad (4.19)$$

En remplaçant dans (4.19), ρ^+ par son expression (4.18) et ensuite ρ^- par (4.10), la pression p est solution de l'équation du second degré suivante (dépendant des variables : ρ , c_r et des constantes a_1^2 , a_2^2 , P_0 et ρ_L) :

$$p^2 + \left(-a_2^2 c^- \rho - P_0 - c^+ \rho a_1^2 + \rho_L a_1^2 \right) p + a_2^2 P_0 c^- \rho - \rho_L a_1^2 a_2^2 c^- \rho = 0. \quad (4.20)$$

La solution (4.14) s'obtient comme solution de cette équation du second degré.

– Initialisation du cas :

A l'initialisation, on définit la densité du fluide léger ρ^- , comme étant :

$$\rho^- = \frac{P_0}{a_2^2 - gz}, \quad (4.21)$$

afin de vérifier à la fois l'équation d'état (4.10) et la condition de pression hydrostatique :

$$p = P_0 + \rho^- gz. \quad (4.22)$$

Ensuite, on se donne une concentration de fluide lourd c^+ dans la zone de mélange lourd/léger ce qui permet d'avoir immédiatement $c^- = 1 - c^+$. Comme ρ^+ est défini par la pression p (4.11), cela permet d'obtenir ρ grâce à (4.17). La vitesse de mélange est choisie nulle dans tout le domaine. La seule différence entre la simulation de mélange classique et les simulations HEM est le calcul de la vitesse relative (dans ce dernier cas fonction de la valeur du rayon moyen imposée).

On observe dans la figure suivante (Fig.4.5), les résultats obtenus avec exactement la même initialisation pour les deux modèles : une pression hydrostatique et une concentration d'eau c^+ identiques ainsi qu'une vitesse moyenne u nulle. Dans le cadre HEM (uniquement), le gradient de pression induit par la pression hydrostatique induit une vitesse relative u_r non nulle dont la valeur dépend du rayon moyen de gouttelettes indiqué lors de l'étape d'initialisation. Plus le rayon des gouttelettes est petit, plus la valeur de la vitesse relative est faible. On observe que les résultats obtenus avec le modèle HEM diffèrent nettement des résultats obtenus avec le modèle de mélange classique lorsque le rayon moyen des gouttelettes vaut $r_{moy} = 5.10^{-5}$ m : on voit dans ce cas que la vitesse relative enclenche le mouvement des gouttelettes. Par contre, avec un rayon inférieur ($r_{moy} = 1.10^{-5}$ m), le modèle HEM se comporte de la même manière que le modèle de mélange classique, en diffusant en fait un peu plus. Ceci était prévisible car les termes dans l'équation en vitesse sont des termes diffusifs (1.121).

Avec ce cas-test, on a pu vérifier le résultat de la sous-section du chapitre précédent (sous-section 3.2) : lorsque $u_r \rightarrow 0$, le modèle HEM dégénère vers le modèle de mélange classique.

4.2.2 Cas de gouttelettes d'eau soumises à un vent latéral et à la gravité

Un cas intéressant à modéliser en utilisant les équations du modèle HEM est celui de gouttelettes d'eau suivant le flot induit par un vent latéral, mais dans lequel il existe un différentiel de vitesse entre le vent (fluide léger) et les gouttelettes (fluide lourd) dû aux effets de la gravité et de la pression hydrostatique. Ce problème permet de tester le modèle HEM avec à la fois une vitesse moyenne u mais aussi une vitesse relative u_r non nulle. La vitesse du vent est représentée

par la vitesse moyenne du mélange tandis que la vitesse relative sera induite par un gradient de pression : dans ce cas, on suppose que les gouttelettes et le vent sont à l'équilibre selon la direction y mais pas selon la direction x , i.e. celle de la gravité. Dans la figure 4.6, on décrit le cas que l'on considère : la boîte est toujours de taille $190 \text{ m} \times 100 \text{ m}$, le nombre de points selon x est : $NX = 152$ et suivant y : $NY = 60$. Des gouttelettes d'eau sont disposées dans de l'air (le vent) en mouvement dans tout le domaine.

Equations d'état : le jeu d'équations d'état barotropes utilisé pour faire ce cas-test correspond à des gouttelettes d'eau incompressibles couplées à de l'air :

$$\rho^- = \frac{p}{a_2^2}, \quad (4.23)$$

$$\rho^+ = 1000 \text{ kg.m}^{-3}. \quad (4.24)$$

a_2 est toujours constant et représente la célérité de l'air :

$$a_2 = 288,1952 \text{ m.s}^{-1}. \quad (4.25)$$

Initialisation : Dans ce cas, on impose initialement une pression hydrostatique sur le fluide léger : $p = P_0 + \rho^- gz$ avec P_0 la pression standard : $P_0 = 10^5 \text{ Pa}$, qui donne la densité du fluide léger ρ^- avec l'équation d'état vérifiée par celui-ci (4.23) :

$$\rho^- = \frac{P_0}{a_2^2 - gz}. \quad (4.26)$$

La concentration de fluide lourd dans les mailles concernées est imposée à $c^+ = 8,6 \cdot 10^{-2}$, ce qui permet d'en déduire la densité du mélange ρ à l'aide de (1.36) car $\rho^+ = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$. Les résultats obtenus vont être comparés à ceux que l'on obtient avec deux autres codes d'étude du CEA : le premier simule le modèle de mélange classique (isobare-isotherme sans vitesse relative), le second un couplage gaz-particules (modèle de spray).

L'initialisation pour les vitesses est différente selon les modèles :

– Initialisation du modèle HEM :

La vitesse moyenne de mélange vaut $u_y = -4,04 \text{ m.s}^{-1}$ pour simuler un vent latéral (la composante selon x est nulle). On se donne de plus un rayon moyen de gouttelettes de : $r_{moy} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, ce qui induit une vitesse relative (créée par le gradient de pression dû à la pression hydrostatique) : $u_{r_x} = -3,64 \text{ m.s}^{-1}$ (la composante selon y est nulle).

– Initialisation du modèle de mélange classique :

Cette initialisation est identique à celle du modèle HEM, hormis que la vitesse relative u_r n'existe pas.

– Initialisation du modèle de sprays :

Afin d'effectuer les comparaisons, il est important de faire une initialisation qui soit équivalente à celle faite pour le modèle HEM. Avec le code de

sprays, on ne suit plus une vitesse moyenne de mélange u et une vitesse relative u_r mais une vitesse de fluide léger u^- , ainsi que les vitesses de chaque gouttelette présentes dans les mailles de mélange (qui remplacent le fluide lourd) de la figure 4.6. Pour faire la suite de l'initialisation, on suppose que toutes les gouttelettes sont à la même vitesse u^+ . On repart des définitions de la vitesse moyenne (1.32) et vitesse relative (1.38) du modèle HEM :

$$u_r = u^- - u^+, \quad (4.27)$$

$$u = c^+u^+ + c^-u^-. \quad (4.28)$$

Comme $u_{r_y} = 0 \text{ m.s}^{-1}$, à partir de (4.27), on déduit que :

$$u_y^+ = u_y^-. \quad (4.29)$$

Ainsi comme $c^+ + c^- = 1$, on a à partir de (4.28) :

$$u_y^- = u_y^+ = u_y = -4,04 \text{ m.s}^{-1}. \quad (4.30)$$

Enfin, pour les vitesses selon la direction x , on choisit (pour des raisons liées à l'initialisation du code de sprays) de laisser la vitesse du gaz nulle dans cette direction : $u_x^- = 0 \text{ m.s}^{-1}$ et la vitesse des gouttelettes est uniformément mise à :

$$u_x^+ = -u_{r_x} = 3,64 \text{ m.s}^{-1}. \quad (4.31)$$

Pour ce cas-test, on s'attend à voir les effets conjoints d'un vent latéral et de la différence de pression sur le fluide de gouttelettes ; les gouttelettes vont être poussées vers la gauche (i.e. le bas sur la représentation graphique) pour le premier et vers le bas (donc la droite sur la représentation graphique) pour le second. On s'attend à observer un mouvement en diagonale du fluide lourd.

Remarque 4.2.1 *Les codes de mélange HEM et de sprays ne prenant pas en compte la même physique, les comparatifs que l'on veut faire sont qualitatifs et non quantitatifs : on veut observer le même comportement global du fluide de gouttelettes.*

Dans la figure 4.7, on présente les courbes obtenues avec le modèle HEM : les gouttelettes évoluent bien en diagonale et subissent l'effet de la gravité et du vent latéral.

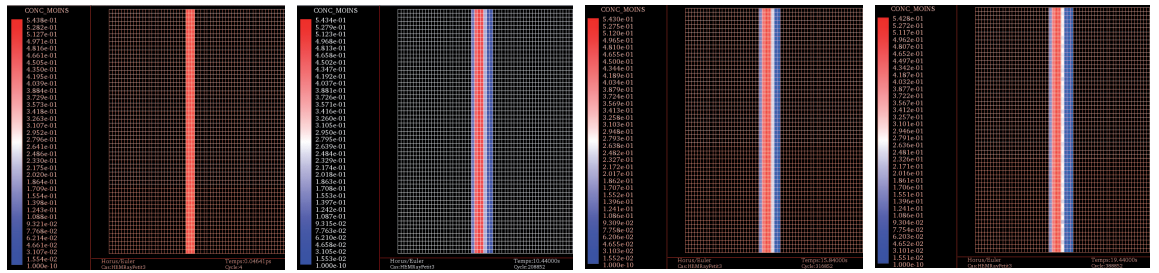
La figure 4.8 permet de visualiser les résultats obtenus avec le modèle de mélange classique isobare/isotherme (mais sans vitesse relative) : le fluide lourd subit d'abord uniquement les effets du vent latéral avant d'être aussi poussé par la gravité. Dans la figure 4.9, les courbes obtenues l'ont été avec le code gaz-particules (sprays) : les gouttelettes suivent le même mouvement global mais par contre, la vitesse d'évolution n'est pas tout à fait la même.

A noter que les images des trois dernières figures (Fig. 4.7 à 4.9) sont prises au même instant pour chaque modèle.

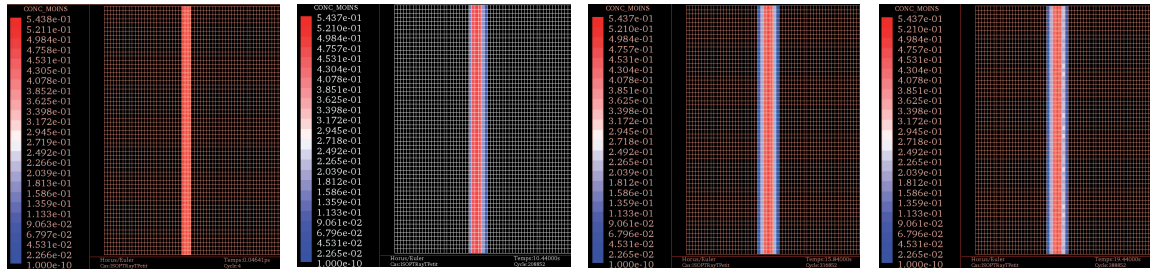
Dans les modèles de drift, la difficulté réside dans l'obtention d'une formule approchée pour la vitesse relative. Le coefficient devant le gradient de pression dans la formule (1.123) n'est pas connu de manière exacte. On voit dans la figure 4.10 qu'en multipliant le coefficient devant la vitesse relative u_r par $1/2$ (ceci revient à modifier le terme de traînée tout en conservant le même ordre de grandeur), les résultats obtenus avec le modèle HEM et celui de spray donnent des résultats similaires. En effet, dans cette figure, on compare à un temps fixé le code de spray, le code HEM et le code HEM dans lequel la formule de vitesse relative (1.123) a été multipliée par un facteur $1/2$. Les simulations obtenues avec le modèle HEM sont bien en accord avec celles obtenues avec le code de spray, en modifiant le facteur devant la formule de vitesse relative : les vitesses d'évolution du fluide lourd restent comparables qualitativement.

Dans ce chapitre, on a pu comparer le modèle HEM qui permet de prendre en compte une vitesse relative entre les phases avec deux autres codes à disposition. L'intérêt du modèle HEM est de pouvoir considérer des cas où l'équilibre en vitesse entre les phases n'est pas atteint. Les simulations que l'on a effectuées permettent de valider qualitativement notre modèle : il permet de reproduire le même comportement du fluide lourd que celui obtenu avec un code de sprays (sous-section 4.2.2). On a aussi pu observer que le modèle HEM dégénérerait bien vers le modèle de mélange sans vitesse relative en faisant tendre le rayon moyen des gouttelettes vers 0, ce qui permet de valider le résultat obtenu à la fin du chapitre 3.

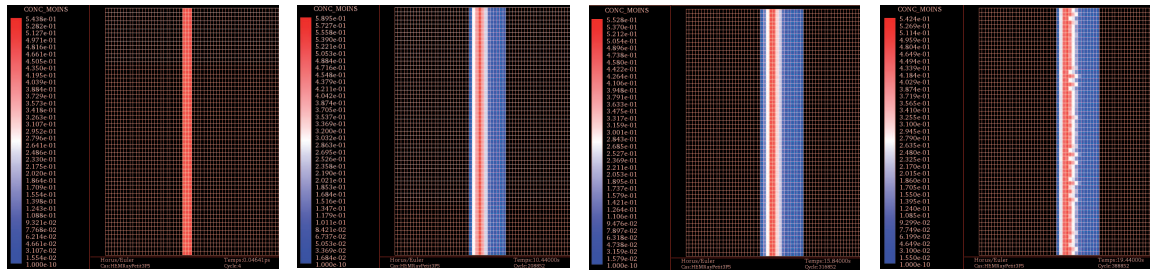
Par la suite, il serait intéressant de comparer les résultats obtenus avec le schéma BBC-HEM sur une solution stationnaire $1D$ du jeu d'équations (1.119)-(1.132).



(a) Cas du mélange classique.



(b) Cas du mélange HEM $r_{moy} = 1.10^{-5}$ m.



(c) Cas du mélange HEM $r_{moy} = 5.10^{-5}$ m.

FIGURE 4.5 – Evolution de la concentration de fluide lourd avec le modèle de mélange classique d’une part et le modèle HEM utilisé avec différentes valeurs de rayon moyen d’autre part. Le gradient de pression n’est pas "vu" par le modèle de mélange classique. Par contre, pour le modèle HEM, avec un rayon moyen de gouttelettes suffisant ($r_{moy} = 5.10^{-5}$ m), la vitesse relative induite est suffisante pour que l’on observe un comportement spécifique. Pour ce qui est du même modèle HEM, mais avec un rayon plus faible ($r_{moy} = 1.10^{-5}$ m), il induit une vitesse relative petite et un comportement proche de celui du modèle de mélange classique.

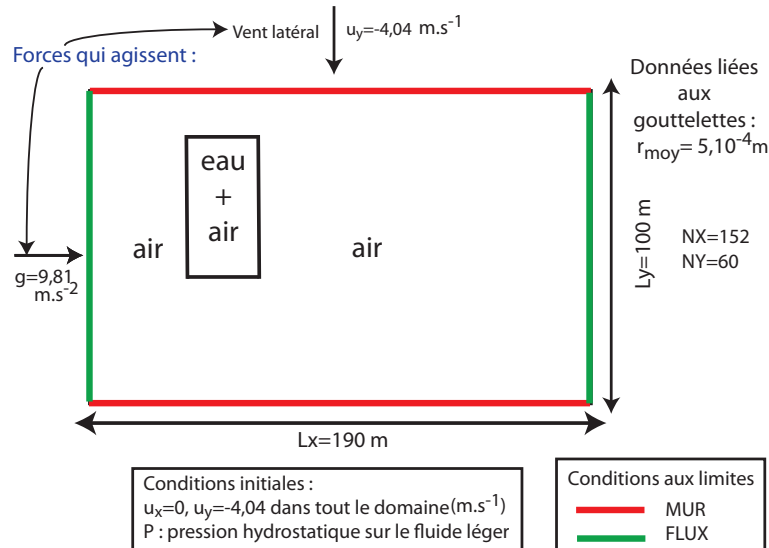


FIGURE 4.6 – Cas correspondant à des gouttes de pluie soumises à un vent et à la gravité. Le cas est lancé avec une vitesse moyenne de mélange $u_y = -4,04 \text{ m.s}^{-1}$ dans tout le domaine et une pression hydrostatique sur le fluide léger : $p = P_0 + \rho^- gz$, où $P_0 = 10^5 \text{ Pa}$. Sur ce cas, on va comparer les résultats obtenus avec le modèle HEM, le modèle de mélange classique mais aussi un code basé sur un couplage gaz-particules (modèle de sprays).

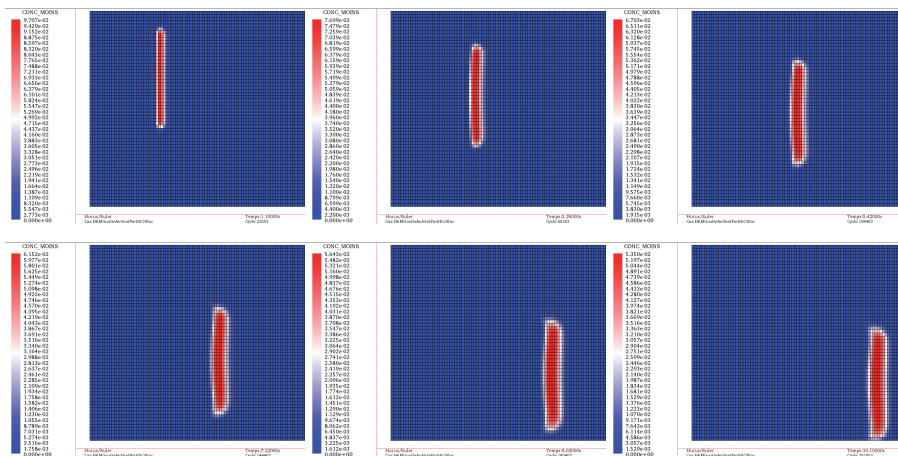


FIGURE 4.7 – Simulation de gouttes de pluie soumises à un vent latéral et aux effets de la gravité, modèle HEM. Les gouttelettes sont poussées vers le bas à cause du vent et vers la droite à cause de la gravité. La diffusion du modèle étale un peu le rectangle initial de gouttelettes.

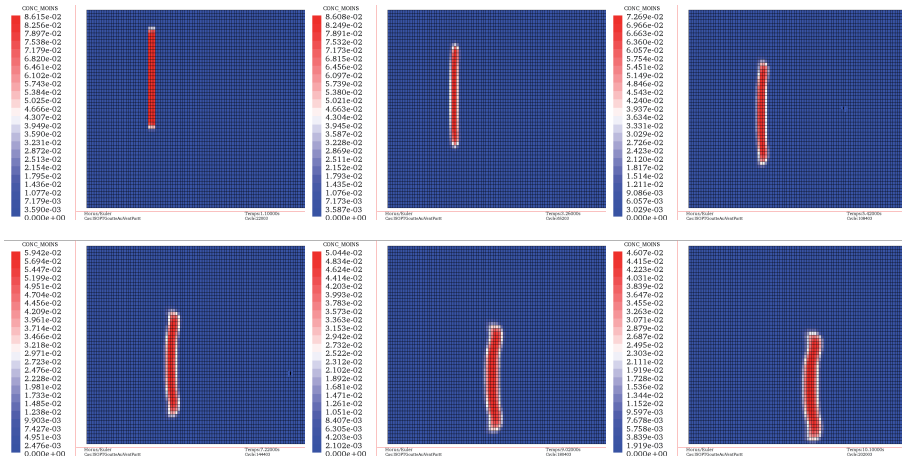


FIGURE 4.8 – Simulation de gouttes de pluie soumises à un vent latéral et aux effets de la gravité, modèle mélange isobare/isotherme (sans vitesse relative). Les gouttelettes sont poussées d’abord uniquement vers le bas à cause du vent avant de subir les effets de la gravité.

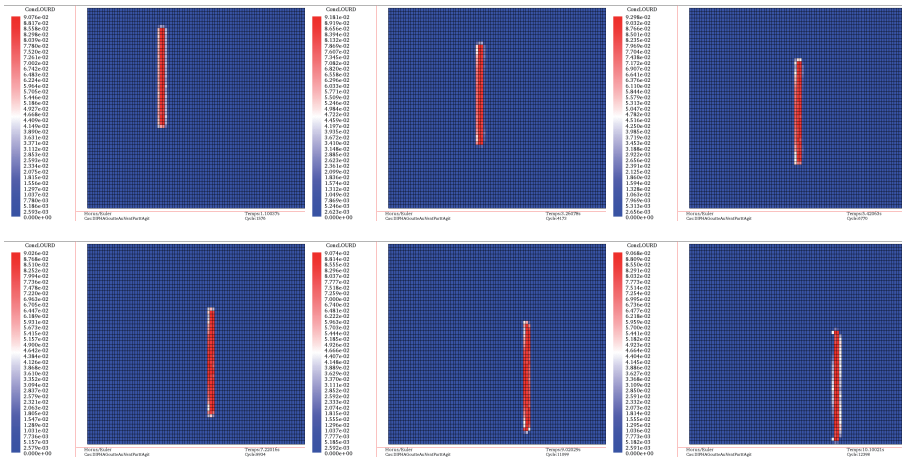
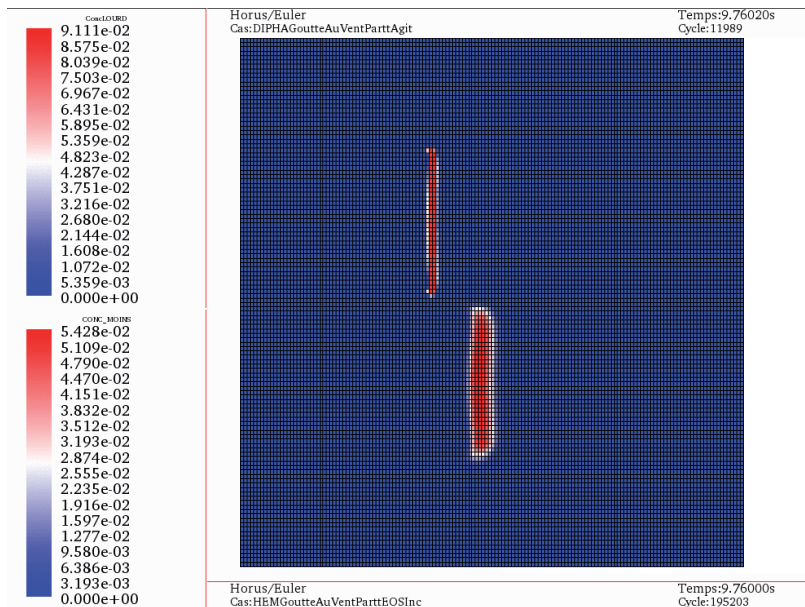
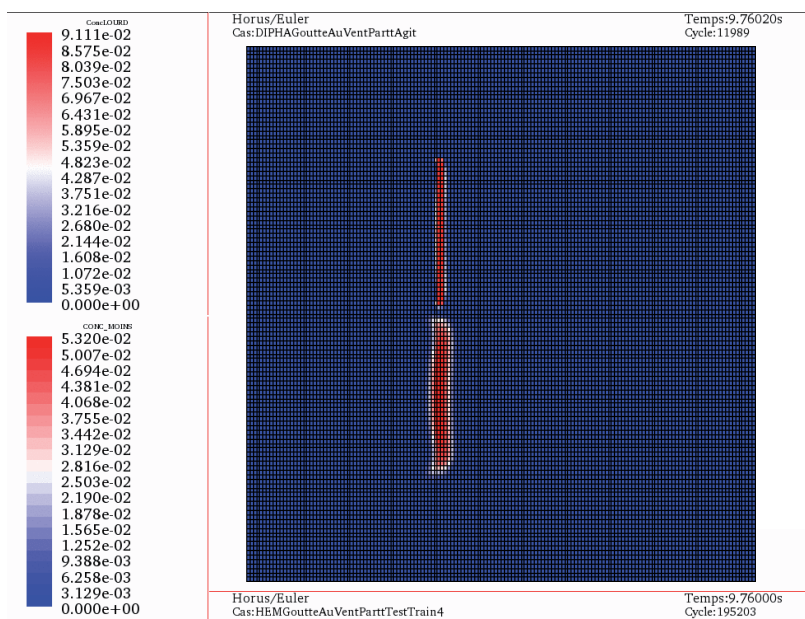


FIGURE 4.9 – Simulation de gouttes de pluie soumises à un vent latéral et aux effets de la gravité, lancé avec le modèle de sprays. Les gouttelettes sont, comme avec le modèle HEM, poussées vers le bas à cause du vent et vers la droite à cause de la gravité et suivent la même trajectoire. La vitesse d’avancée des gouttelettes n’est par contre pas identique.



(a) Comparaison à un temps donné spray/HEM.



(b) Comparaison à un temps donné spray/HEM avec la vitesse relative corrigée d'un facteur $\frac{1}{2}$.

FIGURE 4.10 – Chaque figure (Fig. 4.10(a) et 4.10(b)) est constituée de deux cas : au dessus le code de spray, en dessous (avec rotation de 180°) le modèle HEM. Les images sont toutes trois prises à $t = 9,76$ s. Dans la première (Fig. 4.10(a)), on constate que le modèle HEM a un peu d'avance sur le modèle de spray mais on voit que si on modifie la vitesse relative du modèle HEM par un facteur $\frac{1}{2}$ (Fig. 4.10(b)), alors les deux modèles ont la même avancée pour ce temps (avec toujours pour le modèle HEM de la diffusion).

Deuxième partie

Un modèle simplifié de
l'équation de Boltzmann
homogène

CHAPITRE 5

Le modèle de type BGK pour la résolution de l'équation de Boltzmann homogène

Suit l'article relatif au modèle simplifié utilisé pour résoudre les collisions entre les particules publié dans la revue *Rivista di Matematica della Università di Parma* 2010 :

A BGK-TYPE MODEL FOR INELASTIC BOLTZMANN EQUATIONS WITH INTERNAL ENERGY

AUDE CHAMPMARTIN, LAURENT DESVILLETES, AND JULIEN MATHIAUD

ABSTRACT. We introduce a model of inelastic collisions for droplets in a spray, leading to a specific Boltzmann kernel. Then, we build caricatures of this kernel of BGK type, in which the behavior of the first moments of the solution of the Boltzmann equation (that is, mass, momentum, directional temperatures, variance of the internal energy) are mimicked. The quality of these caricatures is tested numerically at the end of the paper.

1. INTRODUCTION

Sprays are flows in which a dispersed phase (e.g. droplets) is surrounded by a gas. Such flows can be found in natural phenomena, like for example clouds. They also appear in many industrial devices, like diesel engines, fluidized beds, etc. We refer to [Wil85, AOB89, O'R81] for an introduction to the study of this kind of flows. When the dispersed phase occupies a significant part of the total volume, one must take into account the collision phenomena (like in [AOB89]), that is, droplets can meet, remain in contact for some time, and then separate again.

Those droplets are characterized by their radius $r > 0$, their position $x \in \Omega$ (domain of computation), their velocity $v \in \mathbb{R}^3$, and their internal energy (by unit of mass) $e > 0$ [some other parameters are sometimes taken into account, like the distortion of the droplets, Cf. [AOB89, O'R81], etc.]. We restrict ourselves in this paper to so-called monodisperse sprays, where all droplets have the same radius $r > 0$.

During a collision, two droplets are in contact and therefore exchange some internal energy. Moreover, the droplets being macroscopic objects, part of the kinetic energy (in the center of mass reference frame) is transformed in internal energy (that is, the collisions are inelastic).

A standard model for inelastic collisions (Cf. [BCG00, BGP04, Vil06] for example in the context of granular gases) consists in writing

$$(1) \quad v' = \frac{v + v^*}{2} + \frac{1 - \gamma}{4}(v - v^*) + \frac{1 + \gamma}{4}|v - v^*|\sigma,$$

$$(2) \quad v'^* = \frac{v + v^*}{2} - \frac{1 - \gamma}{4}(v - v^*) - \frac{1 + \gamma}{4}|v - v^*|\sigma,$$

where $v, v^* \in \mathbb{R}^3$ are precollisional velocities, $v', v'^* \in \mathbb{R}^3$ are postcollisional velocities, $\gamma \in [0, 1]$ is the inelasticity parameter, and σ is parametrizing the sphere S^2 .

The kinetic energy lost (by unit of mass) in (1), (2) is given by

$$(3) \quad \Delta E'_c = (1 - \gamma^2) \frac{|v - v^*|^2}{8} - \frac{1 - \gamma^2}{8} |v - v^*| \langle \sigma, v - v^* \rangle,$$

where $\langle \cdot, \cdot \rangle$ is the scalar product in $3D$: $\langle x, y \rangle := \sum_{i=1}^3 x_i y_i$.

The exchange of internal energy is then simply modelled by the equations

$$(4) \quad e' = \frac{2-a}{2}e + \frac{a}{2}e^* + \frac{1}{2}\Delta E'_c,$$

$$(5) \quad e'^* = \frac{a}{2}e + \frac{2-a}{2}e^* + \frac{1}{2}\Delta E'_c,$$

where $e, e^* > 0$ are precollisional internal energies, $e', e'^* > 0$ are postcollisional internal energies, and $a \in [0, 1]$ is the parameter which characterizes the typical time scale of the exchange.

Note that the kinetic energy lost in (1), (2) is equally distributed between the energies e' and e'^* .

In all generality, both γ and a are functions of $|v - v^*|$ which sometimes can be assessed (Cf. [Mat06], [DM10]).

The corresponding Boltzmann operator Q can be written in weak form according to the following formula (for all function ψ for which the integrals make sense)

$$(6) \quad \int_v \int_e Q(f, f)(v, e) \psi(v, e) dv de$$

$$= \int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} \int_\sigma f(v, e) f(v^*, e^*) [\psi(v', e') - \psi(v, e)] r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dv de dv^* de^* d\sigma,$$

(7)

where

$$(8) \quad \tilde{S}(w) = w$$

corresponds to the cross section of hard spheres, and $r > 0$ is the radius of the droplets.

Note that by taking $\psi(v, e) = 1; v_i; \frac{|v|^2}{2} + e$, we obtain the conservation of mass, (i^{th} component of the) momentum, and total (kinetic + internal) energy:

$$(9) \quad \int_v \int_e Q(f, f) \begin{pmatrix} 1 \\ (v_i)_{i=1,2,3} \\ \frac{|v|^2}{2} + e \end{pmatrix} dv de = 0.$$

We also briefly indicate here the strong formulation of Q [in the case of hard spheres], which makes explicit the Jacobian of the transformation $(v, v^*, e, e^*) \mapsto (v', v'^*, e', e'^*)$, but which is not used in the sequel (cf. [Vil06] for more on the Jacobian):

$$Q(f, f)(v, e) =$$

$$\int_v \int_e \int_\sigma \left(J_{(v, v^*, e, e^*) \rightarrow (v', v'^*, e', e'^*)} \frac{|v - v^*|}{|v - v'^*|} f(v', e') f(v'^*, e'^*) \right.$$

$$\left. - f(v^*, e^*) f(v, e) \right) r^2 |v - v^*| d\sigma dv de$$

$$= \int_v \int_e \int_\sigma \left(\frac{1}{\gamma^2} \frac{1}{1-a} f(v', e') f(v'^*, e'^*) - f(v^*, e^*) f(v, e) \right) r^2 |v - v^*| d\sigma dv de.$$

(10)

The Jacobian J is composed of a part $(\frac{1}{\gamma^2} \frac{|v - v^*|}{|v - v'^*|})$ which is typical of the inelastic collision kernels ([GPV04, Vil02]), and of another part $(\frac{1}{1-a})$ which comes from the exchanges of internal energies. In (10) is used the following shorthand (related to precollisional velocities, Cf. [Mat06], [DM10])

$$(11) \quad v' = \frac{v + v^*}{2} - \frac{1 - \gamma}{4\gamma}(v - v^*) + \frac{1 + \gamma}{4\gamma}|v - v^*|\sigma,$$

$$(12) \quad v'^* = \frac{v + v^*}{2} + \frac{1 - \gamma}{4\gamma}(v - v^*) - \frac{1 + \gamma}{4\gamma}|v - v^*|\sigma,$$

$$(13) \quad 'e = \frac{2-a}{2-2a}e - \frac{a}{2-2a}e^* + \frac{1}{2}\Delta'E_c,$$

$$(14) \quad 'e^* = -\frac{a}{2-2a}e + \frac{2-a}{2-2a}e^* + \frac{1}{2}\Delta'E_c,$$

$$(15) \quad \Delta'E_c = \frac{1-\gamma^2}{8\gamma^2}|v-v^*|^2 - \frac{1-\gamma^2}{8\gamma^2}|v-v^*| \langle \sigma, v-v^* \rangle.$$

In many instances, the Knudsen number related to the droplets in a spray is small (Cf. [Mat06], [DM10]), so that the number of collisions to perform in a computation is quite high, and the treatment of Q sometimes requires a large part of the time spent in the computation (up to an increase of more than 100%).

As a consequence, one needs simplified models of collision, which lead to less expensive computations, but keep some of the main features of the original model (10) – (15).

This problem has already been studied by many authors in the case of the elastic Boltzmann operator for rarefied gases, and has led to various models, among which the BGK model (Cf. [BGK54]) and the ESS model (Cf. [LHH66]). These models have been adapted to the case of inelastic Boltzmann kernels for granular media (Cf. [AS04], [MA00], [San03]), and to the case of Boltzmann kernels taking into account chemical reactions (Cf. [CGS07], [GK02], [GS99]).

The simplified model that we propose writes

$$(16) \quad \partial_t f + \nabla_v \cdot (c_1 f(v - v_{\text{avr}})) + \partial_e(c_2 f) + \partial_e(c_3(e - e_{\text{avr}})f) \\ + \partial_e(c_4 |v - v_{\text{avr}}|^4 \partial_e f) = -\nu(f - f_0),$$

where v_{avr} is the mean velocity

$$(17) \quad v_{\text{avr}} = \frac{\int_v \int_e f(t, v, e) v dv de}{\int_v \int_e f(t, v, e) dv de},$$

e_{avr} is the mean internal energy

$$(18) \quad e_{\text{avr}} = \frac{\int_v \int_e f(t, v, e) e dv de}{\int_v \int_e f(t, v, e) dv de},$$

f_0 is the Maxwellian function of v with the same parameters as f

$$(19) \quad f_0(t, v, e) = \left(\frac{1}{2\pi T(t)} \right)^{3/2} e^{-\frac{|v-v_{\text{avr}}|^2}{2T(t)}} \int_w f(t, w, e) dw,$$

and T is the statistical temperature:

$$(20) \quad T(t) = \frac{1}{3} \frac{\int_v \int_e f(t, v, e) |v - v_{\text{avr}}|^2 dv de}{\int_v \int_e f(t, v, e) dv de}.$$

It combines:

- a drift towards the mean velocity $\nabla_v \cdot (f(v - v_{\text{avr}}))$, which enables to model the inelasticity (loss of kinetic energy) coupled with a term which ensures the conservation of total energy ($\partial_e f$),
- a relaxation towards a Maxwellian distribution $-\nu(f - f_0)$,
- a drift towards the mean internal energy $\partial_e((e - e_{\text{avr}})f)$, which models the exchange of internal energies during collisions,
- a diffusive term $\partial_e(|v - v_{\text{avr}}|^4 \partial_e f)$ coming from the fact that some diffusion w.r.t. internal energy appears when part of the kinetic energy is transformed into internal energy. Note that the term $|v - v_{\text{avr}}|^4$ naturally appears by homogeneity if we want c_4 to be the inverse of a time.

The parameters c_1, c_2, c_3, c_4, ν are defined by

$$(21) \quad c_1 = \frac{3S_1(t)}{8r} \left[-1 + \frac{\gamma}{2} + \gamma^2 \right] (1 - \alpha),$$

$$(22) \quad c_2 = -\frac{9S_1(t)}{8r} \left[-1 + \frac{\gamma}{2} + \gamma^2 \right] (1 - \alpha) T(t),$$

$$(23) \quad c_3 = -\frac{3S_2(t)}{4r} a(2 - a)(1 - \alpha),$$

$$(24) \quad c_4 = -\frac{S_3(t)}{32r} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha),$$

$$(25) \quad \nu = \frac{3S_1(t)}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha),$$

where S_1, S_2, S_3 depend on the type of collision kernel:

- In the case of Maxwell molecules that is, when $\tilde{S}(|v - v^*|) = S$ is a constant in (7), we take $S_1(t) = S_2(t) = S_3(t) = S$;
- In the case of hard spheres (that is, when $\tilde{S}(|v - v^*|) = |v - v^*|$), we take

(26)

$$S_1 = \sqrt{\frac{3(\tilde{T}_{11}^2 + \tilde{T}_{22}^2 + \tilde{T}_{33}^2) + 2(\tilde{T}_{11}\tilde{T}_{22} + \tilde{T}_{22}\tilde{T}_{33} + \tilde{T}_{11}\tilde{T}_{33})}{9T^2}} \sqrt{6T},$$

(27)

$$S_2 = \frac{4\sqrt{T}}{\sqrt{\pi}},$$

(28)

$$S_3 = \frac{32\sqrt{T}}{5\sqrt{\pi}}.$$

Here, the \tilde{T}_{ii} are the eigenvalues of the matrix made out of the T_{ij} , which are the directional temperatures:

$$(29) \quad T_{ij}(t) = \frac{\int_v \int_e f(v_i - v_{i\text{avr}})(v_j - v_{j\text{avr}}) dv de}{\int_v \int_e f dv de}; \quad i, j = 1, 2, 3$$

and α is the volume fraction of gas in the spray:

$$(30) \quad 1 - \alpha(t) = \int_v \int_e f(t, v, e) \frac{4}{3} \pi r^3 dv de.$$

Those coefficients are chosen in such a way that the main properties of the kernel Q (conservation of mass, momentum, total energy) are satisfied, and that some typical quantities (kinetic energy, directional temperatures, variance of the internal energy) have a behavior which is as close as possible to the original kernel Q .

Their choice can be made in an almost completely rational way when one wishes to mimic a kernel with a cross section of Maxwell molecules type (that is, when one chooses \tilde{S} as a constant function instead of (8)). Unfortunately, in the (much more realistic) case of hard spheres (that is, when \tilde{S} is given by (8)), this choice is made after some approximations which are not always valid, and other choices of coefficients are possible (we shall discuss this point in subsection 2.3).

This paper is built as follows: first, in Section 2, we consider a solution f of the Boltzmann equation $\partial_t f = Q(f, f)$, and we compute the value of various moments (like T_{ij} (29)). This computation is exact (except for the variance of internal energy) when hard spheres are replaced

by Maxwell molecules, but can only be an approximation in the realistic case of hard spheres. The difficulties related to the treatment of hard spheres [that is, the link between S_1 , S_2 , S_3 and \tilde{S}] are discussed in subsection 2.3.

Then, the same computation is repeated in section 3 for the simplified model (16) – (19), with arbitrary coefficients c_1, \dots, c_4, ν . This enables the identification of the coefficients (formulas (21) to (25)).

Section 4 is devoted to the numerical simulations and comparisons between the simplified and original model. In subsection 4.1 is presented the numerical (particle Monte Carlo) scheme used to solve (16) – (19). Then, comparisons when \tilde{S} is constant (case of Maxwell molecules) are shown in subsection 4.2, while the case of hard spheres is treated in subsection 4.3. Finally, we provide in subsection 4.4 some results when a and γ depend on $|v - v^*|$.

2. EVOLUTION OF SOME MOMENTS OF THE SOLUTION OF BOLTZMANN EQUATION

We consider in this section a solution f of the spatially homogeneous Boltzmann equation

$$(31) \quad \partial_t f = Q(f, f),$$

where Q is the kernel defined in (1) – (7) [or (10) – (15)].

We want to track the following moments in order to build our simplified model:

- The directional temperatures T_{ij} defined by (29),
- The variance of the internal energy

$$(32) \quad g(t) := \frac{\int_v \int_e f(e - e_{avr})^2 dvde}{\int_v \int_e f dvde}.$$

2.1. Computation of some moments of the collision kernel in the case of Maxwell molecules.

In next proposition, we denote by

$$(33) \quad M_0 = \int_v \int_e m f dvde$$

the total mass of the spray (where m is the mass of a droplet).

Proposition 2.1. *We consider Q defined in (1) – (7), in the case when $\tilde{S}(|v - v^*|) := S$ is a constant function of the relative velocity (case of Maxwell molecules). The following identities hold (provided that f is a smooth enough nonnegative function of v)*

- For $i, j = 1, 2, 3$, $i \neq j$,

$$(34) \quad \int_v \int_e Q(f, f) m(v_i - v_{iavr})(v_j - v_{javr}) dvde = \frac{3S}{r} \left[-\frac{3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha) M_0 T_{ij},$$

- For $i = 1, 2, 3$,

$$(35) \quad \int_v \int_e Q(f, f) m(v_i - v_{iavr})^2 dvde = \frac{3S}{r} \left[-\frac{3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha) M_0 T_{ii} \\ + \frac{3S}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha) M_0 T,$$

•

$$\begin{aligned}
(36) \quad & \int_v \int_e Q(f, f) m(e - e_{avr})^2 dvde = \\
& - \frac{3S}{2r} a(2-a)(1-\alpha) M_0 g \\
& + \pi r^2 \frac{(1-\gamma^2)S}{4} \iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* m(e + e^* - 2e_{avr}) |v - v^*|^2 dvdedv^* de^* \\
& + \pi r^2 \frac{(1-\gamma^2)^2 S}{48} \iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* m |v - v^*|^4 dvdedv^* de^*.
\end{aligned}$$

Eq. (36) can be simplified if f is a tensor product (as a function of v and e) in the following way:

$$\begin{aligned}
(37) \quad & \int_v \int_e Q(f, f) m(e - e_{avr})^2 dvde = \\
& - \frac{3S}{2r} a(2-a)(1-\alpha) M_0 g \\
& + \pi r^2 \frac{(1-\gamma^2)^2 S}{48} \iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* m |v - v^*|^4 dvdedv^* de^*.
\end{aligned}$$

It can even be further simplified when moreover f is an (isotropic) Gaussian function of v :

$$(38) \quad f(v, e) = \left(\int_w f(w, e) dw \right) \frac{1}{(2\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v - v_{avr}|^2}{2T}\right).$$

In that case, we end up with

$$\begin{aligned}
(39) \quad & \int_v \int_e Q(f, f) m(e - e_{avr})^2 dvde = \\
& - \frac{3S}{2r} a(2-a)(1-\alpha) M_0 g + \frac{15S}{16r} (1-\gamma^2)^2 (1-\alpha) M_0 T^2.
\end{aligned}$$

Proof of Proposition 2.1:

We use formula (7) for $\psi = m(v_i - v_{iavr})(v_j - v_{javr})$. Remembering that

$$(40) \quad v' = \frac{v+v^*}{2} + \frac{1-\gamma}{4}(v-v^*) + \frac{1+\gamma}{4}|v-v^*|\sigma,$$

we see that for $i \neq j$,

$$\begin{aligned}
(41) \quad \psi' = & m\left(\frac{v_i+v_i^*}{2} - v_{iavr} + \frac{1-\gamma}{4}(v_i - v_i^*) + \frac{1+\gamma}{4}|v - v^*|\sigma_i\right) \\
& \times \left(\frac{v_j+v_j^*}{2} - v_{javr} + \frac{1-\gamma}{4}(v_j - v_j^*) + \frac{1+\gamma}{4}|v - v^*|\sigma_j\right).
\end{aligned}$$

Using the symmetry relations

$$(42) \quad \forall i \neq j, \quad \int_{\sigma \in \mathbb{S}^2} \sigma_i d\sigma = 0, \quad \int_{\sigma \in \mathbb{S}^2} \sigma_i \sigma_j d\sigma = 0,$$

we end up with

$$\begin{aligned}
(43) \quad \frac{1}{4\pi} \int_{\sigma \in \mathbb{S}^2} \psi' d\sigma = & m \left[\left(\frac{v_i + v_i^*}{2} - v_{iavr}\right) \left(\frac{v_j + v_j^*}{2} - v_{javr}\right) + \left(\frac{v_i + v_i^*}{2} - v_{iavr}\right) \frac{1-\gamma}{4} (v_j - v_j^*) \right. \\
& \left. + \frac{1-\gamma}{4} (v_i - v_i^*) \left(\frac{v_j + v_j^*}{2} - v_{javr}\right) + \left(\frac{1-\gamma}{4}\right)^2 (v_i - v_i^*) (v_j - v_j^*) \right],
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\frac{1}{4\pi} \int_{\sigma \in \mathbb{S}^2} (\psi' - \psi) d\sigma &= m \left[\frac{-7}{16} - \frac{3\gamma}{8} + \frac{\gamma^2}{16} \right] (v_i - v_{i_{\text{avr}}})(v_j - v_{j_{\text{avr}}}) \\
&+ m \left[\frac{1}{16} + \frac{\gamma}{8} + \frac{\gamma^2}{16} \right] (v_i^* - v_{i_{\text{avr}}})(v_j^* - v_{j_{\text{avr}}}) \\
(44) \quad &+ A_{\perp(v,v^*)}(v_i - v_{i_{\text{avr}}})(v_j^* - v_{j_{\text{avr}}}) + B_{\perp(v,v^*)}(v_j - v_{j_{\text{avr}}})(v_i^* - v_{i_{\text{avr}}}),
\end{aligned}$$

for some quantities $A_{\perp(v,v^*)}$ and $B_{\perp(v,v^*)}$ that will disappear when the integration over $dv dv^*$ is performed.

Using the weak formulation (7),

$$\begin{aligned}
(45) \quad &\int_v \int_e Q(f, f) m(v_i - v_{i_{\text{avr}}})(v_j - v_{j_{\text{avr}}}) dv de \\
&= 4\pi S \left[\frac{-3}{8} - \frac{\gamma}{4} + \frac{\gamma^2}{8} \right] \iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* m(v_i - v_{i_{\text{avr}}})(v_j - v_{j_{\text{avr}}}) r^2 dv de dv^* de^* \\
&= 4\pi S \left[\frac{-3}{8} - \frac{\gamma}{4} + \frac{\gamma^2}{8} \right] \underbrace{\left(\int_v \int_e f m(v_i - v_{i_{\text{avr}}})(v_j - v_{j_{\text{avr}}}) dv de \right)}_{T_{ij} M_0} \underbrace{\left(\int_{v^*} \int_{e^*} f^* r^2 dv^* de^* \right)}_{\frac{3}{4\pi r} (1-\alpha)} \\
&= \frac{3S}{r} \left[\frac{-3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1-\alpha) M_0 T_{ij}.
\end{aligned}$$

We obtain therefore formula (34).

We now turn to the case when $i = j$, and take consequently $\psi = m(v_i - v_{i_{\text{avr}}})^2$. The computation runs thus:

$$\begin{aligned}
(46) \quad &\frac{1}{4\pi} \int_{\sigma \in \mathbb{S}^2} (\psi' - \psi) d\sigma = m(v_i - v_{i_{\text{avr}}})^2 \left[\frac{-7}{16} - \frac{3\gamma}{8} + \frac{\gamma^2}{16} \right] \\
&+ m(v_i^* - v_{i_{\text{avr}}})^2 \left[\frac{1}{16} + \frac{\gamma}{8} + \frac{\gamma^2}{16} \right] + m \frac{(1+\gamma)^2}{16} |v - v^*|^2 \frac{1}{3} \\
&+ C_{\perp(v,v^*)}(v_i - v_{i_{\text{avr}}})(v_i^* - v_{i_{\text{avr}}}),
\end{aligned}$$

where the last term will vanish after integration over $dv dv^*$. Then,

$$\begin{aligned}
(47) \quad &\iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* m \frac{(1+\gamma)^2}{16} |v - v^*|^2 \frac{4\pi}{3} r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dv de dv^* de^* \\
&= \frac{3S}{8r} (1+\gamma)^2 M_0 (1-\alpha) T.
\end{aligned}$$

Recalling the computation leading to formula (34), we end up with formula (35).

Next computation is related to the moment g defined in (32). We observe that

$$\begin{aligned}
(48) \quad &\frac{1}{4\pi} \int_{\sigma} [(e')^2 + (e')^2 - (e^*)^2 - e^2] d\sigma \\
&= -\frac{a(2-a)}{2} (e - e^*)^2 + (1-\gamma^2) \frac{|v - v^*|^2}{8} (e + e^*) \\
&+ \frac{1}{128} (1-\gamma^2)^2 |v - v^*|^4 + \frac{1}{128} (1-\gamma^2)^2 |v - v^*|^2 \frac{1}{4\pi} \int_{\sigma} (\langle \sigma | v - v^* \rangle)^2 d\sigma,
\end{aligned}$$

so that

(49)

$$\begin{aligned}
J &:= \iint_{v,e} Q(f, f) m(e - e_{\text{avr}})^2 dvde \\
&= \frac{1}{2} \iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} \int_{\sigma} f f^* m \left[\underbrace{-\frac{a(2-a)}{2} (e - e^*)^2}_A + \underbrace{(1 - \gamma^2) \frac{|v - v^*|^2}{8} (e + e^*)}_B \right. \\
&\quad + \underbrace{\frac{1}{128} (1 - \gamma^2)^2 |v - v^*|^4}_C + \underbrace{\frac{1}{128} (1 - \gamma^2)^2 |v - v^*|^2 (\langle \sigma | v - v^* \rangle)^2}_D \\
&\quad \left. - \underbrace{e_{\text{avr}} (1 - \gamma^2) \frac{|v - v^*|^2}{4}}_E \right] r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dvdedv^* de^* d\sigma.
\end{aligned}$$

Some of the terms appearing in this formula can be computed:

- For A :

(50)

$$\iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} \int_{\sigma} f f^* m A r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dvdedv^* de^* d\sigma = -\frac{3S}{r} a(2-a)(1-\alpha) M_0 g.$$

- We deal with the terms B and E together, since they both lead to the appearance of a "cross moment".

(51)

$$\begin{aligned}
&\iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} \int_{\sigma} f f^* m (B + E) r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dvdedv^* de^* d\sigma \\
&= \pi r^2 S \frac{1 - \gamma^2}{2} \iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} f f^* m (e + e^* - 2e_{\text{avr}}) |v - v^*|^2 dvdedv^* de^*.
\end{aligned}$$

In the case when the distribution w.r.t. energy is independent of the distribution w.r.t. velocity (i.e. when f is a tensor product), we see that

(52)

$$\iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} \int_{\sigma} f f^* m (B + E) r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dvdedv^* de^* d\sigma = 0.$$

- We now focus on the terms C and D . After integration w.r.t. σ , we obtain

(53)

$$\begin{aligned}
J_2 &:= \iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} \int_{\sigma} f f^* m (C + D) r^2 \tilde{S}(|v - v^*|) dvdedv^* de^* d\sigma \\
&= \frac{(1 - \gamma^2)^2}{24} r^2 S \pi m \iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} f f^* |v - v^*|^4 dvdedv^* de^*.
\end{aligned}$$

Then, if f is an (isotropic) gaussian function of v (that is, (38) holds), one gets

(54)

$$\iiint \iiint_{v,e,v^*,e^*} f f^* |v - v^*|^4 dvdedv^* de^* = 60T^2 \left(\int_v \int_e f dvde \right)^2.$$

All in all, we end up with (36), (37) and (39).

2.2. Evolution of the moments of the Boltzmann equation in the case of Maxwell molecules. We now consider a (smooth) solution of eq. (31).

Using (34) and (35), we get an equation satisfied by the directional temperature T_{ij} , for $i, j = 1, 2, 3, i \neq j$:

$$(55) \quad \frac{d}{dt}T_{ij}(t) = \frac{3S}{r} \left[\frac{-3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha)T_{ij}(t),$$

and by the directional temperature T_{ii} , for $i = 1, \dots, 3$:

$$(56) \quad \frac{d}{dt}T_{ii}(t) = \frac{3S}{r} \left[\frac{-3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha)T_{ii}(t) + \frac{3S}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha)T(t).$$

Note that the evolution of the temperature $T(t)$ can be recovered by adding (56) for $i = 1, 2, 3$:

$$(57) \quad \frac{d}{dt}T(t) = \frac{3S}{4r} (\gamma^2 - 1) (1 - \alpha)T(t).$$

It is not possible to obtain a closed equation for g without using some approximation. We shall use formula (39), which in principle only holds for functions which are tensor products, and which moreover are Gaussian functions of v .

We end up with the following approximate equation:

$$(58) \quad \frac{d}{dt}g(t) \approx -\frac{3S}{2r} a(2 - a)(1 - \alpha)g(t) + \frac{15}{16r} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha)ST^2.$$

The quality of the approximation leading to (58) will be tested at the numerical level in subsection 4.2 (Fig. 6).

2.3. Evolution of the moments of the Boltzmann equation in the case of hard spheres.

In the case of hard spheres (that is, when \tilde{S} satisfies (8)), no closed equations can be written down for the directional temperature T_{ij} . We use therefore approximate equations.

Our choice is the following: we write

$$(59) \quad \frac{d}{dt}T_{ij}(t) \approx \frac{3S_1(t)}{r} \left[\frac{-3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha)T_{ij}(t), \quad i, j = 1, 2, 3, i \neq j,$$

$$(60) \quad \frac{d}{dt}T_{ii}(t) \approx \frac{3S_1(t)}{r} \left[\frac{-3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha)T_{ii}(t) + \frac{3S_1(t)}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha)T(t),$$

$$i = 1, 2, 3,$$

that is, a set of equations identical to those which are written in the case of Maxwell molecules, except that the constant S is replaced by a function $S_1(t)$ of the time t , which approximates $|v - v^*|$ at time t .

Many different choices are possible for S_1 , our proposition is formula (26). This corresponds to taking for f an anisotropic gaussian function of v , that is, in a diagonal basis for the matrix of directional temperatures (where $v = (\tilde{v}_1, \tilde{v}_2, \tilde{v}_3)$ and $v_{\text{avr}} = (\tilde{v}_{1\text{avr}}, \tilde{v}_{2\text{avr}}, \tilde{v}_{3\text{avr}})$):

$$(61) \quad f = \left(\int_w f dw \right) \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \sqrt{\tilde{T}_{11}\tilde{T}_{22}\tilde{T}_{33}}} e^{-\frac{(\tilde{v}_1 - \tilde{v}_{1\text{avr}})^2}{2\tilde{T}_{11}}} e^{-\frac{(\tilde{v}_2 - \tilde{v}_{2\text{avr}})^2}{2\tilde{T}_{22}}} e^{-\frac{(\tilde{v}_3 - \tilde{v}_{3\text{avr}})^2}{2\tilde{T}_{33}}},$$

in the formula

$$(62) \quad \left(\frac{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^4 dv dv^* de de^*}{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^2 dv dv^* de de^*} \right)^{1/2},$$

considered as an approximation of

$$(63) \quad \frac{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^3 dv dv^* de de^*}{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^2 dv dv^* de de^*}.$$

We now discuss the relevance of our approximation: we compare the results obtained with the original Boltzmann equation (with hard spheres) and different approximate models of the cross section with the simplified BGK type model. We try three different approximations of the cross section, the first one consists in computing $|v - v^*|$ as a quadratic mean, that is:

$$(64) \quad |v - v^*| \approx \sqrt{\frac{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^2 dv dv^* de de^*}{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* dv dv^* de de^*}},$$

which amounts to replace $|v - v^*|$ by $\sqrt{6T(t)}$. The second choice consists in replacing the anisotropic gaussian function by an isotropic one. This leads to the formula $|v - v^*| \approx \sqrt{\frac{15}{9}} \sqrt{6T(t)}$. The last one corresponds to formula (26).

The numerical results are presented in Fig. 1 and show that formula (64) is much less efficient than the other ones. The gain obtained by using an anisotropic gaussian function instead of an isotropic one is slight (and does not necessarily justify the use of a complex formula like (26)).

We now propose an approximate equation for the variance g of the internal energy. We write

$$(65) \quad \frac{d}{dt} g(t) \approx -\frac{3}{2r} a(2-a)(1-\alpha) S_2(t) g(t) + \frac{15}{16r} (1-\gamma^2)^2 (1-\alpha) S_3(t) T^2,$$

that is, an equation identical to the one written in the case of Maxwell molecules, except that the constant S is replaced by functions $S_2(t)$ and $S_3(t)$ of the time t , which approximate $|v - v^*|$ at time t .

Here, we propose the simplest formula for S_2 , that is, we consider (27), which corresponds to taking S_2 as the quantity

$$(66) \quad |v - v^*| \approx \frac{\iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* |v - v^*| dv dv^* de de^*}{\iiint \int_{v,e,v^*,e^*} f f^* dv dv^* de de^*},$$

when f is an (isotropic) Gaussian function of v (that is, formula (38) holds).

We now discuss the quality of this approximation. We compare in Fig. 2 the results obtained with the original Boltzmann equation and the results with our simplified kinetic model with two different approximations for $S_2(t)$: the one given by (27), and the other using $|v - v^*| \approx \sqrt{6T}$ (that is, (64)). We use a numerical simulation of the elastic case ($\gamma = 1$) since in that case, the positive term in (65) disappears, so that only the approximation involving $S_2(t)$ counts.

Fig. 2 shows that the approximation using (27) is much more efficient than the one using (64).

We take for S_3 the formula $S_3 = \frac{32T^{1/2}}{5\sqrt{\pi}}$. This corresponds to computing $S_3(t)$ as the value of the following ratio:

$$(67) \quad S_3(t) \approx \frac{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^5 dv dv^* de de^*}{\int_v \int_e \int_{v^*} \int_{e^*} f f^* |v - v^*|^4 dv dv^* de de^*},$$

when f is given by (38). The formula $S_3 = \frac{32T^{1/2}}{5\sqrt{\pi}}$ is a consequence of
(68)

$$\iiint\int_{v,e,v^*,e^*} f f^* m |v - v^*|^5 dv dv^* de de^* = \frac{384T^{5/2}}{\sqrt{\pi}} m \left(\int_v \int_e f dv de \right)^2,$$

and (54) [with f given by (38)].

This yields for J_2 in eq. (53) (replacing $S_3(t)$ by its value) the following formula:

$$(69) \quad J_2 = \frac{12}{r\sqrt{\pi}} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha) M_0 T^{5/2},$$

and so,

$$(70) \quad \frac{d}{dt} g(t) \approx -\frac{3}{2r} a(2 - a)(1 - \alpha) S_2 g(t) + \frac{6}{r\sqrt{\pi}} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha) T^{5/2}.$$

The interest of using formula (28) instead of $\sqrt{6T}$ (that is, (64)) can be seen on the numerical simulation yielding Fig. 3. There, we have set the internal energy exchange parameter at 0, so that the negative part of (70) vanishes, and only the quality of the approximation of S_3 is tested.

3. ESTABLISHMENT OF THE SIMPLIFIED MODEL

3.1. Evolution of the moments of the simplified model with arbitrary coefficients. We introduce here the simplified model [which hopefully mimics the behavior of (10) – (11)], with arbitrary coefficients c_1, \dots, c_4, ν :

$$(71) \quad \begin{aligned} \partial_t f + \nabla_v \cdot (c_1 f (v - v_{avr})) + \partial_e (c_2 f + c_3 (e - e_{avr}) f + c_4 |v - v_{avr}|^4 \partial_e f) \\ = -\nu (f - f_0) \end{aligned}$$

where v_{avr} , e_{avr} , and f_0 are defined by (17), (18) and (19).

It is possible to compute explicitly the evolution of some moments of the solution of eq. (71). Those computations are summarized in the following

Proposition 3.1. *We assume that $c_1, \dots, c_4, \nu \geq 0$ do not depend on v, e (they can depend on T and t). Then the (smooth) solutions of eq. (71) satisfy the following properties:*

- Conservation of mass and momentum:

$$(72) \quad \partial_t \int_v \int_e f \begin{pmatrix} 1 \\ v \end{pmatrix} dv de = 0,$$

- Evolution of the total energy:

$$(73) \quad \partial_t \int_v \int_e m f \left(\frac{|v|^2}{2} + e \right) dv de = [3c_1 T + c_2] M_0,$$

- Evolution of the directional temperatures:

$$(74) \quad \forall i, j = 1, 2, 3, i \neq j, \quad \partial_t T_{ij} = (2c_1 - \nu) T_{ij},$$

$$(75) \quad \forall i = 1, 2, 3, \quad \partial_t T_{ii} = (2c_1 - \nu) T_{ii} + \nu T,$$

- Evolution of the variance of the internal energy:

$$(76) \quad \partial_t g = 2c_3 g - \frac{2c_4}{M_0} \int_v \int_e f m |v - v_{avr}|^4 dv de.$$

Proof of Proposition 3.1: The property of conservation

(72) is directly obtained due to the definition of v_{avr} .

We then compute the evolution of the kinetic energy. The terms in ∂_e obviously do not contribute to its evolution. Moreover,

$$(77) \quad \int_v \int_e \nabla_v \cdot (c_1 f(v - v_{\text{avr}})) m \frac{|v|^2}{2} dvde = -3c_1 M_0 T,$$

$$(78) \quad \int_v e^{-\frac{|v-v_{\text{avr}}|^2}{2T}} m \frac{|v|^2}{2} dv = \frac{3}{2} m (2\pi)^{3/2} T^{5/2} + \frac{1}{2} m (2\pi T)^{3/2} |v_{\text{avr}}|^2,$$

and thus :

$$(79) \quad \begin{aligned} \int_v \int_e f_0(t, v, e) m \frac{|v|^2}{2} dvde &= M_0 \left[\frac{3}{2} T + \frac{1}{2} |v_{\text{avr}}|^2 \right] \\ &= \int_v \int_e f m \frac{|v|^2}{2} dvde := E_c. \end{aligned}$$

The evolution of the internal energy can easily be computed since the only term giving a non-zero contribution is $\partial_e(c_2 f)$. We get

$$(80) \quad \int_v \int_e m e \partial_e(c_2 f) dedv = -c_2 M_0.$$

Collecting all those terms, we end up with eq. (73).

Next, we examine the evolution of directional temperatures for solutions of (71). As in the computation of the evolution of the total energy, the terms in ∂_e obviously give no contributions at this level.

For the contributions related to $c_1 f(v - v_{\text{avr}})$, we get the following formulas:

For $k \neq l$,

$$(81) \quad \begin{aligned} &\iint_{v,e} \nabla_v \cdot (c_1 f(v - v_{\text{avr}})) m (v_k - v_{k_{\text{avr}}})(v_l - v_{l_{\text{avr}}}) dvde \\ &= -c_1 \sum_{i=1,2,3} \iint_{v,e} f m \left[(v_i - v_{i_{\text{avr}}}) \partial_{v_i} \left((v_k - v_{k_{\text{avr}}})(v_l - v_{l_{\text{avr}}}) \right) \right] dvde \\ &= -c_1 \sum_{i=1,2,3} \iint_{v,e} f m (v_i - v_{i_{\text{avr}}}) \left[\delta_{i=k} (v_l - v_{l_{\text{avr}}}) + \delta_{i=l} (v_k - v_{k_{\text{avr}}}) \right] dvde \\ &= -2c_1 \iint_{v,e} f m (v_l - v_{l_{\text{avr}}})(v_k - v_{k_{\text{avr}}}) dvde \\ &= -2c_1 M_0 T_{kl}(t); \end{aligned}$$

For $k = l$,

$$(82) \quad \int_v \int_e \nabla_v \cdot (c_1 f(v - v_{\text{avr}})) m (v_k - v_{k_{\text{avr}}})^2 dvde = -2c_1 M_0 T_{kk}(t).$$

Finally, for the contribution related to $-\nu(f - f_0)$, we get when $k \neq l$:

$$(83) \quad \int_v \int_e -\nu(f - f_0) m (v_k - v_{k_{\text{avr}}})(v_l - v_{l_{\text{avr}}}) dvde = -\nu M_0 T_{kl}(t),$$

and when $k = l$,

$$(84) \quad \int_v \int_e -\nu(f - f_0) m (v_k - v_{k_{\text{avr}}})^2 dvde = -\nu M_0 T_{kk}(t) + \nu M_0 T(t).$$

Collecting all the terms, we obtain eq. (74) and eq. (75).

We finally examine the contributions of the various terms on the evolution of g . Obviously, the terms in ∇_v do not contribute to the evolution of g , and the same holds for $\partial_e(c_2 f)$.

Then,

$$(85) \quad \int_v \int_e \partial_e (c_3 (e - e_{\text{avr}}) f) m (e - e_{\text{avr}})^2 dvde = -2c_3 M_0 g(t),$$

(86)

$$\int_v \int_e \partial_e (c_4 |v - v_{\text{avr}}|^4 \partial_e f) m (e - e_{\text{avr}})^2 dvde = 2c_4 \iint_{v,e} f m |v - v_{\text{avr}}|^4 dvde,$$

and

$$(87) \quad -\nu \int_v \int_e f m (e - e_{\text{avr}})^2 dvde = -\nu M_0 g(t),$$

(88)

$$\nu \int_v \int_e f_0 m (e - e_{\text{avr}})^2 dvde = \nu M_0 g(t).$$

Finally, the evolution of g is given by eq. (76).

This ends the proof of Prop. 3.1.

3.2. Computation of the coefficients; case of Maxwell molecules. We now write down the constraints on the parameters which enable to identify the behavior of the moments (total energy, g and T_{ij}) for the simplified model and for the original model, in the case of Maxwell molecules (that is, when $\tilde{S}(|v - v^*|) = S$).

In order to recover the conservation of total energy which held in the original model, one needs to ensure (according to (73)) that

$$(89) \quad c_2 = -3c_1 T.$$

In order to mimic the behavior of the directional temperatures when f satisfies the original model, we write the following constraints (corresponding to the cases $i \neq j$ and $i = j$ respectively):

$$(90) \quad 2c_1 - \nu = \frac{3S}{r} \left[-\frac{3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha),$$

$$(91) \quad \nu = \frac{3S}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha).$$

Finally, we wish to mimic the behavior of g . This first leads to

$$(92) \quad c_3 = -\frac{3}{4r} a(2 - a)(1 - \alpha)S.$$

It remains to perform the computation of $\iint_{v,e} f m |v - v_{\text{avr}}|^4 dvde$. This is not possible in general, and we retain as an approximate result what is obtained when f is assumed to be an (isotropic) Gaussian w.r.t. v (that is, f is given by formula (38)). In this situation, one is led to

$$(93) \quad \iint_{v,e} f m |v - v_{\text{avr}}|^4 dvde = 15M_0 T^2.$$

Then, the identification with the (approximate) o.d.e. (58) satisfied by $g(t)$ when f is solution of the Boltzmann equation with Maxwell molecules leads to:

$$(94) \quad c_4 = -\frac{1}{32r} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha)S.$$

Collecting all those identities, we get the equations (21) – (25) for the parameters of the model described in the introduction (with $S_1(t) = S_2(t) = S_3(t) = S$).

3.3. Computation of the coefficients; case of hard spheres. In this subsection, we write down the constraints on the parameters which enable to identify the behavior of the moments (total energy, g and T_{ij}) for the simplified model and for the original model, in the case of hard spheres (that is, $\tilde{S}(|v - v^*|) = |v - v^*|$).

The conservation of total energy still leads to eq. (89). Then, it is easy to see that (90) – (92), (94) become

$$(95) \quad 2c_1 - \nu = \frac{3S_1}{r} \left[-\frac{3}{8} + \frac{\gamma}{4} \left(\frac{\gamma}{2} - 1 \right) \right] (1 - \alpha),$$

$$(96) \quad \nu = \frac{3S_1}{8r} (1 + \gamma)^2 (1 - \alpha),$$

$$(97) \quad c_3 = -\frac{3}{4r} a(2 - a)(1 - \alpha)S_2,$$

$$(98) \quad c_4 = -\frac{1}{32r} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha)S_3,$$

where S_1 , S_2 and S_3 are given by (26), (27) and (28). In the last equation, the same assumptions on $\int_v \int_e f m |v - v_{\text{avr}}|^4 dv de$ have been performed as in the case of Maxwell molecules. We end up again with the equations (21) – (25) for the parameters of the model described in the introduction.

We have thus obtained our simplified model in the case of Maxwell molecules as well as in the case of hard spheres.

3.4. Extension of the model when a, γ depend on $|v - v^*|$. We now briefly explain how to extend our analysis when the kernel Q (with hard spheres cross section) defined in (10) – (15) includes inelasticity and energy exchange parameters a and γ which depend on $|v - v^*|$ instead of being absolute constants, that is, $a := \tilde{a}(|v - v^*|)$, $\gamma := \tilde{\gamma}(|v - v^*|)$ (Cf. [Mat06] and [DM10]).

Our proposition consists in introducing the simplified model (16) – (30), where a and γ (appearing in formulas (21) – (25)) are replaced by $\tilde{a}(\sqrt{6T})$ and $\tilde{\gamma}(\sqrt{6T})$ respectively [that is, $|v - v^*|$ is replaced by its mean quadratic value, as in formula (64)].

4. NUMERICAL SIMULATIONS

4.1. Numerical method. In order to solve (16) – (30), we use a particle method ([LPS98]) (with constant weight w): the density f is discretized as

$$f(n\Delta t, v, e) \sim \sum_{i=1}^N w \delta_{v_i(n\Delta t), e_i(n\Delta t)},$$

where $\delta_{v_i(n\Delta t), e_i(n\Delta t)}$ is the Dirac mass at velocity $v_i(n\Delta t)$ and internal energy $e_i(n\Delta t)$ and N is the number of particles. The "Vlasov-Fokker-Planck" part of eq.(16) [that is, the l.h.s. of the equation] is solved by discretizing (at the first order) the characteristic o.d.e.s for v_i and e_i . Moreover, a realization of the Brownian motion is used for the term proportional to $\partial_e^2 f$. The exact conservation of the momentum and total energy is enforced at the end of this procedure. The "BGK" part of eq. (16) [that is, the r.h.s. of the equation] is treated by modifying the velocities of a randomly chosen set of particles (Monte-Carlo method). Once again, the conservation of momentum and kinetic energy (which implies total energy too since the internal energy remains unchanged in that step) is enforced at the end of the time step.

Note also that the numerical results obtained with this discretization of eq. (16) – (30) are compared with simulations of the original equation (31) obtained by a DSMC scheme (the code is a modified version of the code used in [Bar04, DM10])

4.2. Numerical experiments; Maxwell molecules. This subsection is dedicated to the study of the behavior of solutions of eq. (16) – (30) in the case of Maxwell molecules. Since the evolution of some moments of the original eq. (31) is explicitly known for this cross section (in particular the evolution of T_{ij}), it is possible to make comparisons with this explicit formula. When no such explicit formula exists, we use instead a comparison with solutions of eq. (31) obtained numerically.

We start with the study of the evolution of the directional temperatures T_{ij} for an anisotropic initial distribution. We provide Fig. 4 for T_{12} when $\gamma = 0.3$. We compare in this figure the values of T_{12} obtained by the discretization of the original Boltzmann eq. (31) and those obtained by the discretization of our simplified eq. (16) – (30). The same is performed in Fig. 5 for T_{11} , T_{22} when $\gamma = 0.6$. The trend to equilibrium of directional temperatures can be observed during a short transient phase.

As expected, the curves are extremely close, since the T_{ij} satisfy in both models the same o.d.e. [the coefficients in eq. (16) have been built for that purpose]. This test in fact shows that the error of discretization for eq. (16) as well as eq. (31) is negligible. We have added on the figures the curve corresponding to the exact solution of the o.d.e. satisfied by T_{12} , T_{11} , T_{22} .

We then turn to the evolution of the parameter g . We provide figures (Cf. Fig. 6) which show a comparison of the case when f is the (discretized) solution of the Boltzmann equation (31) with the case when f is the (discretized) solution of the simplified model (16). The different figures correspond to different choices of parameters (of inelasticity) γ and (of exchange of energy) a .

As can be seen on the figures, the curves for the two models are very close, except in the special (and non-physical) case when $a = 0$ (that is, when internal energy is not exchanged at all during the collisions). The fact that g behaves in the same way for the two models is no surprise since the parameters of the simplified model are built for that purpose. It was however not completely obvious that this behavior would be so close (still except when $a = 0$), since g does not exactly satisfy any o.d.e. (as T_{ij} did): remember that the computations leading to the parameters in the simplified model were only approximations.

Next curves concern moments which have not been used for specifying the parameters of the simplified model (16), namely $|e - e_{avr}|$ (Cf. Fig. 7), and $\frac{|v_2|}{\sqrt{T(t)+|v_1|}}$ (Cf. Fig. 8).

As could be guessed, the curve coming out of eq. (31) and those coming out of the simplified model (16) do not fit as well as the curves for T_{ij} or even g . The gap between them however remains reasonable.

4.3. Numerical experiments; hard spheres. We provide in this subsection computations for the same quantities as in the previous subsection, but in the case when the cross section is that of hard spheres (which is much more physically relevant). In this situation, even quantities like T_{ij} are not exactly solutions of an o.d.e., so that it is only possible to compare the numerical experiments for the two models.

As in the previous subsection, we start with the evolution of the directional temperatures T_{ij} , for an anisotropic initial distribution. The fit between the curves for models (31) and (16) is of course not as perfect as in the case of Maxwell molecules, but it still remains quite satisfactory (Cf. Fig. 9).

The same experiment is done for the directional temperature T_{ii} when $\gamma = 0.6$ (Fig. 10)

The same can be said of the evolution of g (Cf. Fig. 11), notice that the case when $a = 0$ still remains the worst.

We use a logarithmic scale in order to check that the slope of the decay of g (when the time is large) is respected in the simplified model. This can be seen in Fig. 12 (we consider the elastic case $\gamma = 1$ so that an exponential behaviour is expected for $g(t)$, as can be guessed from (65)).

We conclude this subsection by presenting curves for the moments $|e - e_{avr}|$ (Cf. Fig. 13), and $\frac{|v_1|}{\sqrt{T(t)+|v_2|}}$ (Cf. Fig. 14).

We observe (as expected) a slight degradation of the results w.r.t. the case of Maxwell molecules.

4.4. Numerical experiments; velocity-depending parameters.

This subsection is devoted to the presentation of results when both γ and a are functions of $|v - v^*|$ in eq. (31), as described in subsection 3.4.

More precisely, we consider the following formulas for the parameters γ and a (Cf. [Mat06] and [DM10]):

$$(99) \quad \tilde{\gamma}(|v - v^*|) = \exp\left(-\frac{\gamma_1}{|v - v^*|}\right),$$

$$(100) \quad \tilde{a}(|v - v^*|) = 1 - \exp\left(-\frac{a_1}{|v - v^*|}\right).$$

We compare the results obtained on one hand by using the original Boltzmann equation (with $a := \tilde{a}(|v - v^*|)$ and $\gamma := \tilde{\gamma}(|v - v^*|)$ given by (99), (100); and with hard spheres), and on the other hand by using our simplified model with $a := \tilde{a}(\sqrt{6T})$, $\gamma := \tilde{\gamma}(\sqrt{6T})$, as proposed in subsection 3.4.

We first compare the evolution of the directional temperatures $T_{12}(t)$, $T_{11}(t)$, $T_{22}(t)$, in order to observe the trend to equilibrium of those temperatures (Fig. 15 and 16). We take two different values for the parameter γ_1 in $\tilde{\gamma}$.

On a longer time scale, we also present results in LogLog scale (Fig. 17) for the evolution of the temperature T (that is, we check Haff's law numerically).

We end up this series of simulation by one example of evolution of the variance of internal energy $g(t)$ (Fig. 18).

In our simulations, no sensible degradation was observed w.r.t. the case of hard spheres (with given a , γ).

5. CONCLUSION

We introduced in this paper a model of BGK type for the description of the effect of collisions which are inelastic and in which the internal energy of the particles (droplets) is tracked (and can be exchanged during collisions).

This model can be obtained almost entirely in a rational way when the collisions occur with a cross section of Maxwell molecules type.

In the more realistic case of hard spheres (and even more when the inelasticity and internal energy exchange parameters can depend on the relative velocity of incoming droplets), approximations must be performed.

The quality of these approximations was tested at the numerical level.

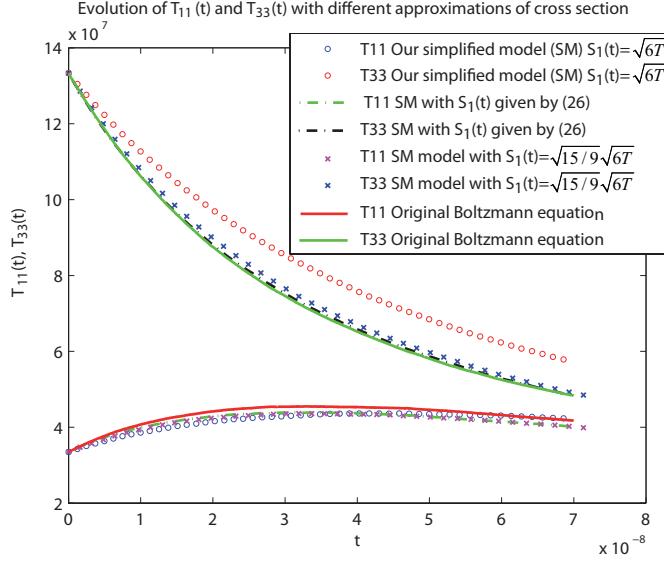
REFERENCES

- [AOB89] A.A. Amsden, P.J. O'Rourke, and T.D. Butler. Kiva II, a computer program for chemical reactive flows with spray. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 1989.
- [AS04] A. Astillero and A. Santos. A granular fluid modeled as a driven system of elastic hard spheres. Mallamace, F. (ed.) et al., *La fisica dei sistemi complessi. (Nuovi sviluppi e prospettive)*. Rendiconti della Scuola Internazionale di Fisica "Enrico Fermi", CLV Corso, Varenna, Italia, 1–11 Luglio 2003. Bologna: Società Italiana di Fisica; Amsterdam: IOS Press. Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi" 155, 475-480 (2004)., 2004.
- [Bar04] C. Baranger. Modelling of oscillations, breakup and collisions for droplets: the establishment of kernels for the T.A.B. model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(5):775–794, 2004.
- [BCG00] A. V. Bobylev, J. A. Carrillo, and I. M. Gamba. On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions. *J. Statist. Phys.*, 98(3-4):743–773, 2000.
- [BGK54] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, and M. Krook. A model for collision processes in gases. I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev., II. Ser.*, 94:511–525, 1954.
- [BGP04] A. V. Bobylev, I. M. Gamba, and V. Panferov. Moment inequalities and high-energy tails for the boltzmann equations with inelastic interactions. *J. Statist. Phys.*, 116(5-6):1651–1682, 2004.
- [CGS07] G.L. Caraffini, M. Groppi, and G. Spiga. On BGK approximation for reactive and nonreactive flows. *Transp. Theory Stat. Phys.*, 36(4-6):475–494, 2007.
- [DM10] L. Desvillettes and J. Mathiaud. Some aspects of the asymptotics leading from gas-particles equations towards multiphase flows equations. *J. Statist. Phys.*, 141:120–141, 2010. 10.1007/s10955-010-0044-3.
- [GK02] M. Groppi and W. Koller. Kinetic calculations for chemical reactions and inelastic transitions in a gas mixture. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)*, 5:855–876, 2002.
- [GPV04] I. M. Gamba, V. Panferov, and C. Villani. On the Boltzmann equation for diffusively excited granular media. *Comm. Math. Phys.*, 246(3):503–541, 2004.
- [GS99] M. Groppi and G. Spiga. Kinetic approach to chemical reactions and inelastic transitions in a rarefied gas. *Journal of Mathematical Chemistry*, 26:197–219, 1999. 10.1023/A:1019194113816.
- [LHH66] Jr. Lowell H. Holway. New statistical models for kinetic theory: Methods of construction. *Physics of Fluids*, 9(9):1658–1673, 1966.
- [LPS98] B. Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis. *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*, volume 29 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [MA00] J.M. Montanero and A.Santos. Computer simulation of uniformly heated granular fluids. *Granular Matter*, 2:53–64, 2000. 10.1007/s100350050035.
- [Mat06] J. Mathiaud. *Etude de systèmes de type gaz-particules*. PhD thesis, CMLA, Ecole normale supérieure de Cachan, 2006.
- [O'R81] P. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Princeton University, 1981.
- [San03] A. Santos. Transport coefficients of d-dimensional inelastic maxwell models. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 321(3-4):442 – 466, 2003. Appendix C.
- [Vil02] C. Villani. *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory*. Elsevier Science, 2002.
- [Vil06] C. Villani. Mathematics of granular materials. *J. Statist. Phys.*, 124:781–822, 2006. 10.1007/s10955-006-9038-6.
- [Wil85] F. A. Williams. *Combustion Theory. The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. Benjamin-Cummings Publishing Company, 1985.

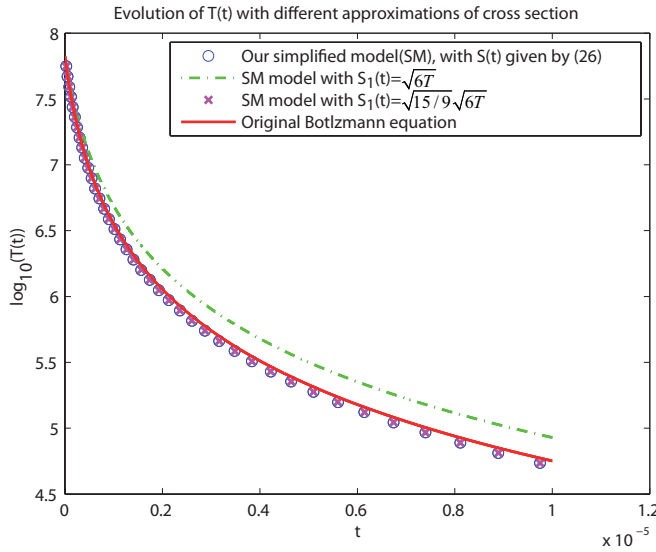
CEA,DAM,DIF, F-91297 ARPAJON, FRANCE, E-MAIL AUDE.CHAMPMARTIN@CEA.FR

CMLA, ECOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN, IUF & CNRS, PRES UNIVERSUD, 61, AV. DU PRÉSIDENT WILSON, 94235 CACHAN CEDEX, FRANCE. E-MAIL DESVILLE@CMLA.ENS-CACHAN.FR

CEA,DAM,DIF, F-91297 ARPAJON, FRANCE, E-MAIL JULIEN.MATHIAUD@CEA.FR



(a) Evolution of $T_{11}(t)$ and $T_{33}(t)$. The upper curve corresponds to $T_{33}(t)$. The simulation is performed on the typical time of equilibrium of directional temperatures (which is much shorter than the time of decay due to the inelastic behavior). The approximation with the anisotropic Gaussian (26) fits best with the evolution of the solution of the Boltzmann equation.



(b) Evolution of the temperature $T(t)$ in the same conditions, but on a longer time scale. We see that on this time scale, the isotropic approximation $\sqrt{\frac{15}{9}}\sqrt{6T}$ works as well as formula (26).

FIGURE 1. Initial datum corresponding to $T_{33} = 4T_{11}$. Hard spheres. The inelasticity parameter is $\gamma = 0.6$, different approximations of the cross section are performed.

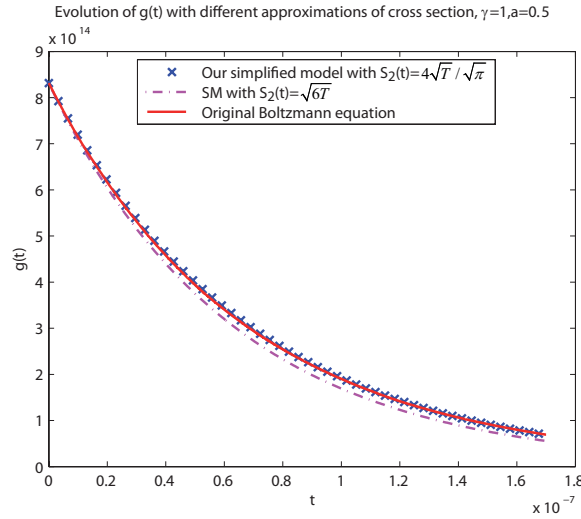


FIGURE 2. Evolution of $g(t)$ with $\gamma = 1$, $a = 0.5$. Hard Spheres. The formula (27) fits best with the original Boltzmann model.

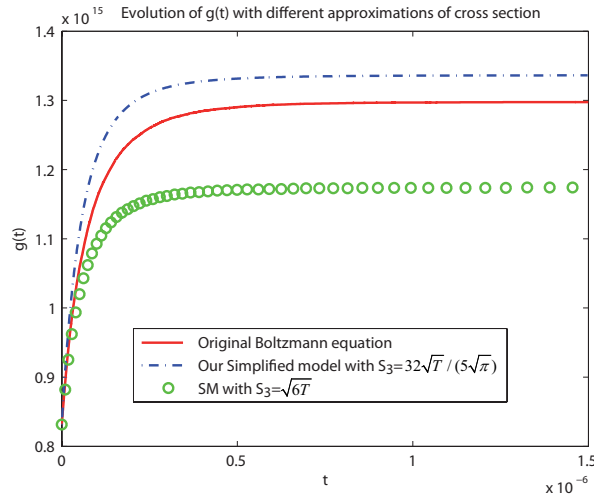


FIGURE 3. Evolution of $g(t)$ with $a = 0$, $\gamma = 0.6$. Hard Spheres. In that case ($a = 0$), only the growing part of $g(t)$ is represented (65). We tested our simplified model versus the original Boltzmann one with two different approximations of the cross section. The formula (28) fits the best with the original Boltzmann model.

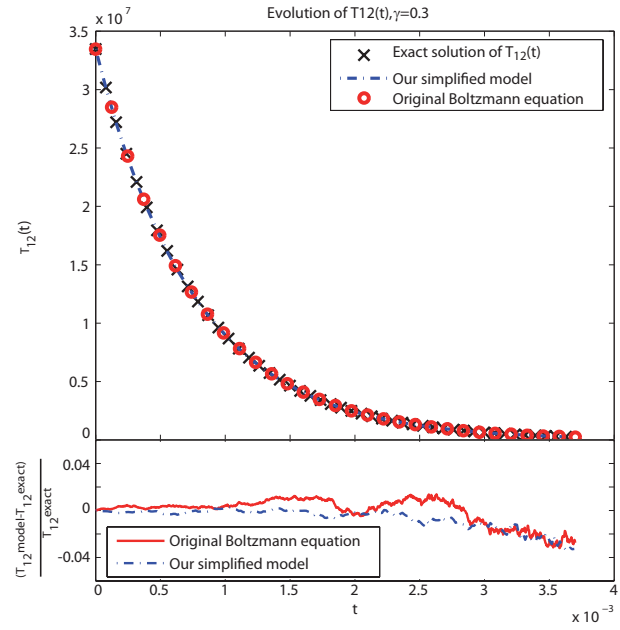


FIGURE 4. Evolution of $T_{12}(t)$ with $\gamma = 0.3$. Maxwell molecules. In that case, (55) has an exact solution which allows to observe the discrepancies between the two models and the exact solution.

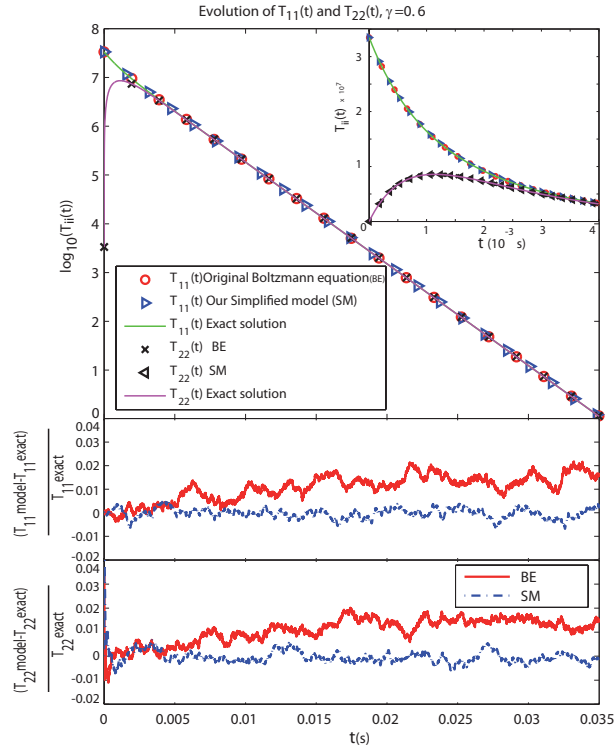


FIGURE 5. Evolution of $T_{11}(t)$, $T_{12}(t)$ with $\gamma = 0.6$. Maxwell molecules. In that case (56) has an exact solution. We observe on the top the transient part : first a trend to equilibrium of the temperature between the different directions, and then a decay of the T_{ii} . At the bottom, the discrepancies between the two models and the exact solution are computed for T_{11} and T_{22} .

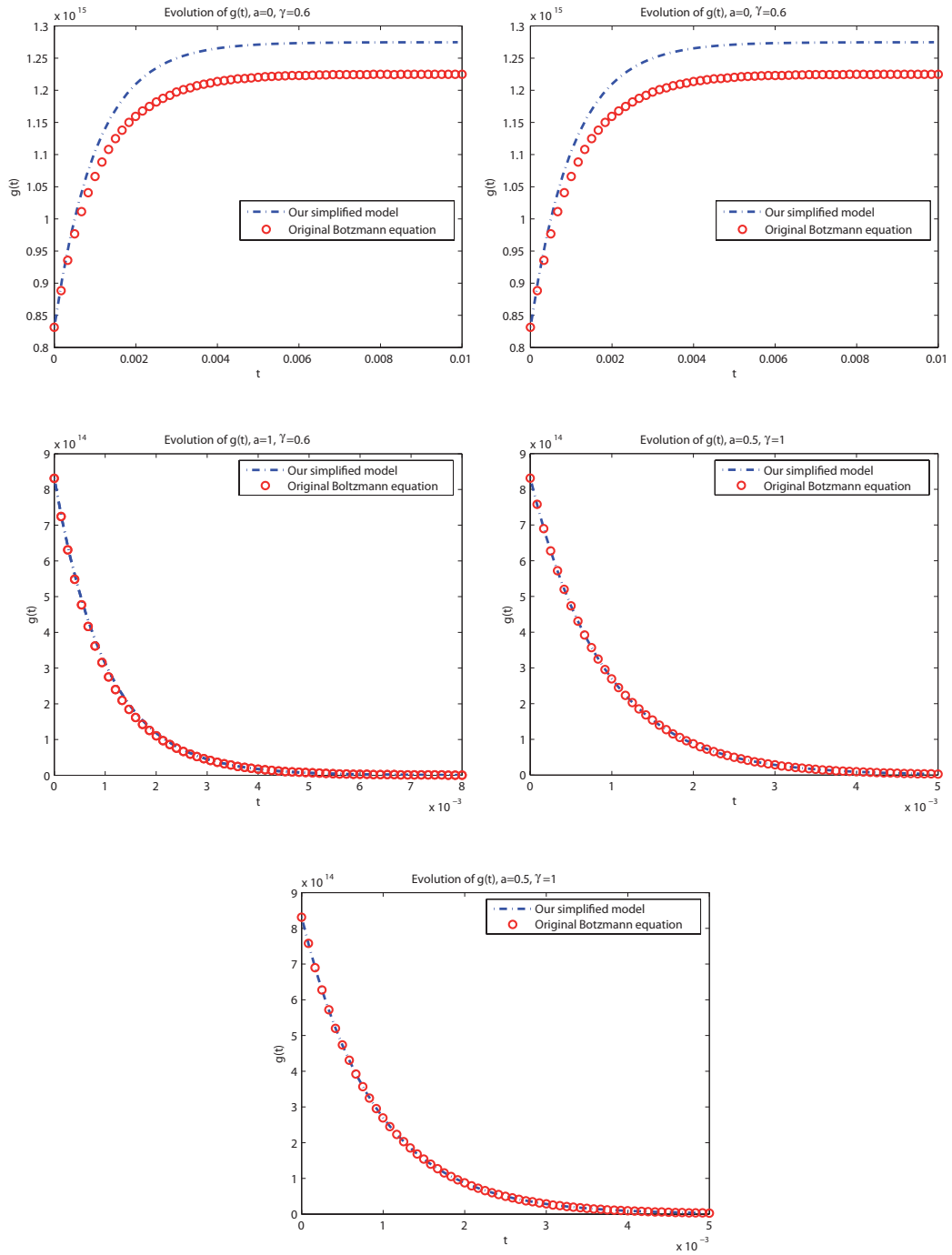


FIGURE 6. Evolution of $g(t)$ with different values of the two parameters a and γ . Maxwell molecules.

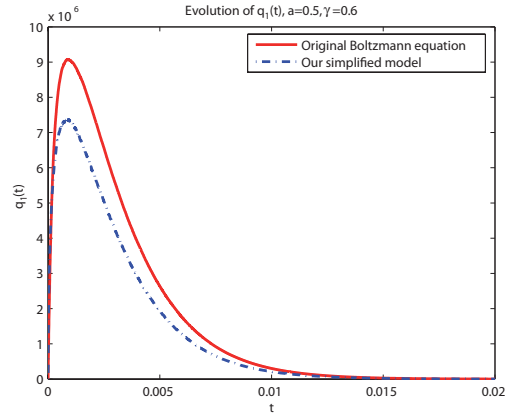


FIGURE 7. Evolution of $q_1(t) = \frac{\int f(t)|e-e_{avr}|dvde}{\int f(t)dvde}$ with $a = 1$, $\gamma = 0.6$. Maxwell molecules.

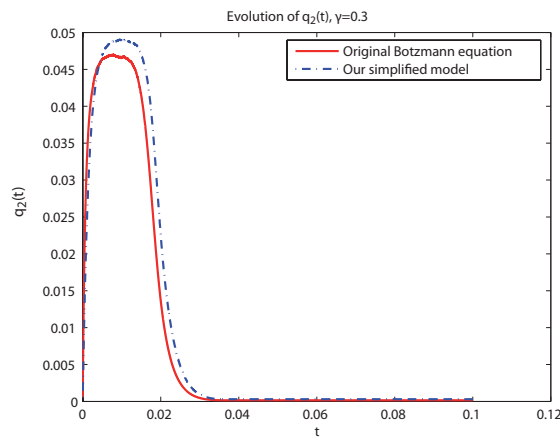


FIGURE 8. Evolution of $q_2(t) = \int_v \int_e f(t) \frac{|v_2|}{\sqrt{T(t)+|v_1|}} dvde$ with $\gamma = 0.3$. Maxwell molecules.

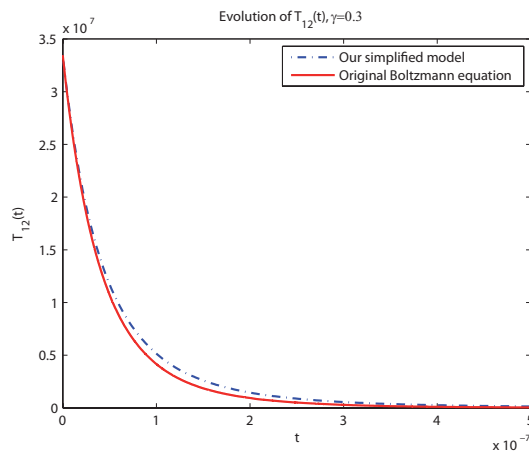


FIGURE 9. Evolution of $T_{12}(t)$ with $\gamma = 0.3$. Hard spheres.

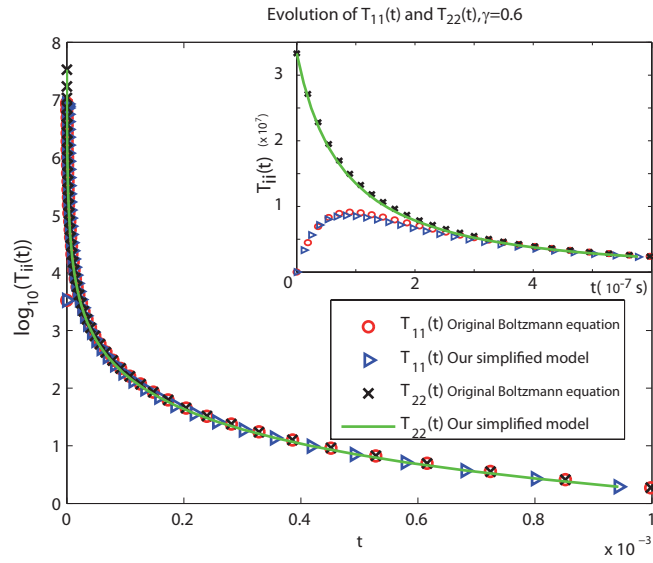


FIGURE 10. Evolution of $T_{11}(t)$, $T_{22}(t)$ with $\gamma = 0.6$. Hard Spheres. On the top right is shown the trend to equilibrium of the different directional temperatures. The decays of the $T_{ii}(t)$ are also in fair agreement.

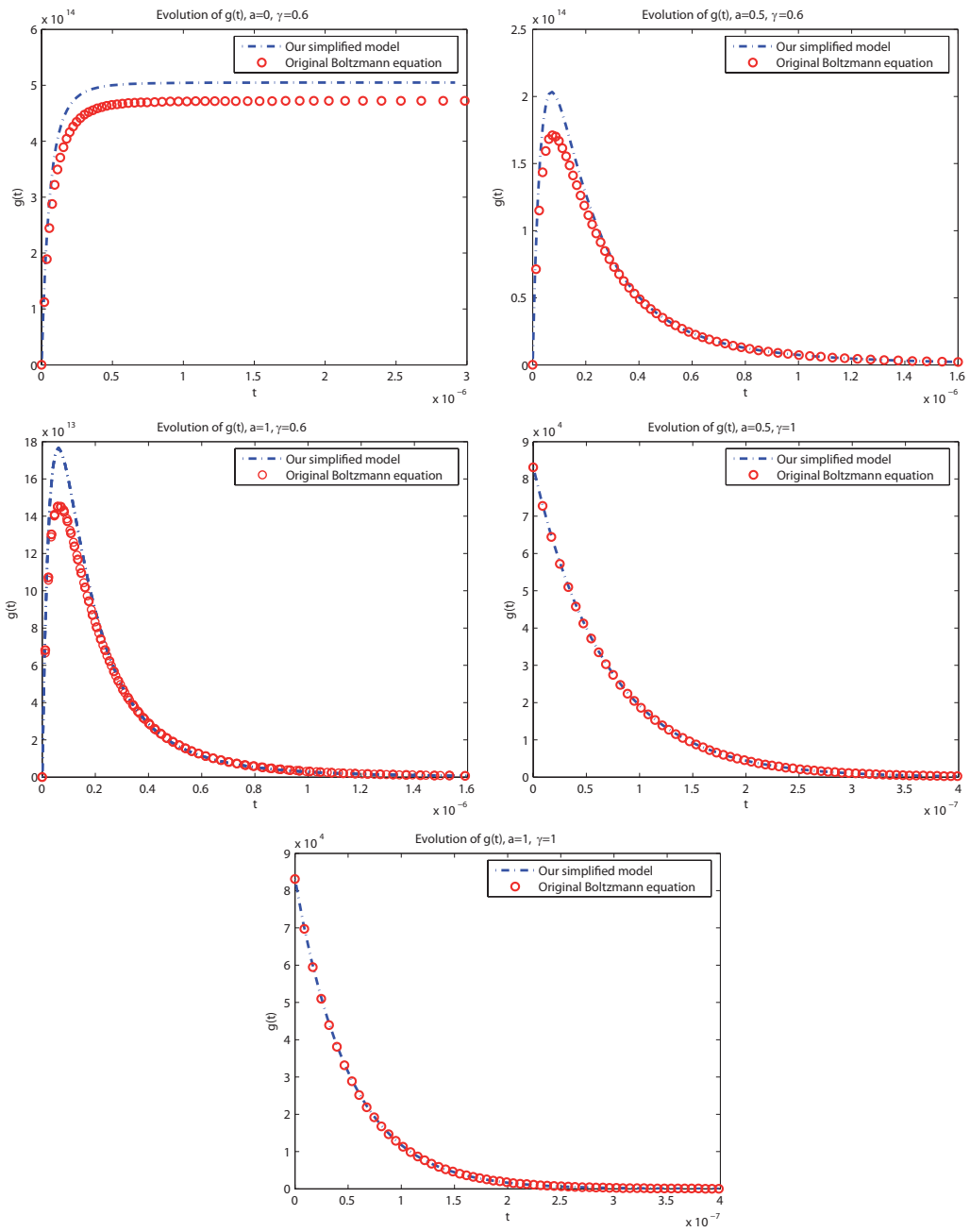


FIGURE 11. Evolution of $g(t)$ with different values of the parameters a and γ . Hard spheres.

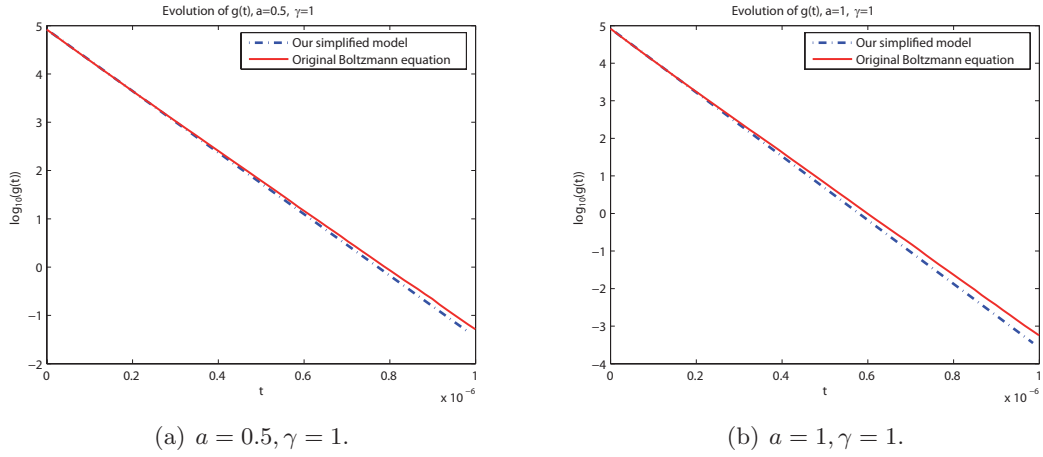


FIGURE 12. Evolution of $g(t)$. Hard spheres. Semilog scale.

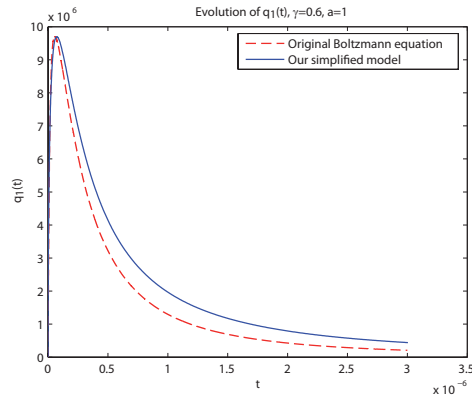


FIGURE 13. Evolution of $q_1(t) = \frac{\int_v \int_e f(t) |e - e_{avr}| dv de}{\int_v \int_e f(t) dv de}$, $a = 1, \gamma = 0.6$. Hard spheres.

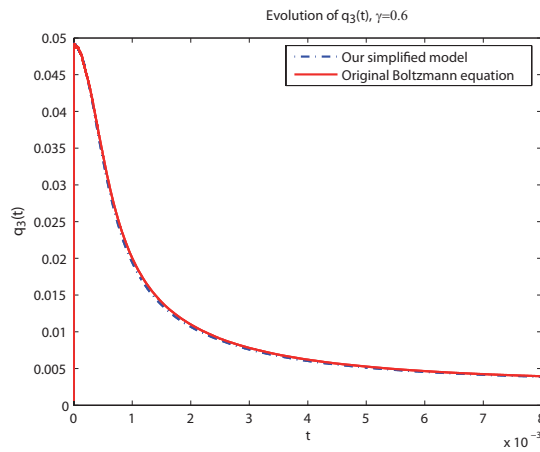
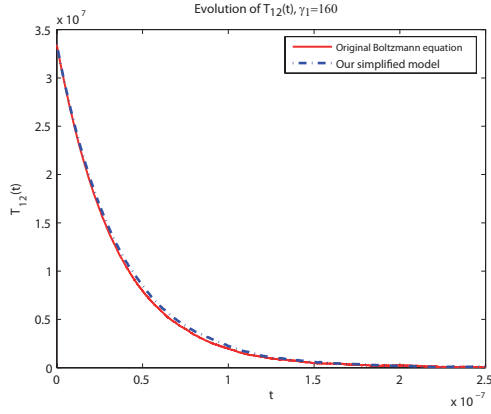
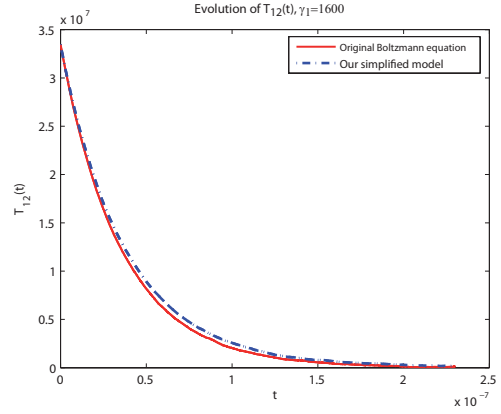


FIGURE 14. Evolution of $q_3(t) = \int f(t) \frac{|v_1|}{\sqrt{T(t) + |v_2|}} dv de$, $\gamma = 0.6$. Hard spheres.

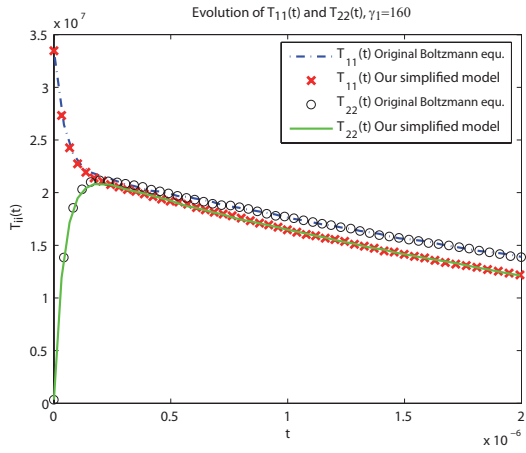


(a) $\gamma_1 = 160$.

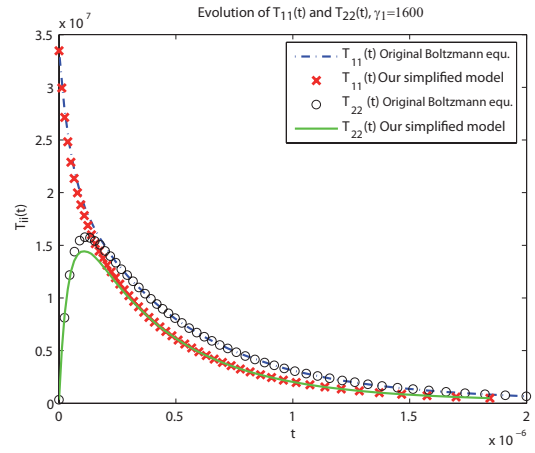


(b) $\gamma_1 = 1600$.

FIGURE 15. Evolution of $T_{12}(t)$. γ depending on $|v - v^*|$.

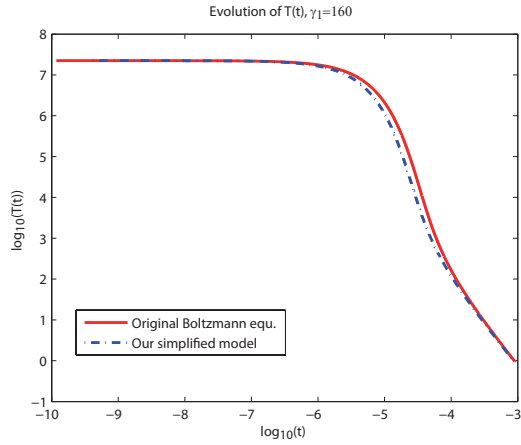


(a) $\gamma_1 = 160$.

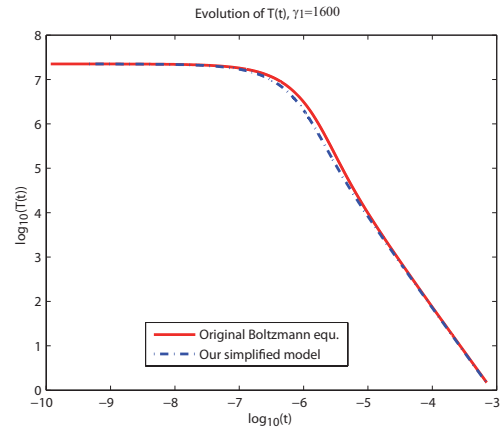


(b) $\gamma_1 = 1600$.

FIGURE 16. Evolution of $T_{11}(t)$, $T_{22}(t)$. γ depending on $|v - v^*|$.



(a) $\gamma_1 = 160$.



(b) $\gamma_1 = 1600$.

FIGURE 17. Evolution of $T(t)$. γ depending on $|v - v^*|$. Log-log scale.

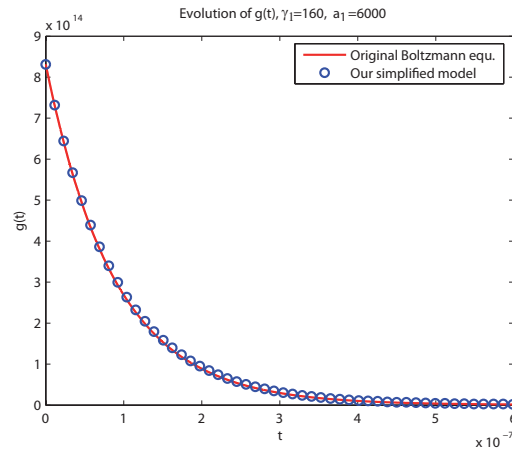


FIGURE 18. Evolution of $g(t)$ for $\gamma_1 = 160$, $a_1 = 6000$. γ , a depending on $|v - v^*|$.

Précisions supplémentaires sur le modèle de type BGK

Dans ce chapitre, on décrit en détail le schéma numérique utilisé pour résoudre numériquement l'équation (16) de l'article précédent. Il s'appuie sur des méthodes particulières de type Monte-Carlo.

Schémas numériques pour l'équation de Boltzmann et son modèle simplifié de type BGK

6.1 Brève description de la méthode de Monte-Carlo utilisée pour l'équation de Boltzmann

La méthode de Monte-Carlo utilisée dans [Bar04b] et [Mat06] est basée sur le tirage au sort à chaque pas de temps d'un certain nombre de couples de gouttelettes qui collisionnent (on utilise ici le terme gouttelettes pour désigner les pseudo-particules numériques liées à la méthode particulière (cf. Equ. (6.4))). Ce nombre est lié à la section efficace de collision, qui représente la probabilité qu'ont deux gouttelettes de collisionner. Le code a été écrit pour deux types de collisions :

- les collisions de type molécules maxwelliennes dans lesquelles toutes les gouttelettes ont la même probabilité de collisionner. Dans ce cas, la section efficace est une constante :

$$4\pi r^2. \tag{6.1}$$

Dans ce cadre le nombre de couples qui collisionnent est de l'ordre de $\frac{Cfl}{2}N_p$ où N_p est le nombre de gouttelettes considérées et Cfl correspond au pourcentage de gouttelettes que l'on veut faire collisionner (et qui dicte le choix du pas de temps : en pratique, on prend $Cfl=0,01$) [Bar04b]. On applique à ces couples les formules post-collisionnelles sur les vitesses et les énergies (Equations (1)-(2) et (4)-(5) de l'article précédent), ce qui fait un nombre d'opérations de l'ordre de $O(N_p)$ à chaque pas de temps. Ce code est assez efficace en terme de temps de calcul.

- les collisions avec section efficace de type "sphères dures" pour lesquelles on prend en compte la vitesse relative entre les deux gouttelettes pour

décider de leur éventuelle collision. La section efficace s'écrit cette fois-ci :

$$4\pi r^2 |v - v^*|. \quad (6.2)$$

Dans ce cadre, il est nécessaire de tester pour chaque couple de gouttelettes si elles vont pouvoir collisionner (plus la vitesse relative entre les gouttelettes est grande, plus la probabilité de collision est grande). Afin d'éviter de tester pour chaque couple quelle est la probabilité de collision, on introduit une méthode classique d'acceptation/rejet appelée dans ce cadre "méthode de collision fictive" (cf. [Bar04b]). Il faut alors connaître une majoration de la section efficace de collision, calculer le nombre de "collisions fictives" entre gouttelettes en supposant que la section efficace est le majorant (constant) obtenu, sélectionner les gouttelettes qui collisionnent comme dans le cas d'une section efficace de type "molécules maxwelliennes", puis effectuer les collisions pour chaque couple avec une probabilité qui dépend de la vitesse relative des gouttelettes dans le couple en question. Ces différentes étapes conduisent à un nombre d'opérations de l'ordre de $O(N_p)$ comme pour les collisions de type molécules maxwelliennes. Néanmoins le coût est nettement plus important du fait de la sélection plus complexe des couples entrant "véritablement" en collision.

6.2 Schéma numérique mis en place pour le modèle simplifié

L'équation du modèle simplifié (Eq. (16) de l'article) met en jeu à la fois des termes de retour à l'équilibre en vitesse et en énergie (liés aux coefficients c_1 , c_2 et c_3), un terme de dispersion en énergie (lié au coefficient c_4), et un terme de type BGK (lié au coefficient ν). L'équation résolue est la suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t f + \nabla_v \cdot (c_1(v - v_{avr})f) + \partial_e(c_2 f) + \partial_e(c_3(e - e_{avr})f) \\ + \partial_e(c_4 |v - v_{avr}|^4 \partial_e f) = -\nu(f - f_0). \end{aligned} \quad (6.3)$$

On veut obtenir un schéma qui soit conservatif en terme de masse, quantité de mouvement et énergie totale. On utilise pour cela une méthode particulière, i.e. on approxime la fonction de répartition f au temps t comme une somme de masses de Dirac (identifiées comme des gouttelettes numériques) :

$$f(t, v, e) = \sum_{i=1}^N w \delta_{v=v_i(t)} \delta_{e=e_i(t)}, \quad (6.4)$$

où N est le nombre de gouttelettes, et w leur poids numérique (ou représentativité), supposé ici identique pour chaque gouttelette numérique.

La discrétisation en temps se fait grâce à un splitting d'opérateurs en trois étapes :

- la résolution des termes de retour vers la valeur moyenne en vitesse ($\nabla_v \cdot (c_1(v - v_{avr})f)$) et en énergie interne ($\partial_e(c_2f) + \partial_e(c_3(e - e_{avr})f)$),
- la résolution du terme de diffusion en énergie interne $\partial_e(c_4|v - v_{avr}|^4\partial_e f)$,
- la résolution du terme de type BGK $-\nu(f - f_0)$.

Les quantités v_{avr} , e_{avr} , T et T_{ij} utilisées dans l'équation (6.3) sont discrétisées sous la forme :

$$v_{avr}(t) = \frac{1}{N} \sum_i v_i(t), \quad (6.5)$$

$$e_{avr}(t) = \frac{1}{N} \sum_i e_i(t), \quad (6.6)$$

$$T(t) = \frac{1}{3N} \sum_i |v_i(t) - v_{avr}(t)|^2, \quad (6.7)$$

$$T_{ij}(t) = \sum_p (v_{ip}(t) - v_{iavr}(t)) (v_{jp}(t) - v_{javr}(t)). \quad (6.8)$$

1. Résolution des termes de retour :

On commence par résoudre la première étape du splitting :

$$\partial_t f + \nabla_v \cdot (c_1(v - v_{avr})f) + \nabla_e(c_2f) + \nabla_e(c_3(e - e_{avr})f) = 0, \quad (6.9)$$

où $c_1 = \frac{3S_1(t)}{8r} [-1 + \frac{\gamma}{2} + \gamma^2] (1 - \alpha)$ (Eq. (21) de l'article), $c_2 = -\frac{9S_1(t)}{8r} [-1 + \frac{\gamma}{2} + \gamma^2] (1 - \alpha)T(t)$ (Eq. (22) de l'article) et $c_3 = -\frac{3S_3(t)}{4r} a(2 - a)(1 - \alpha)$ (Eq. (23) de l'article). Les fonctions S_1 et S_3 dépendent du type des collisions envisagées (maxwelliennes / Sphères dures) et sont calculables à partir de $T(t)$ (ainsi que des températures d'agitation directionnelles $T_{ij}(t)$ si nécessaire) [équations (26) à (28) de l'article pour le cas sphères dures].

On suppose connues les vitesses v_p^n et les énergies internes e_p^n des gouttelettes au temps t^n . On en déduit immédiatement v_{avr}^n , e_{avr}^n , T^n , T_{ij}^n ainsi que les coefficients associés c_1^n , c_2^n et c_3^n . On notera $v_p^{n+1/3}$, $e_p^{n+1/3}$, $v_{avr}^{n+1/3}$, $e_{avr}^{n+1/3}$, $T^{n+1/3}$ et $T_{ij}^{n+1/3}$ les quantités obtenues à la fin de cette étape.

Pour chaque gouttelette i , on veut résoudre :

$$\frac{dv_i}{dt}(t) = c_1(t)(v_i(t) - v_{avr}(t)), \quad (6.10)$$

$$\frac{de_i}{dt}(t) = c_2(t) + c_3(t)(e_i(t) - e_{avr}(t)), \quad (6.11)$$

ce qui conduit au schéma suivant :

$$v_i^{n+1/3} = e^{c_1^n \Delta t} v_i^n + (1 - e^{c_1^n \Delta t}) v_{avr}^n, \quad (6.12)$$

$$e_i^{n+1/3} = e^{c_3^n \Delta t} e_i^n + (1 - e^{c_3^n \Delta t}) e_{avr}^n + \frac{3}{2} T^n (1 - e^{2c_1^n \Delta t}). \quad (6.13)$$

Des calculs immédiats montrent que :

$$v_{avr}^{n+1/3} = v_{avr}^n,$$

$$e_{avr}^{n+1/3} + \frac{1}{2N} \sum_i (v_i^{n+1/3})^2 = e_{avr}^n + \frac{1}{2N} \sum_i (v_i^n)^2.$$

On a conservation exacte de la masse, de l'impulsion et de l'énergie totale dans cette phase.

Remarque 6.2.1 *Le schéma est clairement consistant en vitesse et en énergie. L'utilisation d'exponentielles permet d'obtenir des combinaisons convexes assurant plus de stabilité (que l'utilisation de formules linéaires) pour les pas de temps très grands.*

2. Résolution de la diffusion en énergie :

L'étape suivante du splitting en temps consiste à résoudre le terme de diffusion en énergie :

$$\partial_t f = \nabla_e (c_4 |v - v_{avr}|^4 \nabla_e f).$$

On va obtenir les énergies $e_i^{n+2/3}$ à l'étape $n + 2/3$. Les vitesses restent inchangées dans cette phase :

$$v_i^{n+2/3} = v_i^{n+1/3}.$$

Les énergies internes sont modifiées via l'équation suivante :

$$e_i^{n+2/3} = e_i^{n+1/3} + \sqrt{2|c_4^{n+1/3}| |v_i - v_{avr}|^4 dt} \sigma, \quad (6.14)$$

où σ est un vecteur aléatoire gaussien [LPS98] et $c_4^{n+1/3} = -\frac{S_4(t^{n+1/3})}{32r} (1 - \gamma^2)^2 (1 - \alpha)$. On s'assure de la conservation de l'énergie interne et du respect de la variance de la distribution en énergie interne en normalisant les énergies internes via une transformation affine, effectuée à l'issue de la phase décrite ci-dessus.

3. Résolution du terme BGK

Finalement, il reste à traiter le terme :

$$\partial_t f = -\nu(f - f_0).$$

Après discrétisation en temps, il s'agit de résoudre :

$$\frac{f^{n+1} - f^{n+2/3}}{\Delta t} = -\nu f^{n+2/3} + \nu f_0^{n+2/3}, \quad (6.15)$$

i.e.

$$f^{n+1} = (1 - \nu\Delta t)f^{n+2/3} + \nu\Delta t f_0^{n+2/3}. \quad (6.16)$$

Ceci revient à dire qu'une proportion (tirée aléatoirement avec une loi uniforme) de $(1 - \nu\Delta t)$ gouttelettes restent avec la distribution $f^{n+2/3}$ (i.e. avec les vitesses et les énergies obtenues lors de l'étape précédente) et qu'une proportion de $\nu\Delta t$ gouttelettes voient leurs vitesses tirées aléatoirement selon une distribution gaussienne de paramètres $v_{avr}^{n+2/3}$, $T_{avr}^{n+2/3}$.

Les énergies internes ne sont pas modifiées dans cette phase :

$$e_i^{n+1} = e_i^{n+2/3}.$$

Cette étape se termine par la normalisation des vitesses destinée à préserver l'impulsion et la température d'agitation (on le fait via une transformation affine des vitesses).

On a alors :

$$v_{avr}^{n+1} = v_{avr}^{n+2/3},$$

et

$$T^{n+1} = T^{n+2/3},$$

et on peut vérifier que la masse, l'impulsion et l'énergie totale sont bien préservées dans l'ensemble du schéma.

Remarque 6.2.2 (Au sujet des normalisations) *Si l'ajout des étapes de normalisation lors des tirages aléatoires permet de garantir la conservation de l'impulsion et de l'énergie, elle introduit néanmoins un biais au niveau des probabilités qui peut dégrader la précision des calculs (et en tout cas ne l'améliore pas).*

6.3 Conclusion

On a présenté dans cette partie la mise en œuvre d'une méthode numérique pour le modèle simplifié de type BGK. Des propriétés de stabilité sont apparues pour les phénomènes de diffusion nous fournissant des conditions CFL sur le pas de temps ; ces conditions CFL sont du même ordre que celle des méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann (aucun gain n'est à attendre de ce côté là). Une étude plus approfondie sera nécessaire pour évaluer les gains en temps (l'étude présentée ici a été faite à partir de Matlab) en utilisant des langages de calcul scientifique (C/C++/Fortran). Qualitativement, les premiers résultats ont tendance à montrer que l'on peut obtenir avec le modèle simplifié une précision identique (à celle obtenue avec le modèle initial) avec nettement moins de gouttelettes, lorsque l'on ne cherche pas une précision trop grande. Ceci devrait permettre un gain de temps significatif dans les codes "gaz-particules" (sprays) *via* l'utilisation de moins de gouttelettes.

Annexe

Ordre du schéma BBC classique

La preuve que le schéma BBC classique est d'ordre 2 n'a été explicitée dans la section 2.2 que pour l'équation en vitesse du schéma BBC classique en question. Ci-dessous on trouvera la preuve complète pour les deux autres équations du schéma.

A.1 Ordre de l'équation de conservation de la masse

On va maintenant considérer l'équation de conservation de la masse. Cette fois-ci, contrairement à ce qui se passe pour la vitesse, la densité ρ est connue au centre des mailles et non plus aux cloisons. A partir de la définition de l'advection du maillage (2.110) :

$$x_{i-1/2}^{n+1} = x_{i-1/2}^n + \Delta t u_{i-1/2}^n - (\Delta t)^2 \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \quad (\text{A.1})$$

on obtient immédiatement que le centre de la maille déformée au temps $n + 1$ avant projection est défini par :

$$x_i^{n+1} := \frac{x_{i-1/2}^{n+1} + x_{i+1/2}^{n+1}}{2} = x_i^n + \Delta t \frac{u_{i-1/2}^n + u_{i+1/2}^n}{2} - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}. \quad (\text{A.2})$$

La formule correspondant à $\frac{1}{\rho}$ dans le schéma s'écrit d'après (2.103) :

$$\frac{\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^n}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (\text{A.3})$$

où les $u^{n+1/2}$ sont définis par (2.93) et (2.105). Comme pour la première équation, on va d'abord considérer le membre de gauche de (A.3). On veut obtenir un d.l. de la fonction continue définie par ce schéma exprimé au temps t^n prise aux points x_i . On considère toujours la quantité H définie par (2.111), et la même quantité décalée de Δx en espace et que l'on va noter G :

$$\begin{aligned}
G := & f \left\{ \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right) \right. \\
& - \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{2\Delta m_{i+1}} \left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right), \\
& e(x_{i+1}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right) \\
& \left. + p(x_{i+1}, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right) \right\} \\
- & f \left\{ \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) \right. \\
& - \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{2\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right), \\
& e(x_i, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) \\
& \left. + p(x_i, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right) \right\}. \tag{A.4}
\end{aligned}$$

Le centre du maillage déformé (A.2) au pas de temps $n + 1$ et exprimé entièrement au pas de temps n grâce à (2.105) s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
x_i^{n+1} = & x_i^n + \Delta t \frac{u(x_{i-1/2}, t^n) + u(x_{i+1/2}, t^n)}{2} - \frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \frac{G}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Grâce à la formule de Taylor et à l'équation d'évolution du centre du maillage (A.5), on obtient que :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n) & = k \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) + h \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \tag{A.6} \\
& + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) + hk \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) + O(|h|^3) + O(|k|^3),
\end{aligned}$$

avec cette fois-ci,

$$\begin{aligned}
k = & \Delta t \frac{u(x_{i-1/2}, t^n) + u(x_{i+1/2}, t^n)}{2} - \frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\
& - \frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)}, \tag{A.7}
\end{aligned}$$

et toujours

$$h = \Delta t.$$

Partie A Phase A_1

Proposition A.1.1 *Le développement limité du membre de gauche de l'équation en $\frac{1}{\rho}$ correspondant à la partie gauche de (A.3) est :*

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u(x_i, t^n) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \Delta t \frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \tag{A.8}$$

On obtient ce résultat en deux temps : d'abord en faisant un développement à l'ordre 2 en espace et en temps de $\frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t}$ au point (x_i, t^n) qui nous donnera un premier développement limité (A.45), et ensuite en regroupant les termes faisant apparaître des dérivées de $\frac{1}{\rho}$ à partir des équations continues (2.85)-(2.87). On simplifiera des termes afin d'obtenir (A.8).

Pour le développement limité, il faut que tous les termes de la formule de Taylor précédente (A.6), à savoir $\frac{k}{h}$, $\frac{k^2}{h}$, k , soient développés à l'ordre 2 en espace et en temps. C'est le terme $\frac{k}{h}$ qui aura le plus petit reste, on veut en particulier que $\frac{k}{h}$ soit d'ordre 2 et grâce à la condition CFL $\Delta t = O(\Delta x)$, on voit qu'il faut chercher un développement limité de H et G à l'ordre 2 en espace et en temps.

A partir de maintenant, on va omettre de préciser l'exposant relatif au temps : dans toute la suite, les points du maillage sont considérés au pas de temps n :

$$x_{i-1/2}^n = x_{i-1/2} \text{ et } x_i^n = x_i. \tag{A.9}$$

On se rappelle que le schéma BBC est un schéma de type Lagrange-projection : au début d'un pas de temps n , on se trouve sur un maillage cartésien de pas d'espace Δx . On a donc les relations suivantes dans toute la suite :

$$x_{i+1/2}^n - x_{i-1/2}^n = x_{i+1/2} - x_{i-1/2} = \Delta x, \tag{A.10}$$

$$x_{i+1}^n - x_i^n = x_{i+1} - x_i = \Delta x. \tag{A.11}$$

De plus, comme x_i correspond au centre de la maille de cloisons $x_{i-1/2}$, $x_{i+1/2}$, on a aussi la relation :

$$x_{i+1/2}^n - x_i^n = x_{i+1/2} - x_i = \frac{\Delta x}{2}. \tag{A.12}$$

On veut obtenir un d.l. au point x_i de $\frac{k}{h}$, on va donc chercher un d.l. à l'ordre 2 en espace et en temps de H et de G aux points x_{i-1} et x_{i+1} respectivement.

Dans l'expression de k , on a déjà que :

$$\frac{u(x_{i-1/2}^n, t^n) + u(x_{i+1/2}^n, t^n)}{2} = u(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2). \tag{A.13}$$

Afin d'obtenir le d.l. de G au point x_{i+1} , on va introduire dans G :

$$-f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right), \tag{A.14}$$

si bien que :

$$\begin{aligned}
G &= f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + K_1, e(x_{i+1}, t^n) + K_2\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
&+ \left(f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) - f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + K_3, e(x_{i+1}, t^n) + K_4\right) \right),
\end{aligned} \tag{A.15}$$

avec

$$\begin{aligned}
K_1 &= \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right)}_3 \\
&- \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{2\Delta m_{i+1}} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}}}_5 - \underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_6 \right),
\end{aligned} \tag{A.16}$$

$$\begin{aligned}
K_2 &= -p(x_{i+1}, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(u(x_{i+3/2}, t^n) - u(x_{i+1/2}, t^n) \right)}_{11} \\
&+ p(x_{i+1}, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_{i+1}} \underbrace{\left(\frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\Delta m_{i+2} + \Delta m_{i+1}} - \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} \right)}_{12},
\end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
K_3 &= \frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \underbrace{\left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right)}_4 \\
&- \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{2\Delta m_i} \left(\underbrace{\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i}}_{5bis} - \underbrace{\frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}}_{6bis} \right),
\end{aligned} \tag{A.18}$$

et

$$\begin{aligned}
K_4 &= e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right) \\
&+ p(x_i, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right).
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Grâce à la formule de Taylor, on a :

$$\begin{aligned}
G &= (K_1 - K_3) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + (K_2 - K_4) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
&+ O(K_1^2) + O(K_2^2) + O(K_3^2) + O(K_4^2).
\end{aligned} \tag{A.20}$$

On va obtenir un d.l.à l'ordre 2 de $K_1 - K_3$ et de $K_2 - K_4$. La plupart des termes correspondent à des restes d'ordre 2.

- On commence par obtenir un d.l. à l'ordre de 2 de la différence de termes 3 – 4, on a (comme $x_{i+3/2} - x_{i+1} = \frac{\Delta x}{2}$) :

$$3 - 4 = \frac{\Delta t}{2\Delta x}(c_1(x_{i+3/2}) - c_1(x_{i+1/2})) = \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial c_1}{\partial x}(x_{i+1}) + O((\Delta x)^2)\right), \quad (\text{A.21})$$

où

$$c_1(x) := \frac{u(x, t^n) - u(x - \Delta x, t^n)}{\rho(x - \frac{\Delta x}{2}, t^n)}. \quad (\text{A.22})$$

Or en dérivant la fonction $c_1(x)$, on voit immédiatement comme pour la fonction a lors de l'étude de l'équation en vitesse (2.127) :

$$\frac{\partial c_1}{\partial x} = O(\Delta x), \quad (\text{A.23})$$

donc

$$3 - 4 = O(\Delta t \Delta x). \quad (\text{A.24})$$

Cette différence de terme est un terme d'ordre 2.

- Pour les termes 5 – 5bis, on a

$$5 - 5bis = -\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \underbrace{[d(x_{i+3/2}) - d(x_{i+1/2})]}_{=\Delta x \frac{\partial d}{\partial x}(x_{i+1}) + O((\Delta x)^2)}, \quad (\text{A.25})$$

où

$$d(x) := \frac{p(x + \frac{\Delta x}{2}) - p(x - \frac{\Delta x}{2})}{\rho(x - \frac{\Delta x}{2})(\rho(x + \frac{\Delta x}{2}) + \rho(x - \frac{\Delta x}{2}))}. \quad (\text{A.26})$$

De par la forme de la fonction d , on obtient aussi immédiatement que $\frac{\partial d}{\partial x} = O(\Delta x)$, d'où

$$5 - 5bis = O((\Delta t)^2). \quad (\text{A.27})$$

Enfin pour les termes 6 – 6bis,

$$6 - 6bis = \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} \underbrace{[z(x_{i+1}) - z(x_i)]}_{\Delta x \frac{\partial z}{\partial x}(x_{i+1}) + O((\Delta x)^2)}, \quad (\text{A.28})$$

où

$$z(x) = \frac{p(x) - p(x - \Delta x)}{\rho(x)(\rho(x) + \rho(x - \Delta x))}. \quad (\text{A.29})$$

Toujours en dérivant la fonction z , on obtient que $\frac{\partial z}{\partial x} = O(\Delta x)$ et donc

$$6 - 6bis = O((\Delta t)^2). \quad (\text{A.30})$$

Pour obtenir le d.l. à l'ordre 2 de $K_1 - K_3$, il reste encore à obtenir le d.l. de $-\left[\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n)\right]$:

$$-\left[\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n)\right] = \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.31})$$

Donc grâce à (A.31), (A.30), (A.27), (A.24), on a :

$$K_1 - K_3 = \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \quad (\text{A.32})$$

En faisant la même chose pour $K_2 - K_4$ (en prenant des fonctions similaires à c_1, o, d multipliées par un terme de pression), on obtient que

$$K_2 - K_4 = \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \quad (\text{A.33})$$

De plus, grâce à la condition CFL ($\Delta t = O(\Delta x)$), on voit que les quantités K_1, K_2, K_3, K_4 sont des termes d'ordre 1 en temps et en espace, donc

$$O(K_1^2) = O(K_2^2) = O(K_3^2) = O(K_4^2) = O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.34})$$

Et ainsi, en repartant de (A.20), on a obtenu le développement limité de G :

$$\begin{aligned} G &= \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\ &\quad + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Comme la fonction G est en fait une fonction qui dépend du point x_{i+1} et de l'instant t^n , on va la renommer :

$$G := M(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2), \quad (\text{A.36})$$

comme H est la même fonction décalée d'un pas d'espace, on aura $H = M(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2)$.

En utilisant (A.7) et (A.13), on obtient que

$$\begin{aligned} k &= \Delta t u(x_i, t^n) + O(\Delta t (\Delta x)^2) - \frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \left[\frac{M(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ &\quad + O((\Delta t)^3) + O(\Delta t (\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

On s'est servi ici du fait que : $\Delta t = O(\Delta x)$ pour obtenir les O de k provenant des d.l. de G et de H .

Si on note :

$$K(x, t) = \frac{M(x, t)}{\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)}, \quad (\text{A.38})$$

on a

$$-\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \left[\frac{M(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] = -\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \underbrace{[K(x_{i+1}, t^n) + K(x_i, t^n)]}_{2K(x_i, t^n) + \Delta x \frac{\partial K}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2)}.$$

Comme $M(x_i, t^n) = O(\Delta x)$, on aura aussi que $\frac{\partial M}{\partial x} = O(\Delta x)$ en dérivant. Donc en dérivant la fonction K , on obtient que $\frac{\partial K}{\partial x} = O(\Delta x)$, d'où

$$-\frac{(\Delta t)^2}{2\Delta x} \left[\frac{M(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} + \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] = -\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} K(x_i, t^n) + O((\Delta t)^2 \Delta x). \quad (\text{A.39})$$

Ainsi, en introduisant (A.39) dans (A.37), on obtient la formule :

$$k = \Delta t u(x_i, t^n) + O(\Delta t (\Delta x)^2) - \frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \underbrace{K(x_i, t^n)}_{\frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}} + O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x). \quad (\text{A.40})$$

En réécrivant (A.6) sous la forme

$$\frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} = \frac{k}{h} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{k^2}{2h} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) + k \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) + O(|h|^2) + O\left(\frac{|k|^3}{h}\right),$$

et en utilisant (A.40), on s'arrête à l'ordre 2 en espace et en temps et on obtient finalement le d.l. suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= \left[u(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta t (u(x_i, t^n))^2 \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \Delta t u(x_i, t^n) \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2), \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

car

$$\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{M(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} = O((\Delta t)^2), \quad M(x_i, t^n) = O(\Delta x), \quad (\text{A.42})$$

et

$$k = O(\Delta t). \quad (\text{A.43})$$

On voit alors apparaître la dérivée de la pression (2.140) :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{\Delta x} M(x_i, t^n) &= \Delta t \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \\ &\quad + \Delta t \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \\ &= \Delta t \frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n). \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

Ainsi, on obtient l'expression intermédiaire du développement limité du membre de gauche de l'équation en $\frac{1}{\rho}$.

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u(x_i, t^n) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \Delta t \frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta t (u(x_i, t^n))^2 \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \Delta t u(x_i, t^n) \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

Phase A_2

Afin d'obtenir la quantité de la Proposition A.1.1 (A.8), on veut exprimer la quantité suivante :

$$\frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho}, \quad (\text{A.46})$$

en fonction de $\partial_{xx}^2 p$.

En dérivant l'équation de conservation de la masse (2.85) par rapport au temps et à l'espace, on obtient :

$$\partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + (\partial_t u)(\partial_x \frac{1}{\rho}) + u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} = (\partial_t \frac{1}{\rho})(\partial_x u) + \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u, \quad (\text{A.47})$$

$$\text{et } \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} + u \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 u, \quad (\text{A.48})$$

et en utilisant (A.47) et (A.48),

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x \frac{1}{\rho}) - \frac{\Delta t}{2} u \underbrace{\partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho}}_{= -u \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 u \text{ par (A.48)}} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho})(\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x \frac{1}{\rho}) + \Delta t u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho})(\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u. \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Finalement, on obtient l'expression de (A.46) :

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) + \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} \partial_{xt}^2 u. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Maintenant, on dérive l'équation en vitesse (2.86) par rapport à x , on obtient

$$\partial_{tx}^2 u + (\partial_x u)^2 + u \partial_{xx}^2 u = -\frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 p - (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p), \quad (\text{A.51})$$

et on réinjecte cette expression dans (A.50), ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt}^2 \frac{1}{\rho} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 \frac{1}{\rho} + \Delta t u \partial_{xt}^2 \frac{1}{\rho} \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) + \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} (\partial_t \frac{1}{\rho}) (\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x u)^2}_{= \frac{\Delta t}{2} \partial_x u (-u \partial_x \frac{1}{\rho}) \text{ par (2.85)}} \\ & \quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{u}{\rho} \partial_{xx}^2 u - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p) \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) - \frac{\Delta t}{2} u (\partial_x u) (\partial_x \frac{1}{\rho}) - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p) \\ &= -\frac{\Delta t}{2} (\partial_x \frac{1}{\rho}) \underbrace{(\partial_t u + u \partial_x u)}_{= -\frac{1}{\rho} \partial_x p \text{ par (2.86)}} - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p) \\ & \quad = -\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p. \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

Le membre de gauche (A.45) s'écrit en utilisant la dernière relation :

$$\begin{aligned} \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u(x_i, t^n) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i, t^n) - \Delta t \frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i, t^n) \\ & \quad + \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p \\ & \quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2), \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

ce qui correspond bien à la Proposition A.1.1 (A.8).

Partie B

On peut maintenant passer à l'étude du membre de droite de l'équation, c'est-à-dire d'après (A.3), (2.93) et (2.105) :

$$\begin{aligned} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} &= -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\ & \quad + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}. \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

On veut aussi développer ce terme à l'ordre 2 en temps et en espace au point (x_i, t^n) .

Pour le premier terme, on obtient directement :

$$\frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} = \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.55})$$

Cette fois-ci, G et H sont multipliés par $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, donc il va falloir obtenir des d.l. à l'ordre 3 en temps et en espace et non plus à l'ordre 2.

Proposition A.1.2 *Le développement limité du membre de droite de l'équation de conservation de la masse est :*

$$\begin{aligned}
& \frac{u(x_{i+1/2,t^n}) - u(x_{i-1/2,t^n})}{\Delta x \rho(x_i,t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i,t^n)} \frac{G}{\rho(x_i,t^n) + \rho(x_{i+1,t^n})} \\
& + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i,t^n)} \frac{H}{\rho(x_i,t^n) + \rho(x_{i-1,t^n})} \\
& = \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \\
& \quad - \Delta t \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \frac{\partial p}{\partial x}(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \\
& + O(\Delta t \Delta x) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \tag{A.56}
\end{aligned}$$

Pour obtenir ce résultat, on reprend d'abord le développement limité de G au point x_{i+1} (A.15) avec les K_i . On effectue cette fois-ci un développement limité à un ordre supérieur :

$$\begin{aligned}
G & = (K_1 - K_3) \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + (K_2 - K_4) \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
& + \frac{K_1^2 - K_3^2}{2} \partial_{11}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) + \frac{K_2^2 - K_4^2}{2} \partial_{22}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
& + (K_1 K_2 - K_3 K_4) \partial_{12}^2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \\
& + O(K_1^3) + O(K_2^3) + O(K_3^2) + O(K_4^2). \tag{A.57}
\end{aligned}$$

On reprend tous les d.l. qu'on a effectués pour le membre de gauche et on va un ordre plus loin.

On a toujours (comme $x_{i+3/2} - x_{i+1/2} = \Delta x$) par définition du schéma

$$3 - 4 = \frac{\Delta t}{2\Delta x} [c_1(x_{i+3/2}) - c_1(x_{i+1/2})] = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_1}{\partial x}(x_{i+1}) + O((\Delta t)(\Delta x)^2). \tag{A.58}$$

Ensuite

$$\begin{aligned}
5 - 5bis & = -\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} [d(x_{i+3/2}) - d(x_{i+1/2})] \\
& = -\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \left[\frac{\partial d}{\partial x}(x_{i+1}) \right] + O((\Delta t)^2(\Delta x)), \tag{A.59}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
6 - 6bis & = \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} [z(x_{i+1}) - z(x_i)] \\
& = \frac{(\Delta t)^2}{4} \left[\frac{1}{\Delta x} \frac{\partial z}{\partial x}(x_{i+1}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(x_{i+1}) \right] \\
& \quad + O((\Delta t)^2 \Delta x). \tag{A.60}
\end{aligned}$$

Enfin, pour le dernier terme, on a

$$\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) = -\Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^{\frac{2}{\rho}}}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^3), \quad (\text{A.61})$$

d'où finalement :

$$\begin{aligned} (K_1 - K_3) \quad \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) &= \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \left[\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_1}{\partial x}(x_{i+1}) \right. \\ &\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d}{\partial x}(x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial z}{\partial x}(x_{i+1}) - \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(x_{i+1}) \\ &\quad \left. + \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^{\frac{2}{\rho}}}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) \right] \\ &\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta t)^2 (\Delta x)). \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

On traite exactement de la même manière les termes de $K_2 - K_4$: on pose

$$c_2(x) = p\left(x - \frac{\Delta x}{2}, t^n\right)c_1(x), \quad d_2(x) = p\left(x - \frac{\Delta x}{2}, t^n\right)d(x), \quad z_2(x) = p(x, t^n)z(x). \quad (\text{A.63})$$

Comme on a $K_2 = -p(x_{i+1}, t^n)K_1$ et comme K_4 (A.19) s'exprime en fonction des termes de K_3 (A.18) :

$$K_4 = e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)(4) - p(x_i, t^n)(5bis - 6bis). \quad (\text{A.64})$$

Cela conduit au d.l. de $K_2 - K_4$:

$$\begin{aligned} K_2 - K_4 &= -(e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n)) - p(x_{i+1}, t^n)K_1 + p(x_i, t^n)(4) \\ &\quad + p(x_i, t^n)(5bis - 6bis) \\ &= \underbrace{-(e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n))}_{= \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^3)} - \underbrace{\left[p(x_{i+1}, t^n)(3) - p(x_i, t^n)(4) \right]}_{= \frac{\Delta t}{2\Delta x} [c_2(x_{i+3/2}) - c_2(x_{i+1/2})]} \\ &\quad - \underbrace{\left[p(x_{i+1}, t^n)(5) - p(x_i, t^n)(5bis) \right]}_{= -\frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} (d_2(x_{i+3/2}) - d_2(x_{i+1/2}))} \\ &\quad - \underbrace{\left[p(x_{i+1}, t^n)(6) - p(x_i, t^n)(6bis) \right]}_{= \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2} (z_2(x_{i+1}) - z_2(x_i))}. \end{aligned} \quad (\text{A.65})$$

Finalement :

$$\begin{aligned} (K_2 - K_4) \quad \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) &= \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n)\right) \left[-\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_2}{\partial x}(x_{i+1}) \right. \\ &\quad + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d_2}{\partial x}(x_{i+1}) - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial z_2}{\partial x}(x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 z_2}{\partial x^2}(x_{i+1}) \\ &\quad \left. + \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^{\frac{2}{\rho}}}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) \right] \\ &\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^2 \Delta x) + O((\Delta t)(\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

Pour obtenir l'ordre 3 du développement de G , on a besoin de connaître les d.l. de $K_i^2, i \in [1, 4]$ et de $K_i K_j, i \neq j$ à l'ordre 3. On reprend tous les d.l. précédents en considérant les K_i séparément cette fois-ci.

On commence d'abord par K_1 qui regroupe les termes 3, 5 et 6 ($K_1 = 3 + 5 + 6$).

Pour le terme 3 :

$$\begin{aligned} 3 &= \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} [\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^3)] \\ &= \frac{\Delta t}{2\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O(\Delta t(\Delta x)^2), \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

pour le terme 5 :

$$\begin{aligned} 5 &= -\frac{(\Delta t)2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{p(x_{i+2}, t^n) - p(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_{i+2}, t^n)} \\ &= -\frac{(\Delta t)2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\Delta x \frac{\partial p}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^3)}{\rho(x_{i+1}, t^n) + \rho(x_{i+2}, t^n)}, \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

pour le terme 6 :

$$\begin{aligned} 6 &= \frac{(\Delta t)2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\ &= \frac{(\Delta t)2}{4(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\Delta x \frac{\partial p}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) - \frac{1}{2}(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^3)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)}. \end{aligned} \quad (\text{A.69})$$

Si on note

$$l(x) = \frac{1}{\rho(x, t^n) + \rho(x + \Delta x, t^n)}, \quad (\text{A.70})$$

on a

$$\begin{aligned} 5 + 6 &= -\frac{(\Delta t)2}{4\Delta x} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\partial p}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \left[\underbrace{l(x_{i+1}) - l(x_i)}_{=\Delta x \frac{\partial l}{\partial x}(x_{i+1}) + O((\Delta x)^2)} \right] \\ &\quad - \frac{(\Delta t)2}{8\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x_{i+1}, t^n) \left[\underbrace{l(x_{i+1}) + l(x_i)}_{=2l(x_{i+1}) + O(\Delta x)} \right] + O((\Delta t)^2 \Delta x). \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

Donc finalement, comme $5 + 6 = O((\Delta t)^2)$, seul le terme 3 donne une contribution autre qu'un reste d'ordre 3 pour K_1^2 :

$$\frac{K_1^2}{2} = \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n))^2}{(\rho(x_{i+1}, t^n))^2} + O((\Delta t(\Delta x)^2) + O(\Delta x(\Delta t)^2) + O((\Delta t)^3)). \quad (\text{A.72})$$

Pour K_2 , le terme 12 est similaire aux termes 5 et 6 (en les multipliant par la pression), on obtient de la même manière que $12 = O((\Delta t)^2)$.

Pour 11, on refait la même chose que pour 3 et on obtient :

$$11 = -\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho(x_{i+1}, t^n)} p(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}) + O(\Delta t(\Delta x)^2). \quad (\text{A.73})$$

Ainsi

$$\frac{K_2^2}{2} = \frac{(\Delta t)^2}{8} (p(x_{i+1}, t^n))^2 \frac{(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n))^2}{(\rho(x_{i+1}, t^n))^2} + O((\Delta t(\Delta x)^2) + O(\Delta x(\Delta t)^2) + O((\Delta t)^3)). \quad (\text{A.74})$$

Pour le double produit $K_1 K_2$, comme on s'arrête à l'ordre 3 et que 5, 6 et 12 sont des $O((\Delta t)^2)$, $K_1 K_2$ va correspondre au produit des termes d'ordre 1 de K_1 et K_2 respectivement. On obtient :

$$K_1 K_2 = -p(x_{i+1}, t^n) \frac{(\Delta t)^2}{4} \frac{(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n))^2}{(\rho(x_{i+1}, t^n))^2} + O((\Delta t)^3). \quad (\text{A.75})$$

Il reste encore à traiter les termes K_3 et K_4 : *5bis* et *6bis* (A.18) sont exactement identiques à 5 et 6 (A.16), mais pris au point x_i au lieu du point x_{i+1} et sont des restes d'ordre 2 :

$$5bis + 6bis = O((\Delta t)^2). \quad (\text{A.76})$$

On a donc

$$\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) - \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) = -\Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.77})$$

Pour le terme 4, on obtient comme pour le terme 3

$$4 = \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} = \frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O(\Delta t(\Delta x)^2). \quad (\text{A.78})$$

Cette fois-ci, pour K_3 , on a un terme supplémentaire à l'ordre 1 par rapport à K_1 et qui va apparaître dans le d.l. à l'ordre 3 de K_3^2 ainsi que dans le double produit $K_3 K_4$:

$$\begin{aligned} \frac{K_3^2}{2} &= \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{8} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 \\ &- \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta t(\Delta x)^2) + O(\Delta x(\Delta t)^2) + O((\Delta t)^3)). \end{aligned} \quad (\text{A.79})$$

L'objectif est d'exprimer le d.l. de G (A.57) entièrement au point x_{i+1} .

Comme pour toute fonction $f \in C^1$, $f(x_i) = f(x_{i+1}) + O(\Delta x)$, on peut remplacer toutes les fonctions en x_i dans le d.l. précédent par des fonctions en x_{i+1} tout en conservant l'ordre 3 du d.l., i.-e. :

$$\begin{aligned} \frac{K_3^2}{2} &= \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{8} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 \\ &- \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} \frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta t(\Delta x)^2) + O(\Delta x(\Delta t)^2) + O((\Delta t)^3)). \end{aligned} \quad (\text{A.80})$$

Pour finir, on s'occupe de K_4 :

Pour $e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n)$, on peut s'arrêter à l'ordre 2 pour obtenir l'ordre 3 dans K_4^2 et K_3K_4 car tous les termes de K_4 seront d'ordre 1 :

$$e(x_i, t^n) - e(x_{i+1}, t^n) = -\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.81})$$

Les deux termes de K_4 (A.19) qui sont comme *5bis* et *6bis* (A.18) mais multipliés par $-p(x_i, t^n)$, vont aussi être un $O((\Delta t)^2)$, donc n'interviendront que sous la forme de reste d'ordre 3 dans K_4^2 et K_3K_4 .

Enfin pour le dernier terme de K_4 , on a

$$\begin{aligned} -p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2\Delta x} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \underbrace{(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n))}_{= \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^2)} &= \\ -p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O(\Delta t(\Delta x)). & \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{K_4^2}{2} &= \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{8} (p(x_i, t^n))^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 \\ &+ \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O(\Delta t(\Delta x)^2) \\ &+ O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2(\Delta x)). \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

Comme précédemment, on va remplacer les fonctions prises en x_i par des fonctions prises en x_{i+1} tout en conservant l'ordre 3 du d.l. grâce à la relation : $f(x_i) = f(x_{i+1}) + O(\Delta x)$. On obtient donc

$$\begin{aligned} \frac{K_4^2}{2} &= \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 + \frac{(\Delta t)^2}{8} (p(x_{i+1}, t^n))^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 \\ &+ \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) + O(\Delta t(\Delta x)^2) \\ &+ O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2(\Delta x)). \end{aligned} \quad (\text{A.84})$$

Pour le double produit K_3K_4 , comme on veut obtenir un d.l. à l'ordre 3, on ne va conserver que les deux termes d'ordre 1 de ces deux quantités, les autres termes seront dans le reste :

$$\begin{aligned} K_3K_4 &= \left(-\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right) \\ &\left(-\Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} p(x_{i+1}, t^n) + \frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right) + O(\Delta t(\Delta x)^2) \\ &+ O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2(\Delta x)) \\ &= (\Delta x)^2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} p(x_{i+1}, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} p(x_i, t^n) \\ &+ \frac{\Delta t \Delta x}{2\rho(x_i, t^n)} p(x_i, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} p(x_{i+1}, t^n) \\ &- \frac{(\Delta t)^2}{4(\rho(x_i, t^n))^2} p(x_i, t^n) \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 + O(\Delta t(\Delta x)^2) \\ &+ O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2(\Delta x)). \end{aligned} \quad (\text{A.85})$$

On peut toujours remplacer les fonctions prises en x_i par des fonctions prises en x_{i+1} dans le d.l. précédent tout en conservant l'ordre 3 :

$$\begin{aligned}
K_3 K_4 &= (\Delta x)^2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \\
&\quad + \frac{\Delta t \Delta x}{2\rho(x_{i+1}, t^n)} p(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{4(\rho(x_{i+1}, t^n))^2} p(x_{i+1}, t^n) \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \right)^2 + O(\Delta t (\Delta x)^2) \\
&\quad + O((\Delta t)^3) + O((\Delta t)^2 (\Delta x)). \tag{A.86}
\end{aligned}$$

On peut maintenant intégrer les d.l. précédents (A.62), (A.66), (A.72), (A.74), (A.75), (A.80), (A.84), (A.86) à celui de G (A.57) afin d'obtenir le développement de G à l'ordre 3 au point (x_{i+1}, t^n) . Dans la suite, on omettra de préciser que la fonction f ainsi que ses dérivées sont prises au point $(\frac{1}{\rho}(x_{i+1}, t^n), e(x_{i+1}, t^n))$. De plus, les fonctions z , d , c_1 , c_2 , z_2 sont toutes définies au point t^n en temps. On obtient :

$$\begin{aligned}
G &= \left[\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_1}{\partial x} (x_{i+1}) - \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d}{\partial x} (x_{i+1}) + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial z}{\partial x} (x_{i+1})}_{\text{simpli1}} \right] \tag{A.87} \\
&\quad - \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} (x_{i+1}) + \Delta x \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2} (x_{i+1}, t^n) \Big] \partial_1 f \\
&\quad + \left[- \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_2}{\partial x} (x_{i+1}) + \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d_2}{\partial x} (x_{i+1}) - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial z_2}{\partial x} (x_{i+1})}_{\text{simpli1}} \right] \\
&\quad + \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 z_2}{\partial x^2} (x_{i+1}) + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} (x_{i+1}, t^n) \Big] \partial_2 f \\
&\quad + \left[- \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \right)^2 + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \right] \partial_{11}^2 f \\
&\quad + \left[- \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \right] \partial_{22}^2 f \\
&\quad + \left[- (\Delta x)^2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{\Delta t \Delta x}{2\rho(x_{i+1}, t^n)} p(x_{i+1}, t^n) \frac{\partial u}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \frac{\partial^1}{\partial x} (x_{i+1}, t^n) \right] \partial_{12}^2 f \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^3) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O(\Delta x (\Delta t)^2). \tag{A.88}
\end{aligned}$$

Il reste encore à développer à l'ordre 3 la quantité H définie par (2.111) pour terminer le d.l du membre de droite de l'équation en $\frac{1}{\rho}$ (A.54). On va effectuer ce développement au point (x_i, t^n) . Afin de l'obtenir, on introduit dans H (2.111) la quantité :

$$- f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right). \tag{A.89}$$

Comme la quantité G (A.4) dont on vient de calculer le d.l. à l'ordre 3 au point (x_{i+1}, t^n) est la même que H , mais décalée d'un pas d'espace (pour passer de G à H les x_{i+1} deviennent des x_i), on obtient immédiatement le d.l. de H au point (x_i, t^n) à partir du d.l. de G (A.87)-(A.88) en remplaçant les x_i par des x_{i-1} :

$$\begin{aligned}
H &= \left[\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_1}{\partial x}(x_i) - \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d}{\partial x}(x_i) + \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial z}{\partial x}(x_i)}_{\text{simpli1}} \right. \\
&\quad - \left. \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(x_i) + \Delta x \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i, t^n) \right] \partial_1 f \\
&\quad + \left[- \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_2}{\partial x}(x_i) + \underbrace{\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d_2}{\partial x}(x_i) - \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial z_2}{\partial x}(x_i)}_{\text{simpli1}} \right. \\
&\quad + \left. \frac{(\Delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 z_2}{\partial x^2}(x_i) + \Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_i, t^n) \right] \partial_2 f \\
&\quad + \left[- \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\rho(x_i, t^n)} \right] \partial_{11}^2 f \\
&\quad + \left[- \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{p(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right] \partial_{22}^2 f \\
&\quad + \left[- (\Delta x)^2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i, t^n) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\Delta t \Delta x}{2} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t \Delta x}{2 \rho(x_i, t^n)} p(x_i, t^n) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial x}(x_i, t^n) \right] \partial_{12}^2 f \\
&\quad + O((\Delta x)^3) + O((\Delta t)^3) + O(\Delta t (\Delta x)^2) + O(\Delta x (\Delta t)^2), \quad (\text{A.90})
\end{aligned}$$

avec cette fois-ci la fonction f et ses dérivées sous entendue au point $(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n))$.

On veut obtenir, c'est un d.l. à l'ordre 2 de

$$- \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{H}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} \right]. \quad (\text{A.91})$$

Grâce à cette différence de termes, une partie des termes de G et de H vont se retrouver dans les restes d'ordre 2.

1. Tous les termes dans les parenthèses *simpli1* sont des $O((\Delta x)^2)$. En effet, tous ces termes font intervenir $\frac{(\Delta t)^2}{\Delta x} \frac{\partial l}{\partial x}$ où l est une des fonctions d, z, d_2, o_2 que l'on a défini précédemment et vont donner un $O((\Delta x)^2)$ grâce au fait que $\frac{\partial l}{\partial x} = 0(\Delta x)$.

Par exemple pour les termes en $\frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d}{\partial x}$, on a la différence :

$$\begin{aligned}
Sim &:= - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2 \rho(x_i, t^n)} \left[\frac{- \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d}{\partial x}(x_{i+1}) \partial_1 f(x_{i+1})}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{- \frac{(\Delta t)^2}{4\Delta x} \frac{\partial d}{\partial x}(x_i) \partial_1 f(x_i)}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} \right] \\
&= \frac{(\Delta t)^3}{4(\Delta x)^3} \underbrace{(d_3(x_{i+1}) - d_3(x_i))}_{= \Delta x \frac{\partial d_3}{\partial x} + O(\Delta x)^2}, \quad (\text{A.92})
\end{aligned}$$

où

$$d_3(x) = \frac{(\partial_1 f(x))d_1(x)}{\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)} \text{ et } d_1(x) = \frac{\partial d}{\partial x}(x), \quad (\text{A.93})$$

et en dérivant la fonction d_3 :

$$\frac{\partial d_3}{\partial x}(x) = \frac{\frac{d}{dx}(\partial_1 f)d_1(x) + (\partial_1 f(x))\frac{\partial d_1}{\partial x}(x)}{\rho(x, t^n) + \rho(x - \Delta x, t^n)} - \frac{(\partial_1 f(x))d_1(x)(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x, t^n) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x - \Delta x, t^n))}{(\rho(x, t^n) + \rho(x - \Delta x, t^n))^2}. \quad (\text{A.94})$$

Comme $d_1(x_i) = O(\Delta x)$ et $\frac{\partial d_1}{\partial x}(x_i) = O(\Delta x)$ d'après la définition de d_1 et des remarques précédentes (A.26), on a $\frac{\partial d_3}{\partial x}(x_i) = O(\Delta x)$, si bien que

$$\begin{aligned} Sim &= O\left(\frac{(\Delta t)^3}{\Delta x}\right) \\ &= O((\Delta x)^2) \text{ par la condition CFL,} \end{aligned} \quad (\text{A.95})$$

et on obtient de la même manière que tous les termes *simpl1* sont des $O((\Delta x)^2)$.

2. Si on considère maintenant les termes d'ordre 2 en $(\Delta x)^2$, en $(\Delta t)^2$ et en $\Delta t \Delta x$. On prend par exemple le premier terme de G et de H en $(\Delta t)^2$:

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[-\frac{(\Delta t)^2}{8} \right. \\ & \left. \underbrace{\left(\frac{1}{\rho(x_i) + \rho(x_{i+1})} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(x_{i+1}) \partial_1 f(x_{i+1}) - \frac{1}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(x_i) \partial_1 f(x_i) \right)}_{=O(\Delta x)} \right] \\ &= \frac{(\Delta t)^3}{8(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} O(\Delta x) \\ &= O\left(\frac{(\Delta t)^3}{\Delta x}\right) \\ &= O((\Delta t)^2) \text{ grace à la condition CFL.} \end{aligned} \quad (\text{A.96})$$

Vu que l'on considère $G - H$ et que H est la même expression que G (décalée d'un indice), tous les autres termes en $(\Delta t)^2$ vont faire aussi apparaître, en faisant leur différence, une dérivée en espace et donc un $O(\Delta x)$. Finalement, tous ces termes donneront un $O((\Delta t)^2)$ comme contribution au membre de droite.

De la même manière, les termes en $(\Delta x)^2$ seront des $O(\Delta t \Delta x)$, et toutes les différences en $\Delta x \Delta t$ de $G - H$ donneront un $O((\Delta t)^2)$.

Ainsi, il ne nous reste plus qu'à considérer les termes suivants pour G :

$$\begin{aligned} & \left[\underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_1}{\partial x}(x_{i+1})}_C + \underbrace{\Delta x \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i+1}, t^n)}_A \right] \partial_1 f(x_{i+1}, t^n) \\ & + \left[\underbrace{-\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_2}{\partial x}(x_{i+1})}_D + \underbrace{\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n)}_B \right] \partial_2 f(x_{i+1}, t^n), \end{aligned} \quad (\text{A.97})$$

et pour H :

$$\begin{aligned} & \left[\underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_1}{\partial x}(x_i)}_{Cbis} + \underbrace{\Delta x \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i, t^n)}_{Abis} \right] \partial_1 f(x_i, t^n) \\ & + \left[\underbrace{-\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial c_2}{\partial x}(x_i)}_{Dbis} + \underbrace{\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n)}_{Bbis} \right] \partial_2 f(x_i, t^n). \end{aligned} \quad (\text{A.98})$$

On va commencer par considérer les termes $A - Abis$:

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{A}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{Abis}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ & = -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{\Delta x \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_{i+1}, t^n) \partial_1 f(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{\Delta x \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_1 f(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ & = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \underbrace{[w(x_{i+1}) - w(x_i)]}_{= \Delta x \frac{\partial w}{\partial x}(x_i) + O((\Delta x)^2)} \\ & = -\frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial w}{\partial x}(x_i) + O(\Delta t \Delta x), \end{aligned} \quad (\text{A.99})$$

où on a posé :

$$w(x) = \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x) \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x))}{\rho(x - \Delta x) + \rho(x)}. \quad (\text{A.100})$$

Or si on dérive w , on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial x}(x) & = \frac{\frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x) \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x))}{\rho(x - \Delta x) + \rho(x)} + \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \partial_{11}^2 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x)) + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_{12}^2 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x)) \right)}{\rho(x - \Delta x) + \rho(x)} \\ & \quad - \frac{\left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x)) \right) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x - \Delta x) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x) \right)}{(\rho(x - \Delta x) + \rho(x))^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.101})$$

d'où

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{A}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{Abis}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ & = -\frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{\frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i) \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)} + \frac{\left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \right)^2 \partial_{11}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \partial_{12}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)} - \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1}) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i) \right)}{(\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i))^2} \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i)) \right] + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (\text{A.102})$$

Pour les termes $B - Bbis$, on a :

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{B}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{Bbis}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ & = -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_{i+1}, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \partial_2 f(x_{i+1}, t^n) - \frac{\Delta x \frac{\partial e}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \partial_2 f(x_i, t^n) \right] \\ & = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \underbrace{[g(x_{i+1}) - g(x_i)]}_{= \Delta x \frac{\partial g}{\partial x}(x_i) + O((\Delta x)^2)} \\ & = -\frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial g}{\partial x}(x_i) + O(\Delta t \Delta x), \end{aligned} \quad (\text{A.103})$$

où $g(x)$ est la fonction définie par :

$$g(x) = \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x) \partial_2 f(x)}{\rho(x - \Delta x, t^n) + \rho(x)}. \quad (\text{A.104})$$

On note toujours ici abusivement $f(x)$ au lieu de $f(\frac{1}{\rho}(x, t^n), e(x, t^n))$.

Si on dérive la fonction g , on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial x}(x) &= \frac{\frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x) \partial_2 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x))}{\rho(x - \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n)} + \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x) \partial_{12}^2 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x))}{\rho(x - \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n)} \\ &+ \frac{\left(\frac{\partial e}{\partial x}(x)\right)^2 \partial_{22}^2 f(\frac{1}{\rho}(x, t^n), e(x))}{\rho(x - \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n)} - \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x - \Delta x, t^n) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x, t^n)\right) \partial_2 f(\frac{1}{\rho}(x), e(x))}{(\rho(x - \Delta x, t^n) + \rho(x, t^n))^2} \end{aligned} \quad (\text{A.105})$$

d'où finalement :

$$\begin{aligned} & - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{B}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} - \frac{Bbis}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right] \\ &= - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \left[\frac{\frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_i) \partial_2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} + \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \partial_{12}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} \right. \\ & \left. + \frac{\left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_i)\right)^2 \partial_{22}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} - \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1}, t^n) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i, t^n)\right) \partial_2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{(\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n))^2} \right] + O(\Delta t \Delta x), \end{aligned} \quad (\text{A.106})$$

et les deux groupes de termes restant à étudier pour $G - H$ ne vont donner que des restes d'ordre 2 grâce au fait que les fonctions c_1 et c_2 ainsi que leurs dérivées sont des $O(\Delta x)$ de part leur définition (A.22), (A.63). Les termes $C - Cbis$ ainsi que $D - Dbis$ vont donner un $O((\Delta t)^2)$.

On peut maintenant écrire le d.l. à l'ordre 2 du membre de droite de notre équation de conservation de la masse (A.54) en récapitulant ce qu'on a obtenu

en (A.55), (A.102), (A.106) :

$$\begin{aligned}
& \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\
& \quad + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\
& = \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + O((\Delta x)^2) - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2}(x_i) \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)}} \\
& - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i))^2 \partial_{11}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)}} - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \partial_{12}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)}} \\
& + \underbrace{\frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i)}{(\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i))^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1}) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i) \right) \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}_{=1} \\
& - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_i) \partial_2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)}} - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x_i) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \partial_{12}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)}} \\
& \quad - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{(\frac{\partial e}{\partial x}(x_i))^2 \partial_{22}^2 f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i))}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)}} \\
& + \underbrace{\frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\frac{\partial e}{\partial x}(x_i)}{(\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n))^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1}, t^n) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i, t^n) \right) \partial_2 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i))}_{=2} \\
& \quad + O(\Delta t \Delta x) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \tag{A.107}
\end{aligned}$$

Pour obtenir l'expression donnée dans la Proposition A.1.2 (A.56), il reste encore à faire apparaître les dérivées de la pression. On va réécrire les termes 1 et 2 de l'expression précédente, de manière à faire apparaître la dérivée de la pression $\frac{\partial p}{\partial x}$ comme dans le membre de gauche de l'équation de conservation de la masse.

On a

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_{i-1}) + \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i) = 2 \frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i) + O(\Delta x), \tag{A.108}$$

et

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(\rho(x_i) + \rho(x_{i-1}))^2} &= \frac{1}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \left(\frac{1}{2\rho(x_i) + O(\Delta x)} \right) \\
&= \frac{1}{2\rho(x_i)} \frac{1}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} (1 + O(\Delta x)). \tag{A.109}
\end{aligned}$$

Comme ces deux termes seront multipliés par Δt , les restes seront bien d'ordre 2.

On obtient que

$$1 = \frac{\Delta t}{(\rho(x_i, t^n))^2} \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i)}{\rho(x_{i-1}) + \rho(x_i)} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i) \right) \partial_1 f(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i)) + O(\Delta t \Delta x) \tag{A.110}$$

De plus,

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}(x_i) = -\rho^2 \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i), \tag{A.111}$$

et finalement,

$$1 = -\Delta t \frac{\left(\frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i)\right)^2}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i)\right) + O(\Delta t \Delta x). \quad (\text{A.112})$$

Pour le terme 2, on obtient de la même manière :

$$2 = -\Delta t \frac{\left(\frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i)\right)\left(\frac{\partial e}{\partial x}(x_i)\right)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i), e(x_i)\right) + O(\Delta t \Delta x), \quad (\text{A.113})$$

et comme

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f \quad (\text{A.114})$$

grâce à (2.88),

$$1 + 2 = -\Delta t \frac{\frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \frac{\partial p}{\partial x}(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} + O(\Delta t \Delta x). \quad (\text{A.115})$$

Enfin, en injectant :

$$\begin{aligned} \Delta t \frac{1}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} &= \Delta t \frac{1}{2\rho(x_i, t^n)} (1 + O(\Delta x)) \\ &= \Delta t \frac{1}{2\rho(x_i, t^n)} + O(\Delta t \Delta x) \end{aligned} \quad (\text{A.116})$$

et (A.115) dans (A.107), on obtient l'expression finale du d.l. à l'ordre 2 du membre de droite suivante dans laquelle on ne précise pas que toutes les fonctions sont prises au point (x_i, t^n) :

$$\begin{aligned} &\frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} - \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 \frac{1}{\rho}}{\partial x^2} \partial_1 f - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \left(\frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}\right)^2 \partial_{11}^2 f}_{\text{terme de pression}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x} \partial_{12}^2 f}_{\text{terme de pression}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} \partial_2 f - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \partial_{12}^2 f}_{\text{terme de pression}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \left(\frac{\partial e}{\partial x}\right)^2 \partial_{22}^2 f}_{\text{terme de pression}} \\ &\quad - \Delta t \frac{\frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x}(x_i) \frac{\partial p}{\partial x}(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \\ &\quad + O(\Delta t \Delta x) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.117})$$

Or dans le calcul pour l'équation en vitesse, on avait calculé la dérivée seconde en espace de la pression (2.190) :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \frac{\partial^2(\frac{1}{\rho})}{\partial x^2} \partial_1 f + (\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x})^2 \partial_{11}^2 f + 2(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x} \frac{\partial e}{\partial x}) \partial_{12}^2 f + \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} \partial_2 f + (\frac{\partial e}{\partial x})^2 \partial_{22}^2 f, \quad (\text{A.118})$$

et on va faire apparaître facilement cette dérivée seconde dans le membre de droite précédant : tous les termes soulignés comme terme de pression sont égaux à

$$- \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (\text{A.119})$$

On obtient ainsi le membre de droite annoncé dans la Proposition A.1.2 :

$$\begin{aligned} & \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\ & + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \\ & = \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2(\rho)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \\ & \quad - \Delta t \frac{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i) \frac{\partial p}{\partial x}(x_i)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \\ & + O(\Delta t \Delta x) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.120})$$

Donc d'après (A.8), (A.120),

$$\begin{aligned} & \frac{\frac{1}{\rho}(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - \frac{1}{\rho}(x_i^n, t^n)}{\Delta t} - \left(\frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \right) \\ & = \underbrace{\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial t}(x_i^n, t^n) + u(x_i, t^n) \frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}}_{=0 \text{ car } \frac{1}{\rho} \text{ solution de (2.85)}} + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta x \Delta t) \\ & = O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2) + O(\Delta x \Delta t) \end{aligned} \quad (\text{A.121})$$

On a ainsi vérifié que : *L'équation pour $\frac{1}{\rho}$ est bien d'ordre 2 en espace et en temps sous condition CFL, i.e. $\Delta t = O(\Delta x)$.*

A.2 Ordre de l'équation de conservation de l'énergie

Afin de terminer l'étude du schéma BBC classique, il reste à considérer la dernière équation, c'est-à-dire celle relative à l'énergie. L'énergie est elle aussi

comme la densité définie au centre de la maille. On rappelle que le centre du maillage lagrangien à la fin du pas de temps n est défini comme suit : (A.2)

$$x_i^{n+1} := \frac{x_{i-1/2}^{n+1} + x_{i+1/2}^{n+1}}{2} = x_i^n + \Delta t \frac{u_{i-1/2}^n + u_{i+1/2}^n}{2} - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p_{i+1}^{n+1/2} - p_i^{n+1/2}}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{p_i^{n+1/2} - p_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}}, \quad (\text{A.122})$$

où les $p_i^{n+1/2}$ sont définis par (2.105). Le schéma en énergie s'écrit d'après (2.106) :

$$\frac{e_i^{n+1} - e_i^n}{\Delta t} = -p_i^{n+1/2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (\text{A.123})$$

où les $u^{n+1/2}$ sont définis par (2.93) et (2.105).

Proposition A.2.1 *Le développement limité du membre de gauche de notre équation en e est :*

$$\begin{aligned} \frac{e(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - e(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial e}{\partial t} - \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x u) \left(\partial_t p + u (\partial_x p) \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.124})$$

En effet, on remarque que le membre de gauche de cette équation est identique à celui de la conservation de la masse en remplaçant $\frac{1}{\rho}$ par e : on obtient le d.l. du membre de gauche de l'équation en énergie en remplaçant $\frac{1}{\rho}$ par e dans le développement limité intermédiaire du membre de gauche de $\frac{1}{\rho}$ (A.45).

Le développement limité du membre de gauche de notre équation en e est :

$$\begin{aligned} \frac{e(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - e(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u(x_i, t^n) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \Delta t \frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{\partial e}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 e}{\partial t^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta t (u(x_i, t^n))^2 \frac{\partial^2 e}{\partial x^2}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + \Delta t u(x_i, t^n) \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t}(x_i^n, t^n) \\ &\quad + O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.125})$$

Seule l'étape de recombinaison des termes faisant intervenir les dérivées secondes de l'énergie diffère du calcul fait pour $\frac{1}{\rho}$.

On veut simplifier l'expression suivante :

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial t^2} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} + \Delta t u \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} \quad (\text{A.126})$$

à l'aide de (2.87) que l'on dérive en temps et en espace :

$$\partial_t^2 e + (\partial_t u)(\partial_x e) + u \partial_{xt}^2 e - \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho)(\partial_x u) + \frac{1}{\rho} (\partial_t p)(\partial_x u) + \frac{p}{\rho} \partial_{xt}^2 u = 0, \quad (\text{A.127})$$

$$\partial_{xt}^2 e + (\partial_x u)(\partial_x e) + u \partial_{xx}^2 e - \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_x \rho)(\partial_x u) + \frac{1}{\rho} (\partial_x p)(\partial_x u) + \frac{p}{\rho} \partial_{xx}^2 u = 0. \quad (\text{A.128})$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial^2 t} =_{\text{par (A.127)}} & -\frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x e) - \frac{\Delta t}{2} u \partial_{xt}^2 e + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho)(\partial_x u) \\ & - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} \partial_{xt}^2 u, \end{aligned} \quad (\text{A.129})$$

donc

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial^2 t} + \Delta t u \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} = \\ & - \frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x e) + \frac{\Delta t}{2} u \partial_{xt}^2 e + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} \partial_{xt}^2 u \\ & =_{\text{par (A.128)}} - \frac{\Delta t}{2} (\partial_t u)(\partial_x e) - \frac{\Delta t}{2} u (\partial_x u)(\partial_x e) - \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 e \\ & \quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{pu}{(\rho)^2} (\partial_x \rho)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2\rho} u (\partial_x p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2\rho} pu \partial_{xx}^2 u \\ & \quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} \partial_{xt}^2 u. \end{aligned} \quad (\text{A.130})$$

Finalement,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial^2 t} + \Delta t u \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 e & = -\frac{\Delta t}{2} \partial_x e (\underbrace{\partial_t u + u \partial_x u}_{= -\frac{1}{\rho} \partial_x p \text{ par (2.86)}}) + \frac{\Delta t}{2} \frac{pu}{(\rho)^2} (\partial_x \rho)(\partial_x u) \\ & \quad - \frac{\Delta t}{2\rho} u (\partial_x p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2\rho} pu \partial_{xx}^2 u \\ & \quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} \partial_{xt}^2 u. \end{aligned} \quad (\text{A.131})$$

Or on avait vu qu'en dérivant l'équation en vitesse par rapport à x , on avait que (2.145) :

$$\partial_{tx}^2 u = -(\partial_x u)^2 - u \partial_{xx}^2 u + \frac{1}{\rho^2} \partial_x \rho \partial_x p - \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 p \quad (\text{A.132})$$

$$= -(\partial_x u)^2 - u \partial_{xx}^2 u - (\partial_x \frac{1}{\rho})(\partial_x p) - \frac{1}{\rho} \partial_{xx}^2 p. \quad (\text{A.133})$$

Donc en utilisant (A.133),

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial^2 t} + \Delta t u \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 e & = -\frac{\Delta t}{2} \partial_x e (\underbrace{\partial_t u + u \partial_x u}_{= -\frac{1}{\rho} \partial_x p \text{ par (2.86)}}) + \frac{\Delta t}{2} \frac{pu}{(\rho)^2} (\partial_x \rho)(\partial_x u) \\ & \quad - \frac{\Delta t}{2\rho} u (\partial_x p)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2\rho} pu \partial_{xx}^2 u \\ & \quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho)(\partial_x u) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p)(\partial_x u) \\ & \quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} (\partial_x u)^2 + \frac{\Delta t}{2} u \frac{p}{\rho} \partial_{xx}^2 u + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho})(\partial_x p). \end{aligned} \quad (\text{A.134})$$

De plus, on a que :

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \frac{pu}{(\rho)^2} (\partial_x \rho) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} (\partial_t \rho) (\partial_x u) = \\ & \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \partial_x u \left(\underbrace{\partial_t \rho + u \partial_x \rho}_{=-\rho \partial_x u \text{ par la conservation de la masse}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.135})$$

Et après simplification, on a finalement

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial t^2} + \Delta t u \frac{\partial^2 e}{\partial x \partial t} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \partial_{xx}^2 e = \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x e) (\partial_x p) - \frac{\Delta t}{2\rho} u (\partial_x p) (\partial_x u) \\ & - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p). \end{aligned} \quad (\text{A.136})$$

On remplace ces termes dans (A.125) et on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{e(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - e(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u(x_i, t^n) \frac{\partial e}{\partial x}(x_i^n, t^n) - \Delta t \underbrace{\frac{\frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n) \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial e}{\partial x}(x_i^n, t^n)}_{=-\frac{\Delta t}{2\rho} \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial x}(x_i, t^n) + O(\Delta t \Delta x)} \\ &+ \frac{\partial e}{\partial t}(x_i^n, t^n) + \frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x e) (\partial_x p) - \frac{\Delta t}{2\rho} u (\partial_x p) (\partial_x u) \\ &- \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\rho} (\partial_t p) (\partial_x u) + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p + \frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p) \\ &+ O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2), \end{aligned} \quad (\text{A.137})$$

qui donne après simplification (et en omettant de préciser que les fonctions sont prises au point (x_i, t^n)) le développement limité de la Proposition A.2.1 (A.124) :

$$\begin{aligned} \frac{e(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - e(x_i^n, t^n)}{\Delta t} &= u \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial e}{\partial t} - \underbrace{\frac{\Delta t}{2\rho} (\partial_x u) (\partial_t p + u (\partial_x p))}_3 \\ &+ \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{(\rho)^2} \partial_{xx}^2 p}_2 + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{p}{\rho} (\partial_x \frac{1}{\rho}) (\partial_x p)}_1 \\ &+ O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.138})$$

On s'occupe du membre de droite $-p_i^{n+1/2} \frac{1}{\Delta m_i} (u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2})$: on y introduit $f(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n))$ afin de pouvoir obtenir des développements limités au point (x_i, t^n) ($p_i^{n+1/2}$ pris aux points du maillage fixe s'écrit H d'après (2.111)).

$$\begin{aligned} \text{MbtreDroiteEner}(x_i, t^n) &:= \left(-H + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \frac{u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta m_i} \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right)}_{=p(x_i, t^n)} \frac{u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta m_i} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.139})$$

où l'on note abusivement la partie en :

$$\frac{u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta m_i} \quad (\text{A.140})$$

à la place de son expression prise aux points (x_i, t^n) et qui correspond exactement au membre de droite de l'équation de conservation de la masse (A.54) :

$$\begin{aligned} \frac{u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n)}{\Delta x \rho(x_i, t^n)} &= -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{G}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i+1}, t^n)} \\ &+ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho(x_i, t^n)} \frac{H}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)}, \end{aligned} \quad (\text{A.141})$$

dont on avait obtenu le développement limité suivant (A.120) :

$$\begin{aligned} A(x_i, t^n) := & \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} - \Delta t \frac{\partial^1}{\partial x} (x_i, t^n) \frac{1}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial p}{\partial x} \\ & - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.142})$$

On regarde dorénavant la partie :

$$-H + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right), \quad (\text{A.143})$$

et l'on veut toujours obtenir un développement à l'ordre 2 en temps et en espace.

Or d'après (2.105) :

$$\begin{aligned} & -H + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) = \\ & - \left[f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n) + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left\{ u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right\}}_{=L_1}} \right) \right. \\ & \left. - \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right)}_{=L_1} \right\}, \\ & \underbrace{e(x_i, t^n) - p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta m_i} \left(u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) \right)}_{=L_2} \\ & \left. + \underbrace{p(x_i, t^n) \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta m_i} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\Delta m_{i+1} + \Delta m_i} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\Delta m_i + \Delta m_{i-1}} \right)}_{=L_2} \right) \\ & \left. - f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.144})$$

ce qui donne par un développement de Taylor :

$$\begin{aligned} & -H + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) = \\ & = - \left[L_1 \partial_1 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) + L_2 \partial_2 f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) \right] + O((L_1)^2) + O((L_2)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.145})$$

On a

$$u(x_{i+1/2}, t^n) - u(x_{i-1/2}, t^n) = \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) + O((\Delta x)^3). \quad (\text{A.146})$$

De plus, si l'on pose :

$$o(x) = \frac{p(x) - p(x - \Delta x)}{\rho(x) + \rho(x - \Delta x)}, \quad (\text{A.147})$$

alors

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\frac{p(x_{i+1}, t^n) - p(x_i, t^n)}{\rho(x_{i+1}) + \rho(x_i)} - \frac{p(x_i, t^n) - p(x_{i-1}, t^n)}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} \right) &= -\frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\underbrace{o(x_{i+1}) - o(x_i)}_{=\Delta x \frac{\partial o}{\partial x}(x_i) + O((\Delta x)^2)} \right) \\ &= -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial o}{\partial x}(x_i) + O(\Delta t \Delta x). \end{aligned} \quad (\text{A.148})$$

En se servant de (A.146) et de (A.148), on obtient finalement que

$$L_1 = \frac{\Delta t}{2\Delta x \rho(x_i, t^n)} \left[\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial o}{\partial x}(x_i) \right] + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.149})$$

De la même manière, on obtient que

$$L_2 = -p(x_i, t^n) \frac{\Delta t}{2\Delta x \rho(x_i, t^n)} \left[\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial o}{\partial x}(x_i) \right] + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \quad (\text{A.150})$$

Or de par la définition de la fonction o (A.147), on a directement en la dérivant que $\frac{\partial o}{\partial x} = O(\Delta x)$ donc $\frac{\Delta t}{2\Delta x} (-\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial o}{\partial x}) = O((\Delta t)^2)$ donc finalement ces termes donneront un reste d'ordre 2 en temps dans L_1 et dans L_2 . On a de plus que $O((L_1)^2) = O((L_2)^2) = O((\Delta t)^2)$ qui donnent bien des restes d'ordre 2 dans le développement de Taylor (A.145).

En retournant à (A.145), on obtient :

$$\begin{aligned} -H + f\left(\frac{1}{\rho}(x_i, t^n), e(x_i, t^n)\right) &= -\frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_1 f \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \frac{p(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_2 f + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.151})$$

Ainsi, on peut insérer dans (A.139) les développements obtenus pour (A.142) et (A.151) et en s'arrêtant à l'ordre 2 en espace et en temps :

$$\begin{aligned} \text{MbreDroiteEner}(x_i, t^n) &= \left(-\frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_1 f + \frac{\Delta t}{2} \frac{p(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \partial_2 f \right) \frac{\partial u}{\rho(x_i, t^n)} \\ &- p(x_i, t^n) \left[\frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} - \Delta t \frac{\frac{\partial^1 p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{1}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right] \\ &+ O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2) \\ &= -\frac{\Delta t}{2(\rho(x_i, t^n))^2} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 \partial_1 f + \frac{\Delta t}{2(\rho(x_i, t^n))^2} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n) \right)^2 p(x_i, t^n) \partial_2 f \\ &- p(x_i, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} + \Delta t \frac{\frac{\partial^1 p}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \frac{1}{\rho(x_i, t^n) + \rho(x_{i-1}, t^n)} p(x_i, t^n) \frac{\partial p}{\partial x} \\ &+ \frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{1}{\rho(x_{i-1}, t^n) + \rho(x_i, t^n)} p(x_i, t^n) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (\text{A.152})$$

On va faire apparaitre la dérivée de la pression en espace et en temps

$$\begin{aligned}\partial_x p &= \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial x} \partial_2 f, \\ \partial_t p &= \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial t} \partial_1 f + \frac{\partial e}{\partial t} \partial_2 f,\end{aligned}\tag{A.153}$$

à l'aide des deux premiers termes en $\partial_1 f$ et en $\partial_2 f$.

Or comme ρ , u et e sont solutions du système (2.85)-(2.87), on a

$$\partial_x u = \rho \partial_t \frac{1}{\rho} + \rho u \partial_x \frac{1}{\rho},\tag{A.154}$$

$$p \partial_x u = -\rho \partial_t e - \rho u \partial_x e,\tag{A.155}$$

on obtient

$$\begin{aligned}-\frac{\Delta t}{2(\rho(x_i, t^n))^2} (\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n))^2 \partial_1 f + \frac{\Delta t}{2(\rho(x_i, t^n))^2} (\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n))^2 p(x_i, t^n) \partial_2 f &= \\ -\frac{\Delta t}{2(\rho(x_i, t^n))^2} \frac{\partial u}{\partial x} \left(\underbrace{\frac{\partial u}{\partial x} \partial_1 f - p \frac{\partial u}{\partial x} \partial_2 f}_{= \rho \partial_t \frac{1}{\rho} \partial_1 f + \rho u \partial_x \frac{1}{\rho} \partial_1 f + \rho \partial_t e \partial_2 f + \rho u \partial_x e \partial_2 f} \right) & \\ = -\frac{\Delta t}{2(\rho(x_i, t^n))^2} \frac{\partial u}{\partial x} (\rho \partial_t p + \rho u \partial_x p) \text{ par (A.153)} & \\ = -\frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x} (\partial_t p + u \partial_x p). &\end{aligned}\tag{A.156}$$

De plus,

$$\frac{1}{\rho(x_i) + \rho(x_{i-1})} = \frac{1}{2\rho(x_i)} + O(\Delta x).\tag{A.157}$$

En remettant (A.156), (A.157) dans (A.152), on obtient finalement que le membre de droite en énergie s'écrit de manière concise sous la forme :

$$\begin{aligned}\text{MbreDroiteEner}(x_i, t^n) &= \underbrace{-\frac{\Delta t}{2\rho(x_i, t^n)} \frac{\partial u}{\partial x} (\partial_t p + u \partial_x p)}_3 - p(x_i, t^n) \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t^n)}{\rho(x_i, t^n)} \\ &+ \underbrace{\Delta t \frac{\partial^{\frac{1}{\rho}}}{\partial x} \frac{1}{2\rho(x_i, t^n)} p(x_i, t^n) \frac{\partial p}{\partial x}}_1 + \underbrace{\frac{\Delta t}{\rho(x_i, t^n)} \frac{1}{2\rho(x_i, t^n)} p(x_i, t^n) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}}_2 \\ &+ O(\Delta t \Delta x) + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2).\end{aligned}\tag{A.158}$$

En soustrayant le membre de gauche (A.138) au membre de droite (A.158), on obtient que les termes numérotés 1, 2 et 3 se simplifient et ainsi :

$$\begin{aligned}\frac{e(x_i^{n+1}, t^{n+1}) - e(x_i^n, t^n)}{\Delta t} - \text{MbreDroiteEner}(x_i, t^n) &= \underbrace{\frac{\partial e}{\partial t} + u \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}}_{=0 \text{ par (2.87)}} \\ &+ O((\Delta x)^2) + O((\Delta t)^2).\end{aligned}\tag{A.159}$$

On voit donc que :

L'équation pour l'énergie du schéma BBC classique est bien d'ordre 2 en espace et en temps sous condition CFL : $\Delta t = O(\Delta x)$.

On conclut ainsi la démonstration du résultat cherché : *le schéma BBC classique est bien d'ordre 2 en espace et en temps sous condition CFL $\Delta t = O(\Delta x)$ pour le système (2.86) dans sa partie lagrangienne en supposant que la loi de pression suit (2.88) : $p = f(\frac{1}{\rho}, e)$.*

Bibliographie

Bibliographie

- [ACC⁺08] A. Ambroso, C. Chalons, F. Coquel, T. Galié, E. Godlewski, P.A. Raviart, and N. Seguin. The drift-flux asymptotic limit of barotropic two-phase two-pressure models. *Commun. Math. Sci.*, 6(2) :521–529, 2008.
- [AF87] J.M. Arnaudies and H. Fraysse. *Cours de mathématiques T.1 ; Algèbre*. Dunod, 1987.
- [AOB89] A.A. Amsden, P.J. O'Rourke, and T.D. Butler. Kiva II, a computer program for chemical reactive flows with spray. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 1989.
- [AS04] A. Astillero and A. Santos. A granular fluid modeled as a driven system of elastic hard spheres. Mallamace, F. (ed.) et al., La fisica dei sistemi complessi. (Nuovi sviluppi e prospettive). Rendiconti della Scuola Internazionale di Fisica "Enrico Fermi", CLV Corso, Varenna, Italia, 1–11 Luglio 2003. Bologna : Società Italiana di Fisica ; Amsterdam : IOS Press. Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi" 155, 475-480 (2004)., 2004.
- [Bar04a] C. Baranger. Modelling of oscillations, breakup and collisions for droplets : the establishment of kernels for the T.A.B. model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(5) :775–794, 2004.
- [Bar04b] C. Baranger. *Modélisation, étude mathématique et simulation des collisions dans les fluides complexes*. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2004.
- [BBC⁺05] M. Baudin, C. Berthon, F. Coquel, R. Masson, and Q.H. Tran. A relaxation method for two-phase flow models with hydrodynamic closure law. *Numer. Math.*, 99(3) :411–440, 2005.
- [BCG00] A. V. Bobylev, J. A. Carrillo, and I. M. Gamba. On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions. *J. Statist. Phys.*, 98(3-4) :743–773, 2000.
- [BDM03] L. Boudin, L. Desvillettes, and R. Motte. A modeling of compressible droplets in a fluid. *Commun. Math. Sci.*, 1(4) :657–669, 2003.
- [Ben84] K.H. Bendiksen. An experimental investigation of the motion of long bubbles in inclined tubes. *International Journal of Multiphase Flow*, 10(4) :467 – 483, 1984.
- [Ben92] D.J. Benson. Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 99(2-3) :235 – 394, 1992.

- [Bes90] D. Bestion. The physical closure laws in the Cathare code. *Nuclear Engineering and Design*, 124(3) :229 – 245, 1990.
- [BGK54] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook. A model for collision processes in gases. 1. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.*, 94(3) :511–525, 1954.
- [BGP04] A. V. Bobylev, I. M. Gamba, and V. Panferov. Moment inequalities and high-energy tails for the boltzmann equations with inelastic interactions. *J. Statist. Phys.*, 116(5-6) :1651–1682, 2004.
- [Bir94] G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Engineering Science Series, 1994.
- [BMMN91] K.H. Bendiksen, D. Maines, R. Moe, and S. Nuland. The dynamic two-fluid model olga : Theory and application. *SPE Production Engineering*, 6(2) :171–180, 1991.
- [BN86] M.R. Baer and J.W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861 – 889, 1986.
- [CGS07] G.L. Caraffini, M. Groppi, and G. Spiga. On BGK approximation for reactive and nonreactive flows. *Transp. Theory Stat. Phys.*, 36(4-6) :475–494, 2007.
- [Cle00] S. Clerc. Numerical simulation of the homogeneous equilibrium model for two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 161(1) :354–375, 2000.
- [CTR⁺84] M.B. Carver, A.E. Tahir, D.S. Rowe, A. Tapucu, and S.Y. Ahmad. Computational analysis of two-phase flow in horizontal bundles. *Nuclear Engineering and Design*, 82(2-3) :215 – 226, 1984.
- [DA76] J.M. Delhay and J.L. Achard. On the averaging operators introduced in two-phase flow modelling. *Proceedings of CSNI Specialist Meeting on Transient Two-Phase Flow Toronto*, 1976.
- [DCL79] D. Drew, L. Cheng, and R.T. Lahey. The analysis of virtual mass effects in two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 5(4) :233 – 242, 1979.
- [DeB74] R. DeBar. Fundamentals of the Kraken code. Technical Report UCID-17366, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1974.
- [Des10] B. Després. *Lois de conservations eulériennes, lagrangiennes et méthodes numériques*, volume 68 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [DL79] D.A. Drew and R.T. Lahey. Application of general constitutive principles to the derivation of multidimensional two-phase flow equations. *International Journal of Multiphase Flow*, 5(4) :243 – 264, 1979.

- [DM10] L. Desvillettes and J. Mathiaud. Some aspects of the asymptotics leading from gas-particles equations towards multiphase flows equations. *J. Statist. Phys.*, 141 :120–141, 2010. 10.1007/s10955-010-0044-3.
- [DP99] D.A. Drew and S.L. Passman. *Theory of multicomponent fluids*, volume 135 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [Duk80] J.K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 35(2) :229 – 253, 1980.
- [Dum04] N. Dumont. *Modélisation de l'écoulement diphasique dans les injecteurs diesel*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- [EPA96] H. Enwald, E. Peirano, and A.E. Almstedt. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, 22 :21 – 66, 1996.
- [FH99] I. Faille and E. Heintzé. A rough finite volume scheme for modeling two-phase flow in a pipeline. *Computers & Fluids*, 28(2) :213 – 241, 1999.
- [FJ92] F. França and R.T. Lahey Jr. The use of drift-flux techniques for the analysis of horizontal two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 18(6) :787 – 801, 1992.
- [FK02] K.K. Fjelde and K.H. Karlsen. High-resolution hybrid primitive-conservative upwind schemes for the drift flux model. *Computers & Fluids*, 31(3) :335 – 367, 2002.
- [Gal09] T. Galié. *Couplage interfacial de modèles en dynamique des fluides. Application aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2009.
- [GD07] H. Guillard and F. Duval. A Darcy law for the drift velocity in a two-phase flow model. *Journal of Computational Physics*, 224(1) :288 – 313, 2007. Special Issue Dedicated to Professor Piet Wesseling on the occasion of his retirement from Delft University of Technology.
- [GDLP07] H. Guillard, F. Duval, J.C. Latche, and R. Panescu. Numerical multiphase modeling of bubbly flows. *Ann. Univ. Ferrara Sez. VII Sci. Mat.*, 53(2) :243–253, 2007.
- [GK02] M. Groppi and W. Koller. Kinetic calculations for chemical reactions and inelastic transitions in a gas mixture. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)*, 5 :855–876, 2002.
- [GM05] O. Grégoire and M. Martin. Derivation of a well-posed and multidimensional drift-flux model for boiling flows. *Comptes Rendus Mécanique*, 333(6) :459 – 466, 2005.
- [GP06] J.M. Ghidaglia and O. Poujade. Modélisation d'écoulements fluide-particules par des modèles Euler-Euler conservatifs. Technical report, Eurobios, 2006.

- [GPV04] I. M. Gamba, V. Panferov, and C. Villani. On the Boltzmann equation for diffusively excited granular media. *Comm. Math. Phys.*, 246(3) :503–541, 2004.
- [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.
- [GS99] M. Groppi and G. Spiga. Kinetic approach to chemical reactions and inelastic transitions in a rarefied gas. *Journal of Mathematical Chemistry*, 26 :197–219, 1999. 10.1023/A :1019194113816.
- [Har89] A. Harten. Eno schemes with subcell resolution. *J. Comput. Phys.*, 83(1) :148–184, 1989.
- [HI02] T. Hibiki and M. Ishii. Distribution parameter and drift velocity of drift-flux model in bubbly flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(4) :707 – 721, 2002.
- [HI03] T. Hibiki and M. Ishii. One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(25) :4935 – 4948, 2003.
- [HJJ09] O. Heuzé, S. Jaouen, and H. Jourden. Dissipative issue of high-order shock capturing schemes with non-convex equations of state. *Journal of Computational Physics*, 228(3) :833 – 860, 2009.
- [HPDSL97] V. Henriot, C. Pauchon, P. Duchet-Suchaux, and C.F. Leibovici. Tactite : Contribution of fluid composition tracking on transient multiphase flow simulation. In *Offshore Technology Conference, 5 May-8 May 1997, Houston, Texas*, 1997.
- [IM84] M. Ishii and K. Mishima. Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and Design*, 82(2-3) :107 – 126, 1984.
- [Ish75] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles, Paris, 1975.
- [Ish77] M. Ishii. One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. Technical Report ANL-77-47, Argonne National Lab Report, 1977.
- [IZ79] M. Ishii and N. Zuber. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, 25 , Issue 5 :843 – 855, 1979.
- [KL89] H.O. Kreiss and J. Lorenz. *Initial-boundary value problems and the Navier-Stokes equations*. Academic Press, New York, 1989.
- [Lag00] F. Lagoutière. *Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides à plusieurs constituants*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris-VI, 2000.

- [Lah92] R.T. Lahey. The prediction of phase distribution and separation phenomena using two-fluid models. *Boiling Heat Transfer*, pages 85–121, 1992.
- [Lav04] G. Lavergne. *Modélisation de l'écoulement multiphasique dans le propulseur à poudre P230 d'Ariane V*. PhD thesis, ONERA/SUPAERO, 2004.
- [Lee79] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. 5. a second-order sequel to godunov's method. *Journal of Computational Physics*, 32(1) :101 – 136, 1979.
- [LeV02] R.J. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [LHH66] Jr. Lowell H. Holway. New statistical models for kinetic theory : Methods of construction. *Physics of Fluids*, 9(9) :1658–1673, 1966.
- [LO08] P. W. Longest and M.J. Oldham. Numerical and experimental deposition of fine respiratory aerosols : development of a two-phase drift flux model with near-wall velocity corrections. *Journal of Aerosol Science*, 39(1) :48 – 70, 2008.
- [Lou02] R. Loubère. *Une méthode Lagrangienne particulière de type Galerkin discontinu. Applications à la mécanique des fluides et à l'interaction. Laser/Plasma*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2002.
- [LPS98] B. Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis. *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*, volume 29 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [MA00] J.M. Montanero and A.Santos. Computer simulation of uniformly heated granular fluids. *Granular Matter*, 2 :53–64, 2000. 10.1007/s100350050035.
- [MABO07] P.H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, and J. Ovardia. A Cell-Centered Lagrangian Scheme for Two-Dimensional Compressible Flow Problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Volume 29 :1781–1824, 2007.
- [Mat06] J. Mathiaud. *Etude de systèmes de type gaz-particules*. PhD thesis, ENS Cachan, 2006.
- [Mat07] J. Mathiaud. Ordres de grandeur pour le passage d'un modèle gaz-particules vers un modèle hem. Technical report, CEA DAM DIF, 2007.
- [MTEP98] J.M. Masella, Q.H. Tran, D. Ferre, and C. Pauchon. Transient simulation of two-phase flows in pipes. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(5) :739 – 755, 1998.
- [O'R81] P. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Princeton University, 1981.

- [Pan06] R. Panescu. *Modélisation Eulerienne d'écoulements diphasiques à phase dispersée et simulation numérique par une méthode volumes - éléments finis*. PhD thesis, Université de Nice Sophia Antipolis, 2006.
- [PB09] G.S. Patience and R.E. Bockrath. Drift flux modelling of entrained gas-solids suspensions. *Powder Technology*, 190(3) :415 – 425, 2009.
- [PCCT06] A.R. Piriz, O.D. Cortazar, J.J. Lopez Cela, and N.A. Tahir. The rayleigh-taylor instability. *American Journal of Physics*, 74(12) :1095–1098, 2006.
- [Ram00] D. Ramos. *Quelques résultats mathématiques et simulations numériques d'écoulements régis par des modèles bifluïdes*. PhD thesis, Ens Cachan, 2000.
- [Ray87] P. Raymond. Flica 4 : A computer code for multidimensional thermal analysis of nuclear reactor core, numerical methods for three-dimensional two-phase flow. Technical Report CEA-CONF-9030, Report CEA, 1987.
- [RH84] V.H Ransom and D.L Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124 – 151, 1984.
- [Roe86] P.L. Roe. Characteristic-based schemes for the Euler equations. In *Annual review of fluid mechanics, Vol. 18*, pages 337–365. Annual Reviews, Palo Alto, CA, 1986.
- [RT04] E. Romenski and E F. Toro. Compressible two-phase flows : Two-pressure models and numerical methods. Technical report, Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences, Cambridge University, UK, Laboratory of Applied Mathematics, Faculty of Engineering, 38050, University of Trento, Italy, 2004.
- [SA99] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase Godunov method for compressible multfluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425 – 467, 1999.
- [San03] A. Santos. Transport coefficients of d-dimensional inelastic maxwell models. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 321(3-4) :442 – 466, 2003.
- [SEL04] A. Sokolichin, G. Eigenberger, and A. Lapin. Simulation of buoyancy driven bubbly flow : Established simplifications and open questions. *AIChE Journal*, 50 :24–45, 2004.
- [SFW⁺05] H. Staedtke, G. Franchello, B. Worth, U. Graf, P. Romstedt, A. Kumbaro, J. García-Cascales, H. Paillère, H. Deconinck, M. Ricchiuto, B. Smith, F. De Cachard, E.F. Toro, E. Romenski, and S. Mimouni. Advanced three-dimensional two-phase flow simulation tools for application to reactor safety (astar). *Nuclear Engineering and Design*, 235(2-4) :379 – 400, 2005.

- [SHI10] J. Schlegel, T. Hibiki, and M. Ishii. Development of a comprehensive set of drift-flux constitutive models for pipes of various hydraulic diameters. *Progress in Nuclear Energy*, 52(7) :666 – 677, 2010.
- [SI01] J.H. Song and M. Ishii. On the stability of a one-dimensional two-fluid model. *Nuclear Engineering and Design*, 204(1-3) :101 – 115, 2001.
- [SM95] C.M. Sheppard and S.D. Morris. Drift-flux correlation disengagement models : Part 1 – theory : Analytic and numeric integration details. *Journal of Hazardous Materials*, 44(2-3) :111 – 125, 1995. Consequence Modeling for Plant Safety and Environmental Impact.
- [SW84] H.B. Stewart and B. Wendroff. Two-phase flow : Models and methods. *J. Comput. Phys.*, 56 :3 :363–409, 1984.
- [Tou96] I. Toumi. An upwind numerical method for a six equation two-phase flow model. Technical report, DMT/94/168, SERMA/LETR/94/1619, 1996.
- [Vil02] C. Villani. *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory*. Elsevier Science, 2002.
- [Vil06] C. Villani. Mathematics of granular materials. *J. Stat. Phys.*, 124(2-4) :781–822, 2006.
- [VR50] J. VonNeumann and R.D. Richtmyer. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys.*, 21 :232–237, 1950.
- [Wal69] G. Wallis. *One Dimensional Two-Phase Flow*. McGraw-Hill, 1969.
- [WC84] P. Woodward and P. Colella. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of Computational Physics*, 54(1) :115 – 173, 1984.
- [Wil63] M.L. Wilkins. Calculation of elastic plastic flow. Technical report, California. Univ., Livermore. Lawrence Radiation Lab., Apr 1963.
- [Wil80] M.L. Wilkins. Use of artificial viscosity in multidimensional fluid dynamic calculations,. *Journal of Computational Physics*, 36(3) :281 – 303, 1980.
- [Wil85] F. A. Williams. *Combustion Theory. The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. Benjamin-Cummings Publishing Company, 1985.
- [You84] D.L. Youngs. Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 12(1-3) :32 – 44, 1984.
- [You89] D.L. Youngs. Modelling turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 37(1-3) :270 – 287, 1989.
- [ZF65] N. Zuber and J.A. Findlay. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. *J. Heat Transfer*, 87 :453–468, 1965.

- [Zub67] N. Zuber. Flow excursions and oscillations in boiling, two-phase systems with heat addition. *Proc, EURaTOMSymp. Two-Phase Flow Dynamics*, 1 :1070–1089, 1967.

RÉSUMÉ

Cette thèse décrit la modélisation et la simulation de systèmes à deux phases composées de particules évoluant dans un gaz. Les deux phases interagissent entre elles et le type de modèle à considérer dépend directement du type de simulations envisagées.

Dans une première partie, les deux phases sont considérées comme des fluides, elles sont décrites à l'aide d'un modèle de mélange avec une relation de dérive (permettant de suivre une vitesse relative entre les deux phases et de prendre en compte deux vitesses) et sont supposées à l'équilibre en température et pression. Cette partie du manuscrit est composée de la dérivation des équations, de l'écriture d'un schéma numérique associé à ce jeu d'équations, d'une étude d'ordre de ce schéma ainsi que de simulations. Une étude mathématique de ce modèle (hyperbolicité dans un cadre simplifié, stabilité du système linéaire autour d'un état constant) a été réalisée dans un cadre où le gaz est supposé barotrope.

La seconde partie de ce manuscrit est consacrée à la modélisation de l'effet de collisions inélastiques sur les gouttelettes lorsque l'on se place à un temps de simulation beaucoup plus court, pour lequel les gouttelettes ne peuvent plus être vues comme un fluide. Pour modéliser ces collisions, on construit un modèle simplifié (moins coûteux en temps) de type BGK permettant de reproduire le comportement en temps de certains moments sur les gouttelettes. Ces moments sont choisis pour être représentatifs de l'effet des collisions sur ces gouttelettes, à savoir une thermalisation en vitesse et énergie. Ce modèle est discrétisé avec une méthode particulière et des résultats numériques sont donnés en comparaison avec ceux obtenus avec un modèle résolvant directement l'équation de Boltzmann homogène. MOTS CLÉS : SYSTÈMES À DEUX PHASES - MODÈLE DE MÉLANGE - RELATION DE DRIFT - COLLISIONS INÉLASTIQUES - TERME BGK - MODÈLE SIMPLIFIÉ - ÉTUDE D'ORDRE DE SCHÉMA - HYPERBOLICITÉ

ABSTRACT

This thesis describes the modelisation and the simulation of two-phase systems composed of droplets moving in a gas. The two phases interact with each other and the type of model to consider directly depends on the type of simulations targeted.

In the first part, the two phases are considered as fluid and are described using a mixture model with a drift relation (to be able to follow the relative velocity between the two phases and take into account two velocities), the two-phase flows are assumed at the equilibrium in temperature and pressure. This part of the manuscript consists of the derivation of the equations, writing a numerical scheme associated with this set of equations, a study of this scheme and simulations. A mathematical study of this model (hyperbolicity in a simplified framework, linear stability analysis of the system around a steady state) was conducted in a frame where the gas is assumed barotropic.

The second part is devoted to the modelisation of the effect of inelastic collisions on the particles when the time of the simulation is shorter and the droplets can no longer be seen as a fluid. We introduce a model of inelastic collisions for droplets in a spray, leading to a specific Boltzmann kernel. Then, we build caricatures of this kernel of BGK type, in which the behavior of the first moments of the solution of the Boltzmann equation (that is mass, momentum, directional temperatures, variance of the internal energy) are mimicked. The quality of these caricatures is tested numerically at the end. KEY WORDS : BIFLUID SYSTEM - MIXTURE MODEL - DRIFT RELATION - INELASTIC COLLISIONS - BGK TERM - SIMPLIFIED MODEL - ORDER OF SCHEME STUDY - HYPERBOLICITY