



HAL
open science

Simulation numérique de l'ablation liquide

Lucas Tallois

► **To cite this version:**

Lucas Tallois. Simulation numérique de l'ablation liquide. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. INSA de Toulouse, 2023. Français. NNT : 2023ISAT0046 . tel-04524043

HAL Id: tel-04524043

<https://theses.hal.science/tel-04524043>

Submitted on 27 Mar 2024

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.



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse (INSA de Toulouse)*

Présentée et soutenue le 20/12/2023 par :

Lucas TALLOIS

Simulation numérique de l'ablation liquide

JURY

PHILIPPE HELLUY	Professeur des Universités	Rapporteur
SAMUEL KOKH	Directeur de Recherche CEA	Rapporteur
RAPHAËL LOUBÈRE	Directeur de Recherche CNRS	Examinateur
HÉLÈNE MATHIS	Professeure des Universités	Examinatrice
SIMON PELUCHON	Ingénieur de Recherche	Co-directeur
GUILLAUME PUIGT	Directeur de Recherche ONERA	Examinateur
PHILIPPE VILLEDIEU	Directeur de Recherche ONERA	Directeur

École doctorale et spécialité :

EDAA : École Doctorale Aéronautique et Astronautique

Unité de Recherche :

CEA/CESTA/DSGA

Directeurs de Thèse :

Philippe VILLEDIEU et Simon PELUCHON

Rapporteurs :

Philippe HELLUY et Samuel KOKH

Résumé

Simulation numérique de l'ablation liquide

Lors de sa rentrée dans l'atmosphère d'une planète, un engin spatial tel qu'une sonde, par exemple, subit un échauffement important dû au frottement des gaz atmosphériques. Afin de garantir l'intégrité de la structure, l'avant de la capsule qui subit le freinage est recouvert d'un bouclier thermique. La surface de ce bouclier thermique subit une dégradation physico-chimique globalement appelée ablation. La fusion de la partie métallique ainsi que la sublimation de la structure en carbone donnent lieu à un écoulement diphasique complexe.

L'écoulement diphasique est résolu par une méthode d'interface diffuse basée sur le modèle à cinq équations en considérant les effets liés à la dissipation visqueuse, la conduction thermique ainsi que la tension de surface. La résolution numérique de la partie fluide est basée sur une décomposition d'opérateurs entre la partie dite « acoustique » regroupant les phénomènes physiques potentiellement présents dans l'écoulement fluide et une partie liée au transport des quantités conservatives. Les grands rapports de densité entre les deux fluides ainsi que les phénomènes physiques pris en compte induisant une contrainte de pas de temps très restrictive, l'étape « acoustique » est résolue avec un schéma temporel implicite par un solveur de Riemann approché tandis que l'étape de « transport » est résolue par un schéma explicite. La diffusion thermique dans le domaine solide est résolue avec un schéma implicite. Les effets liés à la tension de surface sont étudiés sous deux formulations : une forme conservative discrétisée naturellement et une forme non-conservative directement prise en compte dans le solveur de Riemann. Une méthode MUSCL permet d'étendre les schémas numériques à l'ordre deux, et un limiteur compressif est utilisé afin de limiter la diffusion numérique de l'interface liquide/gaz.

Les conditions de couplage à l'interface fluide-solide sont déterminées grâce aux bilans de masse et d'énergie. Une formulation ALE des équations permet de suivre le front de fusion avec précision en déformant les maillages. L'extension des méthodes numériques dans les coordonnées cylindriques permet d'étudier des configurations axisymétriques.

Mots-clés Simulation numérique, écoulements compressibles, problèmes multi-physiques.

Laboratoire d'accueil CEA-CESTA, 15 avenue de Sablières, CS 60001-33116, Le Barp cedex.

Abstract

Numerical simulation of liquid ablation

During re-entry into a planet's atmosphere, a spacecraft such as a probe, for example, undergoes significant heating due to friction with atmospheric gases. To ensure structural integrity, the front of the capsule undergoing braking is covered by a heat shield. The surface of this heat shield undergoes physico-chemical degradation known as ablation. Melting of the metal part and sublimation of the carbon structure give rise to a complex two-phase flow.

The two-phase flow is solved using a diffuse interface method based on the five-equation model, taking into account the viscous dissipation, thermal conduction and surface tension effects. The numerical resolution of the fluid part is based on operator splitting between the so-called "acoustic" part, grouping together the physical phenomena potentially present in the fluid flow, and a part linked to the transport of conservative quantities. As the high density ratios between the two fluids and the physical phenomena taken into account induce a very restrictive time step constraint, the "acoustic" step is solved with an implicit time scheme by an approximate Riemann solver, while the "transport" step is solved with an explicit scheme. Thermal diffusion in the solid domain is solved with an implicit scheme. Surface tension effects are studied under two formulations : a naturally discretized conservative form and a non-conservative form directly taken into account in the Riemann solver. A MUSCL method is used to extend the numerical schemes to second order, and a compressive limiter is used to limit the numerical diffusion of the liquid/gas interface.

Coupling conditions at the fluid-solid interface are determined using mass and energy balances. An ALE formulation of the equations enables the melting front to be followed precisely by mesh deformation. The extension of numerical methods to cylindrical coordinates enables us to study axisymmetric configurations.

Keywords Numerical simulation, compressible flows, multiphysics problems.

Remerciements

Trois années pour terminer cette quête acharnée qu'est la thèse et voici l'heure des remerciements.

Je tiens tout d'abord à remercier chaleureusement mes deux encadrants sans qui rien n'aurait été possible, mon directeur Philippe Villedieu qui malgré la distance a su se rendre disponible et qui m'a toujours été d'une aide précieuse, ainsi que Simon Peluchon, mon encadrant de tous les jours, qui m'a laissé une grande liberté de travail et avec qui j'ai tant appris. Travailler avec vous fut un réel plaisir et je vous serai toujours infiniment reconnaissant de m'avoir permis de réaliser ces travaux.

Je tiens ensuite à remercier grandement Philippe Helluy et Samuel Kokh, qui ont accepté de rapporter cette thèse, ainsi que les autres membres du jury Raphaël Loubère, Hélène Mathis et Guillaume Puigt. Vos remarques positives et vos compliments élogieux m'ont sincèrement touchés. Je remercie également Gérard Gallice pour les échanges au sujet des schémas non-conservatifs. Ton aide a été décisive.

Comment ne pas remercier le CEA Cesta, et plus particulièrement mon laboratoire d'accueil, pour le cadre de travail exceptionnel et la bonne ambiance. Un grand merci à mes chefs de laboratoire, de service, et de département qui se sont succédé ces trois années pour la confiance qu'ils m'ont accordée. De plus, un grand merci à l'ensemble des personnes du service avec qui j'ai pu échanger, des permanents aux stagiaires, en passant par les postdocs et les thésards.

Une pensée particulière à tous ceux qui ont côtoyé la salle bleue, la salle des précaires ou la Moria. Merci Léo pour l'axisymétrique, merci et bravo à Flo et Bruno pour vos superbes thèses, et merci à Flo et Gab pour votre présence et votre bonne humeur. Beaucoup trop de bons souvenirs me reviennent pour n'en retenir qu'un seul avec vous (et beaucoup ne peuvent pas être écrits ici). Je garde le lundi matin à 5 comme une référence.

Je dois aussi remercier mes copains d'enfance, qui m'ont tant apporté depuis des années. Comment ai-je pu vous oublier le jour de la soutenance ? Je sais que vous saurez me le rappeler pendant encore des années... Une mention très spéciale à Jeanne et Emile, qui m'ont hébergé lors de mes derniers jours à Bordeaux, et qui m'ont fait l'honneur d'assister à ma soutenance. Je sais maintenant que les schémas de Type-Godunov n'ont plus de secrets pour vous. Merci de tout cœur à Alex, Elisa, Edouard, Félix, Quentin, Claire, Audrey, Paul, Jonah, Benoit, Dorine, Floz et à tous ceux que j'ai probablement encore oublié... La double casquette est là.

Un remerciement également à mes copains d'école, les capseurs Adrien, Lucien, Nathan, P-E, Jordan et Pierre. J'ai manqué à ma parole du tour de France, mais je me rattraperai bien assez vite. Gare aux 3 2 1.

Enfin, merci à ma famille et surtout à mes parents, pour tout ce qu'ils m'ont donné depuis toujours. J'ai essayé de vous le rendre de la meilleure des manières. Merci pour le soutien inconditionnel. Et un ultime merci à la meilleure des colocos, ma petite sœur chérie.

Table des matières

Introduction	15
1 Introduction générale	17
1.1 Contexte physique	17
1.2 Présentation des différents types d'interactions	19
1.2.1 Effets de pyrolyse et couplage thermique entre les matériaux du composite résine-fibres	19
1.2.2 Réactions d'ablation à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux	19
1.2.3 Fusion de la matrice	21
1.2.4 Interactions entre la phase liquide (issue de la fusion de la résine) et l'écoulement gazeux	21
1.3 Calcul d'ordres de grandeur	22
1.4 Objectifs de la thèse	24
1.5 Descriptif des travaux	24
1.6 Communications et publications	26
I Modélisation du problème de l'ablation liquide	29
2 Modélisation de l'écoulement diphasique	31
2.1 Modèle à cinq équations réduit	33
2.2 Prise en compte des effets diffusifs	35
2.3 Prise en compte de effets de tension de surface	36
2.3.1 Formulation non-conservative	37
2.3.2 Formulation conservative	38
2.4 Fermeture du modèle diphasique et lois d'état	39
2.4.1 Rappels de thermodynamique	39
2.4.2 Lois d'états	41
2.4.3 Fermeture du modèle diphasique	45
2.5 Généralités sur les systèmes hyperboliques	46
2.6 Propriétés mathématiques	48
2.6.1 Vitesse du son	48
2.6.2 Hyperbolicité	50
2.6.3 Entropies mathématiques associées	53
2.6.4 Structure du problème de Riemann	54

2.6.4.1	Invariants de Riemann	55
2.6.4.2	Problème de Riemann	55
2.6.5	Domaine de convexité	56
2.7	Conclusion	57
3	Modélisation du problème de thermique	59
3.1	Rappel des équations	60
3.2	Condition de fusion	61
3.2.1	Bilan de masse	61
3.2.2	Bilan d'énergie	62
3.3	Algorithme de couplage	62
3.3.1	Analyse dimensionnelle	63
3.3.2	Algorithme de couplage fluide/solide	65
3.4	Conclusion	66
II	Résolution numérique du problème de l'ablation liquide	67
4	Résolution numérique du problème de thermique dans le solide et couplage	69
4.1	Prise en compte du déplacement de maillage	69
4.2	Résolution de la thermique	71
4.2.1	Transformation des coordonnées	72
4.2.2	Application à l'équation de diffusion	73
4.2.3	Discrétisation temporelle	75
4.3	Conclusion	77
5	Résolution numérique du système diphasique : approche générale	79
5.1	Décomposition Lagrange-Transport appliquée au modèle à cinq équations réduit	81
5.2	Discrétisation spatiale	82
5.2.1	Partie hyperbolique	83
5.2.2	Dissipation visqueuse et conduction thermique	84
5.2.3	Tension de surface	84
5.3	Résolution temporelle de l'étape Lagrange	85
5.3.1	Version explicite	86
5.3.2	Version implicite	86
5.4	Étape de Transport	88
5.5	Schéma global	90
5.6	Conclusion	91
6	Résolution numérique du système diphasique : approche non-conservative	93
6.1	Schéma de type Godunov non-conservatif	95
6.1.1	Schéma de type Godunov unidimensionnel	95
6.1.1.1	Stabilité	99
6.1.1.2	Conservation	100
6.1.1.3	Entropie	101
6.1.1.4	Solution équilibre	102
6.1.2	Schéma de type Godunov multidimensionnel	103

6.1.2.1	Stabilité	108
6.1.2.2	Conservation	109
6.1.2.3	Entropie	110
6.1.2.4	Solution équilibre	111
6.1.3	Solveur de Riemann simple	112
6.1.3.1	Cadre unidimensionnel	112
6.1.3.2	Cadre multidimensionnel	114
6.1.4	Application aux systèmes généraux de la mécanique des fluides	116
6.2	Application au système à cinq équations avec tension de surface	117
6.2.1	Rappel des équations	117
6.2.2	Solveur de Riemann simple lagrangien : cas unidimensionnel	118
6.2.2.1	Construction du solveur de Riemann lagrangien	118
6.2.2.2	Schéma global	120
6.2.2.3	Solutions équilibre	121
6.2.2.4	Conditions de positivité	121
6.2.3	Solveur de Riemann simple lagrangien : cas multidimensionnel	123
6.2.3.1	Construction du solveur de Riemann lagrangien	124
6.2.3.2	Conservation	125
6.2.3.3	Schéma global	126
6.2.3.4	Solutions équilibre	127
6.2.3.5	Conditions de positivité	128
6.2.4	Stabilité	128
6.3	Régime bas-Mach	129
6.3.1	Analyse asymptotique du modèle diphasique en régime bas-Mach	129
6.3.2	Correction bas-Mach : schéma unidimensionnel	132
6.3.3	Correction bas-Mach : schéma multidimensionnel	133
6.4	Conclusion	135
7	Extension à l'ordre deux	137
7.1	Schéma MUSCL : cadre unidimensionnel	138
7.1.1	Reconstruction de la solution	139
7.1.2	Limitation des reconstructions	140
7.2	Schéma MUSCL : cadre multidimensionnel	143
7.2.1	Reconstruction de la solution	143
7.2.2	Limitation des reconstructions	146
7.2.2.1	Conception d'un limiteur performant	149
7.2.2.2	Limiteur préservant la linéarité	152
7.2.2.3	Limiteur préservant la monotonie	153
7.2.2.4	Limiteur compressif	153
7.2.2.5	Limiteur différentiable	154
7.3	Schéma en temps	155
7.3.1	Schéma explicite pour la décomposition Lagrange-Transport	155
7.3.2	Schéma implicite pour l'étape Lagrange	156
7.4	Schéma de type Godunov non-conservatif : extension au second ordre	158
7.4.1	Extension au second ordre : cadre unidimensionnel	158
7.4.2	Extension au second ordre : cadre multidimensionnel	160

7.5	Conclusion	161
III	Résultats numériques	163
8	Validation numérique	165
8.1	Schémas numériques et conditions aux limites	166
8.1.1	Schéma temporel	166
8.1.2	Reconstruction et limitation	166
8.1.3	Tension de surface	168
8.1.4	Conditions aux limites	168
8.1.4.1	Conditions aux limites générales	168
8.1.4.2	Condition limite de mouillage	169
8.1.5	Raffinement du maillage avec une loi β	173
8.2	Transport pur	174
8.2.1	Disque de Zalesak	174
8.2.2	Advection de Kothe-Rider	175
8.3	Modèle à cinq équations réduit	176
8.3.1	Tube à choc diphasique unidimensionnel	176
8.3.2	Interaction choc/bulle	176
8.3.3	Interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau	179
8.4	Modèle à cinq équations réduit avec dissipation visqueuse	184
8.4.1	Plaque plane laminaire	184
8.4.2	Cavité entraînée	184
8.5	Modèle à cinq équations réduit avec tension de surface	186
8.5.1	Goutte d'eau à l'équilibre	187
8.5.2	Oscillation d'une goutte ellipsoïdale	190
8.5.3	Atténuation visqueuse d'une onde capillaire	193
8.6	Conclusion	195
9	Application à la fusion de l'aluminium	197
9.1	Fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide	197
9.2	Fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air	199
9.3	Fusion d'une bille d'aluminium dans un écoulement supersonique	203
9.3.1	Validation de la partie hyperbolique	203
9.3.2	Validation de la dissipation visqueuse et la conduction thermique	205
9.3.3	Fusion d'une bille d'aluminium	206
9.4	Conclusion	208
	Conclusion	211
	10 Conclusion générale et perspectives	213

Annexes	217
A Méthodes des moindres carrés	219
A.1 Méthodes des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret	219
A.1.1 Modèle linéaire	219
A.1.2 Modèle quadratique	219
A.2 Méthodes des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret au nœud	220
A.3 Résolution du problème des moindres carrés	221
B Décomposition Lagrange-Transport : version axisymétrique	223
B.1 Le système à cinq équations	223
B.1.1 Formulation continue	223
B.1.2 Formulation discrète	225
B.1.3 Validation numérique	226
B.2 Le système à cinq équations avec termes dissipatifs	227
B.2.1 Formulation continue	227
B.3 Prise en compte du mouvement de maillage	229
C Conditions de positivité	231
C.1 Conditions de positivité des états intermédiaires gauches	231
C.2 Conditions de positivité des états intermédiaires droits	232
Bibliographie	235

Introduction

Chapitre 1

Introduction générale

Sommaire

1.1	Contexte physique	17
1.2	Présentation des différents types d'interactions	19
1.2.1	Effets de pyrolyse et couplage thermique entre les matériaux du composite résine-fibres	19
1.2.2	Réactions d'ablation à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux	19
1.2.3	Fusion de la matrice	21
1.2.4	Interactions entre la phase liquide (issue de la fusion de la résine) et l'écoulement gazeux	21
1.3	Calcul d'ordres de grandeur	22
1.4	Objectifs de la thèse	24
1.5	Descriptif des travaux	24
1.6	Communications et publications	26

1.1 Contexte physique

L'exploration spatiale est un rêve qui, depuis la fin de la seconde guerre mondiale, devient de plus en plus réalisable. Après la conquête de l'espace, puis de la Lune, c'est aujourd'hui Mars qui s'apprête à devenir, dans le futur, la prochaine destination de l'Homme. Les progrès des lanceurs permettant de quitter l'orbite terrestre sont certes toujours plus impressionnants, mais un problème majeur fait toujours l'objet de recherche approfondie, il s'agit de l'atterrissage, ou plutôt de l'étape de rentrée atmosphérique.

Lors de sa rentrée dans l'atmosphère d'une planète, tout objet subit un freinage important dû au frottement de sa paroi avec les gaz atmosphériques. Sa vitesse lors de la phase de rentrée est d'autant plus importante que la gravité est élevée, de 7 à 12 kilomètres par seconde pour un véhicule spatial. Ces frottements, ainsi que l'augmentation de la température de l'air autour du véhicule par compression, entraînent un échauffement important de l'objet, qui subit une dégradation physico-chimique globalement appelée ablation. Certains vont complètement se désintégrer, c'est le cas des météores que l'on observe en étoiles filantes, mais aussi des micros débris spatiaux, ou des satellites et sondes qui sont volontairement détruits après leur utilisation.

1.1. Contexte physique

Dans le cas d'une capsule spatiale, laquelle peut être habitée par un astronaute, la tenue mécanique de l'objet, ainsi que la température à l'intérieur du module doivent être assurées. C'est pourquoi elles sont recouvertes d'un bouclier thermique, permettant d'absorber la chaleur lors de la phase de rentrée, et ainsi garantir leur intégrité. Ces boucliers peuvent être de deux types :

- les boucliers réutilisables,
- les boucliers ablatifs.

Les premiers sont utilisés sur des objets tels que la navette spatiale, pour lesquels leur manœuvrabilité leur permet d'avoir un grand angle d'incidence lors de la rentrée, et ainsi limiter le freinage lié aux gaz atmosphériques et l'échauffement proche paroi. Ils sont composés de matériau de faible conductivité thermique et d'une forte réflectivité, permettant de rémettre la chaleur par convection et radiation. Les seconds sont utilisés pour des objets comme les modules de commande et de service des missions Apollo, des engins peu manœuvrables subissant des conditions de freinage et d'échauffement beaucoup plus sévères. Ils sont généralement composés d'un assemblage de deux matériaux, une matrice et un renfort, appelé matériau composite. Le renfort (fibre de carbone ou de silice), plus résistant, assure la tenue mécanique du bouclier. La matrice (métal, résine), injectée à travers le renfort, sert de liaison et transfère les efforts entre les fibres. Elle offre ainsi une couche de protection supplémentaire. L'inhomogénéité de la protection, sous l'effet de la chaleur extrême, est l'objet d'une ablation différentielle, observable sous la forme d'alvéole à la surface des boucliers [Fig. 1.1](#).

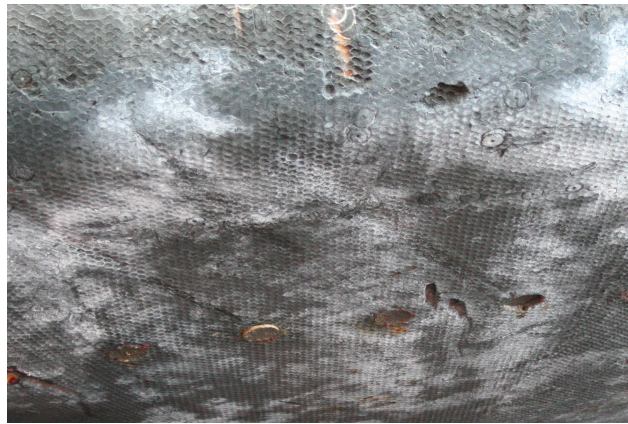


Fig. 1.1. Bouclier thermique du module de commande et de service utilisé lors de la mission Apollo 12 (Wikipédia).

Le flux thermique pariétal significatif va faire se sublimer les fibres de carbones et faire fondre la matrice. Cette phase liquide va alors s'écouler le long de la paroi rugueuse et dans les alvéoles. La dynamique de cet écoulement multiphasique et multiespèce est très complexe. En effet, la sublimation et la fusion du composite s'accompagnent de l'apparition de lignes triples au niveau desquelles la force de tension de surface entre en compétition avec les forces inertielles et les forces visqueuses. Dans ces travaux, on s'intéresse aux phénomènes en présence à l'échelle de la taille des alvéoles, entre l'écoulement gazeux et le bouclier thermique, il faut donc tenir compte a priori de l'ensemble de ces forces.

1.2 Présentation des différents types d'interactions

Les phénomènes étudiés font intervenir quatre interactions distinctes :

1. les effets de pyrolyse et couplage thermique entre les matériaux du composite résine-fibres,
2. les réactions d'ablation à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux,
3. la fusion de la matrice,
4. l'interaction entre la phase liquide issue de la fusion de la résine et l'écoulement gazeux.

Ces interactions sont représentées schématiquement sur la [Fig. 1.2](#).

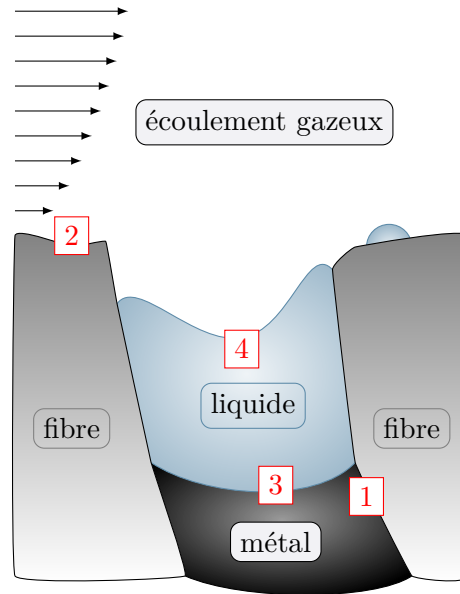


Fig. 1.2. Représentation schématique de l'ablation d'un matériau composite [Lat13].

1.2.1 Effets de pyrolyse et couplage thermique entre les matériaux du composite résine-fibres

Les fibres constituant le bouclier sont élaborées à partir d'un tissage, dans lequel est injecté la matrice. Le composite possède alors des conductivités thermiques différentes selon les zones, ce qui va affecter les transferts thermiques de la paroi vers l'intérieur de l'objet. Ainsi, soumis à des températures extrêmes, la chaleur va se diffuser dans tout le bouclier. Les gradients de température en présence vont transformer le matériau composite. La résine va fondre et une phase liquide sera injectée entre les fibres, tandis que les celles-ci vont se pyrolyser, introduisant ainsi du gaz, et créant des fissures et déformations dans le matériau. Ces réactions de pyrolyse vont affecter la stabilité mécanique et thermique du composite, et modifier ses propriétés en profondeur.

1.2.2 Réactions d'ablation à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux

L'ablation est l'érosion progressive de la surface du bouclier, résultat de réactions physico-chimiques complexes entre l'écoulement gazeux et les fibres du composite. Dans le cas de l'atmo-



Fig. 1.3. Structure d'un matériau composite C/C d'un bouclier thermique [YZX⁺09].

sphère terrestre, la présence d'oxygène entraîne des réactions d'oxydation lors de la décomposition des fibres carbonées, et la formation d'oxyde de carbone. Comme le montre la Fig. 1.4, lorsque la température est inférieure à 1000 K, elle est la réaction dominante. Entre 1000 K et 2500 K, l'oxygène présent dans la couche limite induit un débit de masse quasi constant. A des températures plus élevées, la réaction de sublimation va ablater l'objet et entraîner une perte de masse importante. De plus, les différentes espèces chimiques présentes dans l'écoulement peuvent interagir avec celles produites par l'ablation, et entraîner la formation de nouvelles espèces.

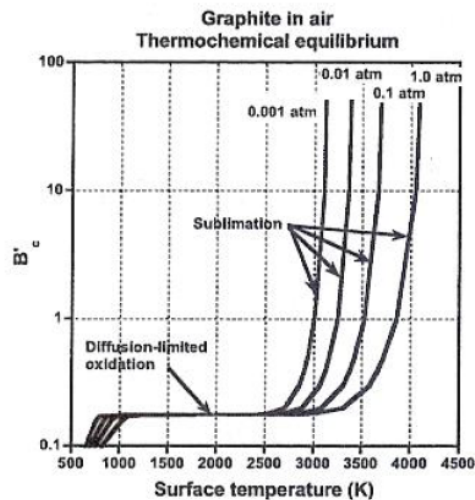


Fig. 1.4. Débit d'ablation en fonction de la température de surface pour le graphite [Lau04].

1.2.3 Fusion de la matrice

La matrice qui assure la cohésion des fibres de carbone va elle aussi subir des dégradations et décompositions lorsque le bouclier thermique est soumis à des températures intenses. Celle-ci va fondre, et s'écouler le long de la paroi, laissant les fibres à nu (voir Fig. 1.5). La fusion de la matrice peut avoir lieu avant les réactions d'ablation des fibres et entraîne alors une ablation différentielle. La dynamique de l'écoulement de cette phase liquide est d'abord pilotée par les effets du cisaillement de la phase gazeuse. Elle va se déplacer dans les alvéoles où la tension de surface peut jouer un rôle prépondérant. Cette phase liquide peut former une couche protectrice à la surface du matériau, agissant comme une barrière thermique et réduisant la vitesse d'ablation. La modification de la surface du bouclier peut jouer sur l'aérodynamisme de l'objet, et favoriser la transition laminaire-turbulent au sein de la couche limite.

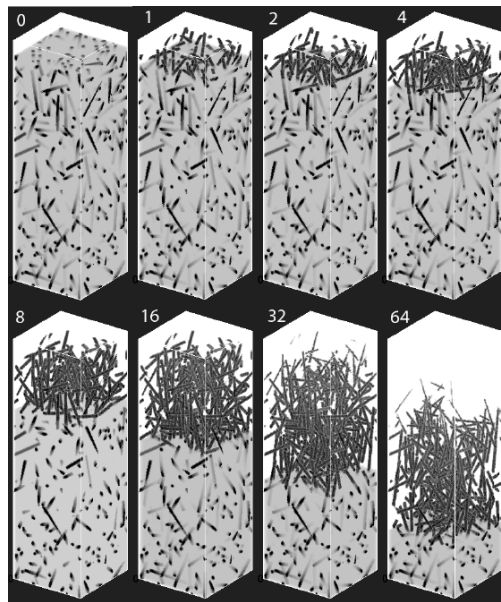


Fig. 1.5. Simulation 3D de l'ablation d'un matériau composite de type PICA [LCM10]. L'ablation de la résine avant celle des fibres laisse à nu celles-ci.

1.2.4 Interactions entre la phase liquide (issue de la fusion de la résine) et l'écoulement gazeux

A mesure que la matrice fond, la phase liquide interagit avec l'écoulement gazeux et ruisselle le long de la paroi. Les propriétés thermodynamiques des deux phases fluides sont très différentes. Le liquide est très dense, très visqueux et quasi incompressible contrairement au gaz très peu dense et fortement compressible. Les lignes triples, frontières entre la phase liquide, la phase solide, et la phase gazeuse, sont les lieux où vont s'exercer les forces de tension de surface. Des gouttelettes de métal fondu peuvent alors être emportées par l'écoulement, et potentiellement se solidifier plus loin sur la surface de l'objet.

1.3 Calcul d'ordres de grandeur

Nous cherchons ici à savoir si les forces de tension de surface peuvent avoir un impact significatif sur un écoulement typique de la rentrée atmosphérique. Pour cela, nous allons chercher à estimer le nombre de Weber dans la fine couche de liquide issue de la fusion d'un cylindre métallique, soumis aux effets dissipatifs visqueux et thermiques. Le nombre de Weber est le ratio entre les forces inertielles et les forces liées à la tension de surface.

On considère le cas d'un film liquide mince s'étalant sur une sphère (voir Fig. 1.6) et soumis à sa surface au cisaillement et au flux de chaleur de l'écoulement gazeux, notés respectivement τ_g et \mathbf{q}_g . On note O le point d'arrêt aérodynamique sur la demi-sphère, Δ l'axe de symétrie passant par O et $r(M)$ la distance à l'axe Δ d'un point M quelconque de la demi-sphère.

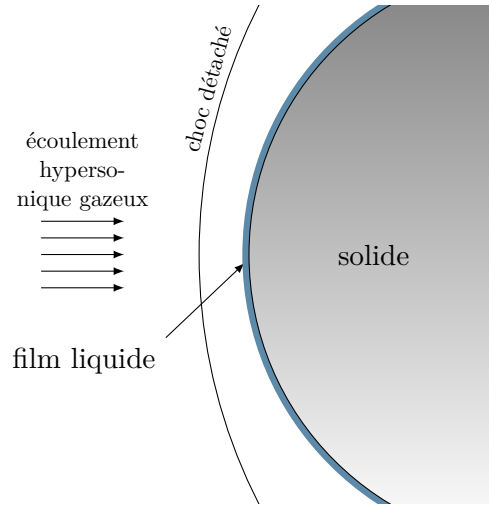


Fig. 1.6. Représentation schématique d'un objet entrant dans l'atmosphère.

On note h_l l'épaisseur du film et u_l sa vitesse moyenne (intégrée sur l'épaisseur) en un point donné sur la demi-sphère. On suppose le film suffisamment mince pour que le profil de vitesse soit linéaire (régime de lubrification). On a par continuité de la contrainte tangentielle à la surface du film

$$2\mu_l \frac{u_l}{h_l} = \tau_g, \quad (1.3.0.1)$$

où μ_l est la viscosité du liquide. La conservation de l'énergie donne

$$\dot{m}L_f = \mathbf{q}_g - \mathbf{q}_s \simeq \mathbf{q}_g, \quad (1.3.0.2)$$

où \dot{m} est le flux massique produit par fusion, L_f la chaleur latente de fusion et \mathbf{q}_s le flux thermique du solide. La température de celui-ci étant supposée très proche de la température de fusion, le flux solide peut être négligé. En régime permanent, la conservation de la masse du liquide donne

$$\rho_l u_l(r) h_l(r) 2\pi r = \mathbf{q}_m, \quad (1.3.0.3)$$

où ρ_l est sa densité et \mathbf{q}_m est le flux de masse par unité de temps traversant le cercle de rayon r dans un plan orthogonal à l'axe Δ tel que $\mathbf{q}_m = \pi r^2 \mathbf{q}_g / L_f$. Les relations (1.3.0.1), (1.3.0.2), (1.3.0.3)

nous permettent d'obtenir le système de taille 2, d'inconnues la vitesse u_l et la hauteur h_l , vérifiant

$$\begin{cases} 2\mu \frac{u_l(r)}{h_l(r)} & = \tau_g, \\ 2\rho_l h_l(r) u_l(r) & = r \frac{\mathbf{q}_g}{L_f}. \end{cases}$$

On en déduit les expressions de u_l et h_l en fonction du rayon r

$$\begin{cases} u_l(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\tau_g r \mathbf{q}_g}{\rho_l L_f \mu_l}}, \\ h_l(r) = \sqrt{\frac{r \mu_l \mathbf{q}_g}{\rho_l L_f \tau_g}}. \end{cases} \quad (1.3.0.4)$$

A partir de ces grandeurs on peut estimer le nombre de Weber We et le nombre de Reynolds Re , ratio des forces inertielles et des forces visqueuses tels que

$$We = \frac{\rho_l u_l^2 h_l}{\sigma} \quad \text{et} \quad Re = \frac{\rho_l u_l h_l}{\mu_l}.$$

Considérons le cas de la fusion d'une bille d'aluminium solide. On reprend les valeurs utilisées dans le cas de la simulation d'une bille d'aluminium dans un écoulement supersonique étudié au [Chapitre 9](#). Le métal fondu possède une densité $\rho_l = 2550 \text{ kg.m}^{-3}$ et une viscosité $\mu_l = 1.235 \times 10^{-3} \text{ N.m}^{-2}$. Sa chaleur latente de fusion vaut $L_f = 3.97 \times 10^3 \text{ J.kg}^{-1}$. Le coefficient de tension de surface de l'aluminium liquide est pris à 0.88 J.m^{-2} . Prenons une bille de rayon $r = 1 \text{ cm}$. Dans les applications visées, avec un nombre de Mach amont $M_\infty = 4.5$, on s'attend aux ordres de grandeurs suivant pour la contrainte de frottement pariétale et le flux de chaleur : $\tau_g = 2 \times 10^3 \text{ N.m}^{-2}$ et $\mathbf{q}_g \cdot \mathbf{n} = 2.5 \times 10^6 \text{ J.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$.

D'après (1.3.0.4), on en déduit les ordres de grandeur de l'épaisseur et de la vitesse du film liquide, le nombre de Weber et le nombre de Reynolds pour différents rayons (voir [Tab. 1.1](#))

r (mm)	1	5	10	20
$u(r)$ (m/s)	10	22	32	45
$h(r)$ (mm)	0.012	0.027	0.039	0.055
We	3.5	40	113	320
Re	255	1275	2550	5100

Tab. 1.1. Ordre de grandeur de la vitesse, de la hauteur du film liquide, du nombre de Weber et du nombre de Reynolds en fonction du rayon.

Ainsi, pour de telles configurations, les forces inertielles et les forces capillaires sont du même ordre de grandeur. La tension de surface doit alors être prise en compte. L'écoulement est également dominé par les forces visqueuses, puisqu'on se trouve dans la couche limite visqueuse. Évidemment, il s'agit ici d'une analyse d'ordre de grandeur avec de nombreuses hypothèses simplificatrices sur la topologie de l'écoulement du liquide et compte-tenu des irrégularités de la surface réelle de l'objet, on s'attend à ce que l'écoulement réel soit bien plus complexe.

1.4 Objectifs de la thèse

L'objectif de la thèse est de développer des méthodes numériques permettant de simuler une partie des phénomènes en présence, énoncés précédemment. En particulier, on considérera des écoulements laminaires, pour lesquels la dissipation visqueuse et la conduction thermique ne sont pas négligeables. On se concentrera sur l'ablation liquide d'une pièce entièrement métallique, typiquement composée d'aluminium, dans des configurations de type cavité entraînées ou d'écoulement axysymétrique autour d'une sphère. La force de tension de surface devra, dans certaines configurations, être prise en compte. Ainsi, nous ne considérerons pas dans ce travail les phénomènes de pyrolyse, de turbulence dans l'écoulement gazeux, ni d'ablation différentielle.

Afin de simuler de telles configurations, il faut être capable de modéliser les trois phases en présence : un gaz considéré monophasique, un solide, et un liquide issu de la fusion de ce dernier. Les deux phases fluides possèdent des propriétés thermodynamique très distinctes. Ainsi, les grands ratios de densité et de pression en jeu nécessitent l'utilisation de méthodes non seulement précises mais aussi très robustes, permettant de représenter le caractère compressible du gaz et incompressible du liquide, dans des écoulements hypersoniques et hyperenthalpiques. La résolution d'écoulement de type couche limite nous oblige également à utiliser des méthodes temporelles implicites, permettant de lever les contraintes de stabilité des schémas liées à l'utilisation de maillages très fins à proximité des parois. Deux interfaces sont donc à traiter dans ce problème : l'interface entre le gaz de l'atmosphère et le liquide issue de la fusion, et le front de fusion qui n'est autre que l'interface entre le fluide et le solide. La première interface sera capturée avec un modèle diphasique représentant l'écoulement fluide, tandis que la seconde sera explicitement suivie par une méthode autorisant le déplacement du maillage, permettant de suivre précisément le front de fusion.

1.5 Descriptif des travaux

Ces travaux sont regroupés en trois grandes parties.

Modélisation du problème de l'ablation liquide

La première partie contient le [Chapitre 2](#) et le [Chapitre 3](#) et concerne d'abord de la modélisation choisie pour traiter le problème de l'ablation liquide.

Dans le [Chapitre 2](#), le modèle diphasique utilisé pour résoudre l'écoulement liquide/gaz est présenté. Nous utilisons le modèle à cinq équations réduit de [\[ACK02, MSNA02\]](#). Ce modèle à interface diffuse, à une vitesse et une pression, permet de gérer facilement l'apparition de nouvelles interfaces et les changements de topologie. Il est suffisant en comparaison aux modèles plus complexes [\[BN86, SPB09\]](#) dans la mesure où on considère les deux phases comme non-miscibles, et on ne cherche pas à résoudre des écoulements avec des gouttelettes ou des inclusions plus petites que l'échelle d'une maille. Ce modèle est enrichi par la prise en compte des effets visqueux et thermiques, ainsi que des forces de tension de surface par deux modélisations différentes. La première modélisation, appelée CSF (*Continuum Surface Force*) [\[BKZ92\]](#), utilise une formulation volumique des forces de tension de surface, appliquée à l'interface entre les deux phases. Elle permet, en construisant un schéma numérique adéquat, de préserver exactement les solutions stationnaires pour lesquelles le champ de pression vérifie la loi de Laplace. Cependant, son écriture avec un produit non-conservatif ne lui permet pas de garantir la conservation de la quantité de mouvement et ni de l'énergie totale. La seconde modélisation, appelée CSS (*Continuum Surface Stress*) [\[GLN+99\]](#), résout le problème

de conservation en remarquant que les forces capillaires peuvent s'écrire sous la forme d'une divergence d'un tenseur des contraintes capillaires. Elle conduit à introduire une énergie capillaire dans l'équation d'énergie totale. Le défaut de cette formulation est la difficulté de construire un schéma qui préserve les solutions stationnaires. On termine le [Chapitre 2](#) par la présentation des relations de fermeture du modèle diphasique, des lois d'état retenues pour chacune des deux phases et par quelques propriétés mathématiques du modèle.

Dans le [Chapitre 3](#), nous présentons succinctement la modélisation du problème de thermique dans le solide. Celui-ci est simplement piloté par l'équation de diffusion. Nous dérivons enfin une condition aux limites à l'interface entre les domaines fluide et solide permettant de calculer la vitesse locale de récession du solide ainsi que la vitesse d'injection du matériau fondu dans le domaine fluide. Le [Chapitre 3](#) se termine par la présentation de l'algorithme de couplage retenu.

Résolution numérique du problème de l'ablation liquide

Dans la deuxième partie, nous abordons la résolution numérique du problème. Tout d'abord, nous présentons dans le [Chapitre 4](#) le schéma utilisé pour discrétiser les termes du second ordre des équations de la partie fluide ou solide sur un maillage mobile, ainsi que la gestion du déplacement du maillage. Le déplacement de l'interface fluide/solide est ainsi précisément calculé par une résolution ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian method*) des équations. Le schéma utilisé pour résoudre l'équation de la chaleur dans le solide est aussi employé pour discrétiser les termes dissipatifs du modèle fluide.

Ensuite, nous présentons dans le [Chapitre 5](#) l'approche générale de résolution de l'écoulement fluide. Celle-ci est basée sur la décomposition d'opérateur Lagrange-Transport [[CGK16](#), [CGK17](#)]. Le système global est décomposé en deux sous-systèmes, résolus successivement en deux étapes. La première, appelée **étape Lagrange**, traite de toute la physique du modèle, c'est-à-dire, l'acoustique, la dissipation visqueuse, la conduction thermique, ainsi que les forces de tension de surface [[CGK16](#), [CGK17](#), [PGM17](#), [ZAGT20](#), [PGM21](#), [ZGK⁺21](#)]. Elle est appelée Lagrange car elle est résolue sous sa forme lagrangienne. Cela nous permet d'utiliser pour la partie hyperbolique aussi bien des schémas de type Godunov classiques [[Gal00](#), [Gal03](#), [PGM17](#)], que des schémas construits pour l'hydrodynamique lagrangienne [[DM05](#), [MABO07](#), [CM18](#)]. De plus, le pas de temps pouvant être très contraignant du fait des maillages utilisés pour capturer la couche limite et des propriétés différentes entre les deux phases, un schéma temporel implicite est utilisé lors de cette étape. La seconde étape, appelée **étape de Transport**, n'est autre que le transport des quantités conservatives à vitesse matérielle. Dans la mesure où une approche ALE des équations est utilisée pour traiter la déformation de maillage due à l'ablation, ce mouvement est géré naturellement dans la seconde étape de décomposition Lagrange-Transport.

Dans le [Chapitre 6](#), nous présentons plus en détail la construction des schémas utilisés pour la résolution de la partie hyperbolique de l'**étape Lagrange**. En particulier, on souhaite pouvoir traiter le produit non-conservatif issu des forces de tension de surface sous la forme CSF directement dans le problème de Riemann, afin de construire des schémas équilibrés, qui préservent les solutions stationnaires. De récents travaux [[GCLM22](#), [DGCC⁺23](#), [Gal23](#)] ont montré le lien étroit entre les schémas de type Godunov et le solveur Lagrangien multidimensionnel EUCCLHYD [[MABO07](#)]. Ceux-ci sont alors réemployés pour construire des schémas de type Godunov non-conservatifs multidimensionnels. Par multidimensionnel, on entend que le stencil utilisé pour le calcul des flux ne dépend pas seulement des voisins aux faces contrairement aux schémas unidimensionnels classiques, mais de tous les voisins aux nœuds. Une fois quelques résultats théoriques présentés, ceux-ci sont

employés pour la construction de schémas numériques pour résoudre le système à cinq équations avec tension de surface sous la forme CSF. Ces schémas sont notamment basés sur la notion de solveur de Riemann simple [Gal00, Gal02a, Gal03, GCLM22, Gal23]. Les schémas de type Godunov ayant des lacunes pour traiter précisément les écoulements à faible nombre de Mach, une correction est proposée pour les schémas unidimensionnels et multidimensionnels, en prenant soin de vérifier que le schéma final préserve toujours les solutions stationnaires.

Les schémas numériques introduits jusque là étant seulement d'ordre un, nous présentons dans le [Chapitre 7](#), leur extension à l'ordre deux. Celle-ci est basée sur les schémas de type-MUSCL [Kol72, Kol11, vL73, vL74, vL77a, vL77b, vL79], qui consistent à définir une approximation polynomiale de la solution dans chacune des cellules, limitée par un limiteur de pente, afin d'évaluer le flux numérique avec les valeurs de la solution interpolées aux centres des faces. Cette stratégie permet d'avoir un schéma d'ordre supérieur à un et robuste. Après une présentation des résultats de la littérature du schéma MUSCL dans le cas scalaire unidimensionnel, nous présentons un résultat de stabilité dans le cadre scalaire multidimensionnel. Puis, un certain nombre de propriétés pouvant être vérifiées par le limiteur de pente sont rappelées. Celle qui nous intéresse en particulier dans le cadre des écoulements diphasiques est le caractère compressif du limiteur, qui permet de mieux représenter des discontinuités. On se sert du caractère compressif de certains limiteurs pour la reconstruction de la fraction volumique afin de limiter la diffusion numérique de l'interface liquide/gaz, dans la mesure où nous nous intéressons à fluides considérés comme non-miscibles [Bla15, CSN17, DFM+21]. Puis, nous présentons quelques schémas numériques temporels pouvant être utilisés dans la stratégie de décomposition Lagrange-Transport. La précision du schéma temporel implicite est notamment améliorée par l'utilisation d'un θ -schéma. Enfin, l'extension des schémas de type Godunov non-conservatifs à l'ordre deux est présentée. On montre notamment l'apparition d'un terme centré lié au produit non-conservatif.

Résultats numériques

Dans la dernière partie, nous présentons les résultats numériques obtenus. Après un résumé des méthodes employées, le [Chapitre 8](#) présente un ensemble de cas académiques utilisés pour tester et évaluer les schémas numériques développés dans cette thèse. Ceux-ci permettent de valider l'approche utilisée pour résoudre des écoulements de type hydrodynamique, visqueux, à faible ou grand nombre de Mach, et en prenant compte les forces de tension de surface. Certains cas sont traités en coordonnées cylindriques en faisant l'hypothèse d'une géométrie axisymétrique. L'extension de la décomposition Lagrange-Transport dans ce système de coordonnées est présentée en [Annexe B](#).

Enfin, le [Chapitre 9](#) présente trois cas plus applicatifs, traitant de l'ablation liquide d'une pièce en aluminium. Le premier, purement monophasique, illustre la prise en compte du déplacement de maillage avec la condition de fusion dans un écoulement de type cavité entraînée. Le deuxième est diphasique et correspond au cas d'une cavité bidimensionnelle remplie de gaz (celui-ci étant entraîné sur le bord supérieur et transmettant de la chaleur au fond métallique de la cavité, ce qui provoque sa fusion et la création d'une phase liquide au sein du gaz). Le dernier cas, inspiré d'une étude expérimentale et numérique menée par [DHB+22], correspond à la fusion d'une bille d'aluminium d'un centimètre de rayon dans un écoulement supersonique à Mach 4.5.

1.6 Communications et publications

Ces travaux ont fait l'objet de plusieurs communications et publications listées ci-dessous.

Communications

- Schéma à l'ordre 2 limitant la diffusion pour l'ablation liquide, SMAI 2021 (*10th Biennale Française des Mathématiques Appliquées et Industrielles*), La Grande-Motte, France. Présentation d'un poster.
- An implicit-explicit lagrange projection splitting scheme with capillary effects and wetting, ECCOMAS 2022 (*European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*), Oslo, Norvège. Présentation orale.
- A numerical strategy based on a diffuse interface two-fluid model to simulate the melting of a solid swept by a hot gas flow, ICMF (*The 11th International Conference on Multiphase Flow*), 2023, Kobe, Japon. Présentation orale.

Publications

- L. Tallois, S. Peluchon, P. Villedieu. A second-order extension of a robust implicit-explicit acoustic-transport splitting scheme for two-phase flows, *Computers & Fluids*, 2022. [[TPV22](#)].
- L. Tallois, G. Gallice, S. Peluchon, P. Villedieu. One-dimensional and multi-dimensional non-conservative Godunov-type schemes : application to two-phase flows with surface tension using Lagrange-Transport splitting strategy. En préparation.

Première partie

Modélisation du problème de
l'ablation liquide

Chapitre 2

Modélisation de l'écoulement diphasique

Sommaire

2.1	Modèle à cinq équations réduit	33
2.2	Prise en compte des effets diffusifs	35
2.3	Prise en compte de effets de tension de surface	36
2.3.1	Formulation non-conservative	37
2.3.2	Formulation conservative	38
2.4	Fermeture du modèle diphasique et lois d'état	39
2.4.1	Rappels de thermodynamique	39
2.4.2	Lois d'états	41
2.4.3	Fermeture du modèle diphasique	45
2.5	Généralités sur les systèmes hyperboliques	46
2.6	Propriétés mathématiques	48
2.6.1	Vitesse du son	48
2.6.2	Hyperbolicité	50
2.6.3	Entropies mathématiques associées	53
2.6.4	Structure du problème de Riemann	54
2.6.5	Domaine de convexité	56
2.7	Conclusion	57

La modélisation des écoulements diphasiques a fait l'objet de nombreuses études. Plusieurs méthodes ont été développées, chacune présentant des avantages et des inconvénients. Elles peuvent être regroupées en deux familles distinctes : les méthodes à interface raide et les méthodes à interface diffuse.

Parmi la famille des méthodes à interface raide, une première approche est la méthode dite *lagrangienne*. Chaque phase peut être modélisée par des équations différentes, et l'interface est suivie explicitement en déplaçant le maillage à la vitesse matérielle. Dans les méthodes dites ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian methods*), le maillage suit le déplacement de l'interface. Le maillage peut cependant être sujet à de fortes distorsions qui peuvent avoir un impact sur la robustesse des calculs. Il est alors nécessaire de développer des algorithmes performants de projection sur un nouveau maillage.

Ensuite, parmi les méthodes *eulériennes* sans diffusion ou presque, il y a les méthodes de *Front capturing* comme les méthodes *Volume Of Fluid* [HN81] et *Moment Of Fluid* [AS07], les méthodes *Front tracking* [CS98] et la méthode *Level Set* [OS88]. Bien que largement utilisées pour leurs résultats satisfaisants, ces méthodes sont complexes à mettre en œuvre et certaines sont parfois non-conservatives, ce qui peut constituer un inconvénient sérieux en fonction des applications visées.

Les méthodes dites à *interface diffuse*, quant à elles, sont basées sur des modèles à deux phases, c'est-à-dire des modèles contenant des équations de conservation pour chacune des deux phases qui sont artificiellement supposées être présentes en tout point de l'espace. Les équations sont résolues sur un maillage fixe de manière eulérienne. Les mêmes équations sont résolues sur l'ensemble du domaine. Ces méthodes permettent la diffusion de l'interface entre chaque fluide. Ainsi, des zones de mélange apparaissent, correspondant à un étalement numérique de l'interface sur quelques cellules. Ces zones nécessitent un traitement particulier pour préserver la cohérence thermodynamique du modèle. De nombreuses études ont été menées dans le but de développer des modèles diphasiques, à la suite des travaux de Baer & Nunziato [BN86] et de leur modèle à sept équations. Il existe en effet toute une hiérarchie de modèles diphasiques déduits du modèle à sept équations [FL11, Lun12]. Un équilibre local de vitesse entre les deux fluides [SA99b] permet de se ramener à un modèle à six équations. Si l'on suppose l'équilibre des pressions, on obtient le modèle à cinq équations de Kapila et al. [KMB⁺01, KK10] ou le modèle réduit à cinq équations [ACK02, MSNA02, MG05]. Il est appelé réduit car les différences de pression entre les phases induisent un terme non-conservatif sur l'équation de la fraction volumique dans le modèle de Kapila, qui est négligé dans le modèle réduit. On a alors simplement une équation de transport de la fraction volumique. Récemment, des modèles diphasiques plus complexes prenant en compte plusieurs échelles de vitesse ont été élaborés [CKDBM19, Cor20].

Une autre approche pour simuler un écoulement diphasique consiste à écrire le même ensemble d'équations pour chaque fluide, et à fermer le modèle en définissant les quantités de mélange comme les quantités de chaque fluide pondérées par sa fraction de volume [CVV02, GVV13, Bla15]. Une hypothèse de fermeture isobare et la résolution d'un système de taille 2 permettent de déterminer la fraction de volume dans les zones de mélange.

Une dernière classe de méthode à d'interface diffuse est appelée *Phase Field* [AMW98]. Cette méthode introduit un champ auxiliaire (le champ de phase ou la fonction de couleur) qui agit comme un paramètre prenant deux valeurs distinctes dans chacune des phases, avec une transition lisse entre les deux valeurs dans la zone autour de l'interface. Dans les modèles d'écoulement diphasique à interface diffuse, la notion de fonction de couleur ou de paramètre de champ de phase n'est pas explicitement introduite, mais son rôle est implicitement joué par la fraction volumique de l'un des deux fluides.

Dans ce travail, une méthode d'interface diffuse est utilisée. Les avantages numériques de cette méthode sont nombreux : les mêmes équations sont résolues sur l'ensemble du domaine, les interfaces ne nécessitent aucun traitement spécifique et l'apparition de nouvelles interfaces ainsi que les changements de topologie se font naturellement. Dans le cas où l'on souhaite modéliser l'écoulement diphasique entre une phase gazeuse et une phase liquide, où la seconde phase n'est pas présente initialement et apparaît à partir de la fusion d'un solide, ces méthodes semblent les plus pertinentes et les plus faciles à mettre en œuvre. La contrepartie de ces méthodes est la diffusion de l'interface entre les deux fluides, qui peut dégrader la solution lorsque les fluides sont supposés non-miscibles. Chacun des fluides est supposé potentiellement présent en tout point de l'espace, avec une fraction volumique prenant les valeurs 0 ou de 1 selon que l'on se trouve dans le fluide 1 ou le fluide 2. Ce n'est qu'au voisinage de l'interface entre les fluides que la fraction volumique de chacun des fluides

passe par la valeur $1/2$. Comme nous considérons que les fluides ne glissent pas l'un par rapport à l'autre à l'échelle d'une cellule, un modèle diphasique avec une vitesse et une pression est utilisé. Ceci évite d'avoir à considérer un modèle à deux vitesses et/ou deux pressions [BN86, SPB09] qui pose de plus grandes difficultés théoriques et numériques et n'est pas nécessaire lorsque la zone de mélange ne modélise pas une zone avec des inclusions telles que des gouttes ou des bulles d'une taille plus petite que l'échelle résolue par le maillage. Les deux phases n'étant pas initialement mélangées, le terme non conservatif du modèle de Kapila et al. [KMB⁺01, KK10] est nul. Le modèle réduit à cinq équations de [ACK02, MSNA02] sera donc utilisé dans ce travail.

Dans ce chapitre, nous allons d'abord présenter le modèle diphasique utilisé en prenant en compte la diffusion visqueuse et thermique, ainsi que deux modèles permettant de tenir compte de la tension de surface. Ensuite, nous présenterons la fermeture employée ainsi que les lois d'état utilisées. Puis, après un rappel des généralités sur les systèmes hyperboliques, nous détaillerons les propriétés mathématiques du système diphasique que nous considérons dans ce travail.

2.1 Modèle à cinq équations réduit

Dans la famille des méthodes à interface diffuse, l'un des modèles diphasique le plus complet est le modèle de Baer & Nunziato [BN86]. Dans ce modèle, les deux phases sont en déséquilibre de pression et de vitesse. Chaque phase $k = 1, 2$ est définie par sa fraction volumique z_k , sa densité ρ_k , sa vitesse $\mathbf{u}_k = (u_k, v_k)$ et son énergie interne $\varepsilon_k = E_k - \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_k\|^2$ où E_k est son énergie totale. Une loi d'état pour chaque fluide permet de calculer sa pression thermodynamique $p_k(\rho_k, \varepsilon_k)$. A chacune des deux phases est associée une équation de conservation de la masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Une quatrième équation concerne l'évolution de la fraction volumique z_k de la phase considérée. Le modèle s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_k z_k) + \nabla \cdot (\rho_k z_k \mathbf{u}_k) & = 0, \\ \partial_t(\rho_k z_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot (\rho_k z_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) + \nabla(z_k p_k) - p_I \nabla z_k & = \Theta_u \Delta \mathbf{u}, \\ \partial_t(\rho_k z_k E_k) + \nabla \cdot (\rho_k z_k E_k \mathbf{u}_k + z_k p_k \mathbf{u}_k) - p_I \mathbf{u}_I \nabla z_k & = \mathbf{u}_I \cdot \Theta_u \Delta \mathbf{u} + \Theta_p \Delta p, \\ \partial_t z_k + \mathbf{u}_I \cdot \nabla z_k & = \Theta_p \Delta p, \end{cases} \quad (2.1.0.1)$$

avec $\Delta \bullet = \bullet_{k'} - \bullet_k$ et où $k' = 3 - k$ est le numéro de l'autre phase, Θ_p et Θ_u sont les paramètres de relaxation en pression et vitesse, et les quantités p_I et \mathbf{u}_I représentent la pression et la vitesse à l'interface entre les deux fluides. Ce modèle possède donc 8 équations. La relation de saturation

$$\sum_k z_k = 1$$

permet de se ramener à un système à 7 équations. Ce modèle a été l'objet de très nombreux travaux, à la fois pour modéliser les quantités interfaciales p_I et \mathbf{u}_I mais aussi pour développer des schémas numériques adaptés, permettant de traiter les produits non-conservatifs $p_I \nabla z_k$ et $p_I \mathbf{u}_I \nabla z_k$, $k = 1, 2$ (voir par exemple [SA99a, CGHS02, AS03, GHS04, CL07, TT10, LL21, PBM23]).

Dans ce travail, on considère que les deux phases sont vraiment séparées. Le modèle diphasique doit simplement permettre de déterminer une fermeture nécessaire au calcul des quantités de mélanges dans des zones normalement très réduites, dues à la diffusion du schéma numérique. Ainsi, en supposant l'équilibre des pressions et des vitesses, on peut alors se ramener au système à cinq

équations réduit avec une seule vitesse \mathbf{u} et une seule pression p

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \nabla \cdot (\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \nabla \cdot (\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \mathbf{0} \\ \partial_t(\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t z_1 + \mathbf{u} \cdot \nabla z_1 & = 0 \end{cases} \quad (2.1.0.2)$$

Le modèle est appelé réduit pour le différencier du modèle à cinq équations de Kapila [KMB⁺01] pour lequel un terme non-conservatif modélisant les fluctuations de pression d'ordre un sur l'équation d'évolution de la fraction volumique est présent. Ce terme est ici négligé car on considère que les deux phases ne sont pas mélangées à l'instant initial, ne sont pas miscibles, et la diffusion de l'interface est seulement numérique.

La densité de mélange ρ ainsi que l'énergie interne de mélange ε se déduisent par pondération des densités et énergies de chaque phase par la fraction volumique. On a donc

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_1 z_1 + \rho_2 (1 - z_1), \\ \rho \varepsilon &= \rho_1 \varepsilon_1 z_1 + \rho_2 \varepsilon_2 (1 - z_1). \end{aligned} \quad (2.1.0.3)$$

L'énergie totale de mélange E se déduit ainsi facilement par

$$\rho E = \rho_1 E_1 z_1 + \rho_2 E_2 (1 - z_1).$$

Ce modèle a été proposé indépendamment par Allaire et *al.* [ACK02] et par Massoni et *al.* [MSNA02]. On y retrouve les équations de conservation de la masse de chaque phase, de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie ainsi qu'une équation de transport de la fraction volumique. C'est ce modèle qui a été retenu afin de modéliser l'écoulement diphasique. La fermeture isobare [ACK02, MSNA02] est la plus judicieuse afin de fermer le système (2.1.0.2). Dans le cas où l'on considère des équations d'états de type gaz raides, van der Waals ou Mie-Grüneisen [ACK02], on peut alors trouver une expression analytique de la pression de mélange. Dans le cas où une fermeture isotherme est considérée, l'équation sur la fraction volumique est alors découplée du reste du système [ACK02]. Cette fermeture ne sera pas traitée ici.

Ce modèle réduit, ainsi que le modèle à cinq équations de Kapila [KMB⁺01] ont par la suite été enrichis de nombreux phénomènes physiques. Tout d'abord, Périgaud & *al.* [PS05] y ajoutent les effets liés à la dissipation visqueuse, ainsi que la tension de surface sous forme CSF (*Continuum surface Force*) [BKZ92] et sous la forme CSS (*Continuum Surface Stress*) [GLN⁺99]. Ensuite, Barberon & *al.* [BH05] et Saurel & *al.* [SPA08] ajoutent les effets de changement de phase, tandis que l'ébullition est traitée par Le Martelot & *al.* [LMSN14] et l'évaporation par Rodio & *al.* [RA15]. Braconnier considère en plus des effets visqueux et capillaire la conduction thermique [BN09]. Dans sa thèse, Latige considère des écoulements diphasiques pour lesquels la phase gazeuse est multiespèces [Lat13]. Ici, les phénomènes physiques d'intérêts sont ceux intervenant dans le cadre d'un écoulement hypersonique avec une phase liquide et une phase gazeuse non miscibles. On se contente alors des effets liés à la dissipation visqueuse et la conduction thermique, ainsi que de la force de tension de surface.

2.2 Prise en compte des effets diffusifs

Afin de prendre en compte les effets diffusifs liés à la viscosité et la conduction thermique, il est nécessaire de supposer que chacune des phases k est modélisée par les équations de Navier-Stokes

$$\begin{cases} \partial_t \rho_k + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) & = 0, \\ \partial_t (\rho_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) + \nabla p_k & = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k, \\ \partial_t (\rho_k E_k) + \nabla \cdot (\rho_k E_k \mathbf{u}_k + p_k \mathbf{u}_k) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_k \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot \mathbf{q}_k, \end{cases}$$

où les effets visqueux sont pris en compte via le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}_k$ pour lequel l'hypothèse de Stokes est ainsi considérée vraie

$$\boldsymbol{\tau}_k = -\frac{2}{3} \mu_k \nabla \cdot \mathbf{u}_k + \mu_k (\nabla \mathbf{u}_k + \nabla^T \mathbf{u}_k),$$

où μ_k est la viscosité de la phase considérée. La diffusion thermique est modélisée par le flux de chaleur \mathbf{q}_k qui suit la loi de Fourier

$$\mathbf{q}_k = -\lambda_k \nabla T_k,$$

où λ_k est la conduction thermique et T_k la température.

Il est possible de montrer que, lorsque les termes de relaxations en vitesse et en pression tendent vers 0, la limite asymptotique du système à sept équations de Baer & Nunziato (2.1.0.1) avec effets diffusifs correspond au modèle à cinq équations réduit avec dissipation visqueuse et conduction thermique suivant

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_1 z_1) + \nabla \cdot (\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t (\rho_2 z_2) + \nabla \cdot (\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q}, \\ \partial_t z_1 + \mathbf{u} \cdot \nabla z_1 & = 0. \end{cases}$$

où $\mu = \sum_{k=1}^2 z_k \mu_k$ est la viscosité du mélange et $\mathbf{q} = -z_1 \lambda_1 \nabla T_1 - z_2 \lambda_2 \nabla T_2$ est un flux thermique de mélange [Pé03, Bra07]. Ainsi, les deux phases sont modélisées par les équations de Navier-Stokes compressible.

En pratique, il est difficile de définir le flux de chaleur de chaque phase en présence d'une interface où les fluides ne sont pas mélangés. On adopte alors la stratégie développée dans [PGM21], et on suppose que le flux de chaleur de mélange \mathbf{q} suit une loi de Fourier

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T,$$

avec un conductivité de mélange $\lambda = z_1 \lambda_1 + z_2 \lambda_2$ et une température de mélange

$$T = \frac{1}{c_v} \sum_{k=1}^2 \frac{\rho_k z_k}{\rho} c_{v_k} T_k,$$

2.3. Prise en compte de effets de tension de surface

où c_{v_k} est la capacité thermique à volume constant de la phase k et c_v est une capacité thermique de mélange telle que

$$c_v = \sum_{k=1}^2 \frac{\rho_k z_k}{\rho} c_{v_k}.$$

Cette écriture est cohérente avec la définition de l'énergie interne de mélange (2.1.0.3) [PGM21].

2.3 Prise en compte de effets de tension de surface

La tension de surface se caractérise par une force surfacique s'appliquant à l'interface entre deux milieux. Cette force a pour origine l'interaction inter-particulaire électrostatique. Dans un milieu au repos, l'attraction inter-particulaire de type van der Waals assure le maintien de la cohésion de la matière. Cette attraction est cependant différente entre l'intérieur d'un domaine et sa surface, puisque à l'interface, les molécules interagissent avec moins de voisins du même milieu. Ces forces électrostatiques étant attractives, il faut fournir de l'énergie pour augmenter le nombre de molécules en surface à volume constant. C'est ce phénomène qui est à l'origine de la tension de surface.

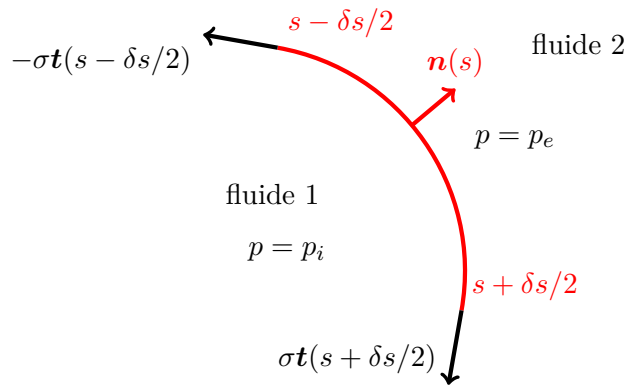


Fig. 2.1. Représentation unidimensionnelle des forces agissant sur l'interface courbe entre deux fluides non miscibles.

Considérons pour simplifier une interface unidimensionnelle, séparant deux fluides non miscibles au repos (voir Fig. 2.1). La force de tension de surface, notée $\mathbf{F}_c = \sigma \mathbf{t}$, agit en chaque point au plan tangent à l'interface. En supposant l'interface isotherme, sa norme par unité de longueur est constante et égale à σ : le coefficient de tension de surface. Sur la surface linéique infinitésimale δs , paramétrée par la grandeur s la force linéique de tension de surface est donné par

$$\delta \mathbf{F}_c = \sigma \mathbf{t}(s + \delta s/2) - \sigma \mathbf{t}(s - \delta s/2).$$

Les formules de Frenet-Serret nous donnent

$$\lim_{\delta s \rightarrow 0} \frac{\mathbf{t}(s + \delta s) - \mathbf{t}(s)}{\delta s} = -\kappa \mathbf{n},$$

où κ , proportionnel à l'inverse d'une longueur, désigne la courbure de l'interface, et \mathbf{n} est la normale sortante. La résultante des forces de tension de surface est une force normale à l'interface dirigée vers le centre de courbure, dont l'expression finale est donc

$$\delta \mathbf{F}_c = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta s.$$

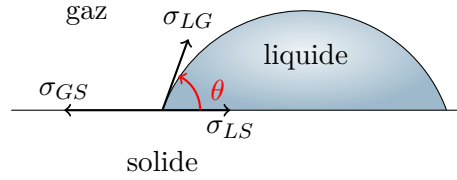


Fig. 2.2. Représentation schématique de l'angle de contact.

La résultante des forces de pression par unité de longueur a quant à elle pour expression

$$\delta \mathbf{F}_p = p_i \mathbf{n} \delta s - p_e \mathbf{n} \delta s,$$

où p_i désigne la pression intérieure du fluide 1 et p_e la pression extérieure du fluide 1. À l'équilibre, la somme des forces est nulle. On aboutit à la relation

$$p_i - p_e = \sigma \kappa. \quad (2.3.0.1)$$

Cette relation est appelée Loi de Laplace. Ainsi, dans un milieu fluide s'exercent des forces volumiques liées à la pression, ainsi que des forces surfaciques à l'interface liées à sa géométrie. Ces dernières induisent un saut de pression égal au produit de la courbure de l'interface κ et du coefficient de tension de surface σ .

Un second phénomène lié à la tension de surface est le mouillage d'un fluide sur un substrat (voir [VZ02]). Il est caractérisé par exemple, par l'apparition d'un ménisque dans un verre d'eau. L'angle de contact, que l'on notera θ , entre le fluide, l'air et le substrat est défini sur la Fig. 2.2. Cet angle vérifie la loi de Young-Dupré, bilan des forces de tension de surface entre le liquide et le gaz σ_{LG} , entre le liquide et le solide σ_{LS} et entre le gaz et le solide σ_{GS}

$$\sigma_{LG} \cos \theta = \sigma_{GS} - \sigma_{LS}.$$

Cet angle de contact θ est généralement dynamique, et dépend de la vitesse de la ligne triple, intersection entre le solide, le liquide et le gaz. Il prend alors une ensemble de valeurs entre deux angles limites : l'angle d'avancement θ_a et l'angle de recul θ_r . Cependant, pour simplifier, seul un angle statique sera considéré dans ces travaux, ce qui revient à supposer $\theta_a = \theta_r$. De plus, des phénomènes microscopiques peuvent également intervenir et modifier l'angle de contact macroscopique, comme le cas d'une paroi avec des micro-rugosités contrairement au cas d'une paroi parfaitement lisse, mais ne seront pas traités ici.

Il existe deux formulations principales permettant de modéliser la force de tension de surface dans les modèles à interface diffuse. Elles sont toutes les deux issues de l'application de la loi de Laplace. En effet, d'après cette loi, la force volumique issue de la tension de surface appliquée à l'interface entre les fluides s'écrit

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \delta \mathbf{n}, \quad (2.3.0.2)$$

où δ est la mesure de Dirac portée par l'interface et \mathbf{n} la normale à l'interface. Nous allons maintenant présenter ces deux formulations.

2.3.1 Formulation non-conservative

La difficulté de modéliser la tension de surface de manière volumique réside dans le fait qu'il faut être capable de situer exactement l'interface entre deux fluides distincts. Dans les méthodes

à interface raide, cette interface est explicitement connue. Il est cependant nécessaire d'estimer correctement la courbure κ . Dans les méthodes à interface diffuse, on ne connaît pas la position exacte de l'interface. Brackbill & *al.* [BKZ92] proposent alors une formulation volumique de la Loi de Laplace, où cette force \mathbf{F}_σ est donnée par

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \nabla z_1, \quad (2.3.1.1)$$

ce qui revient à approcher $\delta \mathbf{n}$ dans (2.3.0.2) par ∇z_1 . La fraction volumique z_1 étant dans le cas idéal égale à 0 ou 1 selon la phase, cette approximation est consistante. Il reste à estimer la courbure. Sachant qu'elle est égale en théorie à $\nabla \cdot \mathbf{n}$ ou \mathbf{n} désigne la normale unitaire à l'interface, il est naturel de prendre

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla z_1}{\|\nabla z_1\|} \right).$$

Cette modélisation des effets de tension de surface est appelée CSF (*Continuum Surface Force*). Le modèle à cinq équations avec tension de surface sous la forme CSF est donné par le système suivant

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \nabla \cdot (\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \nabla \cdot (\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \sigma \kappa \nabla z_1, \\ \partial_t(\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = \sigma \kappa \nabla z_1 \cdot \mathbf{u}, \\ \partial_t z_1 + \mathbf{u} \cdot \nabla z_1 & = 0. \end{cases}$$

Ici, les effets Marangoni [VZ02], prenant en compte la variation du coefficient de tension de surface σ en fonction de la température T sont négligés. Dans le cas contraire, il est nécessaire d'ajouter une force supplémentaire tangentielle à l'interface. De plus, le système à cinq équations avec tension de surface sous la forme CSF est non-conservatif. Il n'est donc pas bien adapté à l'écriture de schémas numériques garantissant la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie. Ce défaut nous pousse à étudier une formulation conservative.

2.3.2 Formulation conservative

Dans [GLN⁺99], les auteurs montrent qu'il est possible de dériver une forme conservative du modèle CSF. En effet, la quantité de mouvement et l'énergie ne peuvent que se conserver puisque la tension de surface est une force interne du système composé des deux fluides. On doit donc pouvoir l'écrire sous la forme d'une divergence. Ainsi, on a formellement

$$\mathbf{F}_\sigma = \nabla \cdot \left(\sigma \|\nabla z_1\| \mathbf{I}_d - \sigma \frac{\nabla z_1 \otimes \nabla z_1}{\|\nabla z_1\|} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.3.2.1)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes capillaires. Cette modélisation est par la suite appelée CSS (*Continuum Surface Stress*) [GLN⁺99]. Elle présente l'avantage d'être écrite sous forme conservative et de contenir l'effet Marangoni sans besoin d'ajouter une composante tangentielle supplémentaire. Dans le cas où l'on s'intéresse à l'équation d'énergie, on peut montrer que cette formulation introduit une énergie capillaire par unité de masse ε_σ proportionnelle au gradient de la fraction volumique [Cha04, PS05]. Elle est donnée par

$$\rho \varepsilon_\sigma = \sigma \|\nabla z_1\|.$$

La quantité $\|\nabla z_1\|$ est une approximation de la densité volumique d'aire interfaciale. Le modèle à cinq équations réduit avec tension de surface sous la forme CSS est donc donné par

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \nabla \cdot (\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \nabla \cdot (\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \partial_t(\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}), \\ \partial_t z_1 + \mathbf{u} \cdot \nabla z_1 & = 0. \end{cases}$$

où l'énergie totale de mélange devient $E = \varepsilon + \frac{1}{2}\|\mathbf{u}\|^2 + \varepsilon_\sigma$. Ce modèle permet donc de conserver la masse de chaque phase, la quantité de mouvement ainsi que l'énergie totale de mélange. De plus, il n'est plus nécessaire d'un point de vue numérique d'estimer la courbure κ , qui est une des difficultés principales de la formulation CSF, ce qui le rend dans un premier temps plus attrayant. Cependant, il est difficile avec cette formulation de construire un schéma numérique permettant de préserver exactement les solutions stationnaires à vitesse nulle. On observe alors des courants parasites, de plus ou moins grande amplitude.

Remarque 1

Dans [SPD⁺17], les auteurs montrent que ce modèle peut être obtenu à partir du hamiltonien, en se donnant une énergie capillaire $\rho\varepsilon = \sigma\|\nabla z_1\|$ et en appliquant le principe variationnel. Cette approche a récemment été utilisée dans [Cor20] pour dériver des modèles diphasiques plus complets.

2.4 Fermeture du modèle diphasique et lois d'état

Dans les modèles présentés précédemment, il y a toujours une ou deux inconnues de plus que d'équations. Si on connaît toutes les quantités conservatives, les inconnues sont alors la pression p et la température T . Il est nécessaire de fermer le modèle.

2.4.1 Rappels de thermodynamique

Une loi d'état en thermodynamique est une relation entre les variables d'état. Ce sont par exemple la densité, la température, l'énergie interne ou encore la pression. En mécanique des fluides et notamment en dynamique des gaz compressible, la loi d'état permet de relier la pression aux autres variables d'état, afin de fermer le modèle. L'essentiel des quantités et relations nécessaires à la modélisation des états fluides utilisés dans ce manuscrit est rappelé ici. Pour plus de détails, on pourra se référer à [MP89, Ann. A].

La relation fondamentale de Gibbs-Duhem nous donne l'expression de la température T et de la pression p comme des dérivées de l'énergie interne spécifique ε en fonction de l'entropie spécifique s et du volume spécifique $\vartheta = 1/\rho$ tel que

$$d\varepsilon = Tds - pd\vartheta.$$

Il est alors possible de définir l'ensemble des variables thermodynamiques en fonction du couple volume spécifique–énergie interne spécifique (ϑ, ε) . Ainsi, à partir de l'entropie spécifique $s = s(\vartheta, \varepsilon)$,

on peut définir la température $T = T(\vartheta, \varepsilon)$ telle que

$$T = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right|_{\vartheta},$$

et la pression $p = p(\vartheta, \varepsilon)$ telle que

$$p = T \left. \frac{\partial s}{\partial \vartheta} \right|_{\varepsilon}.$$

En écrivant la différentielle du volume spécifique à partir du couple pression–température (p, T) , on a

$$d\vartheta = \alpha_p \vartheta dT - \beta_T \vartheta dp,$$

où α_p est le coefficient de dilatation isobare

$$\alpha_p = \left. \frac{1}{\vartheta} \frac{\partial \vartheta}{\partial T} \right|_p, \quad (2.4.1.1)$$

et β_T est le coefficient de compressibilité isotherme

$$\beta_T = - \left. \frac{1}{\vartheta} \frac{\partial \vartheta}{\partial p} \right|_T. \quad (2.4.1.2)$$

L'énergie libre de Helmholtz F est donnée par

$$F(\vartheta, T) = \varepsilon - Ts, \quad (2.4.1.3)$$

On a donc, en différenciant F

$$dF = d\varepsilon - T ds - s dT.$$

A partir de la relation fondamentale de Gibbs, on en déduit

$$dF = -pd\vartheta - s dT,$$

ce qui permet de définir la pression et l'entropie en fonction des variables indépendantes (ϑ, T)

$$p(\vartheta, T) = - \left. \frac{\partial F}{\partial \vartheta} \right|_T, \quad (2.4.1.4)$$

$$s(\vartheta, T) = - \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{\vartheta}. \quad (2.4.1.5)$$

En écrivant la différentielle de l'énergie interne avec le même couple de variables indépendantes, on a

$$d\varepsilon = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_{\vartheta} dT + \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vartheta} \right|_T d\vartheta.$$

Le premier terme $c_v = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_{\vartheta}$ est la capacité thermique à volume constant.

L'enthalpie par unité de masse d'un système est donnée par

$$h = \varepsilon + p\vartheta.$$

En étudiant sa différentielle et en utilisant la relation fondamentale de Gibbs, on a

$$dh = Tds + \vartheta dp.$$

La capacité thermique à pression constante est donnée par $c_p = \frac{\partial h}{\partial T}|_p$. Ces deux capacités sont reliées par la coefficient adiabatique γ tel que $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$. Le différentielle de l'entropie vaut

$$ds = \frac{\partial s}{\partial \vartheta} \Big|_T d\vartheta + \frac{\partial s}{\partial T} \Big|_{\vartheta} dT,$$

avec

$$\frac{\partial s}{\partial \vartheta} \Big|_T = \frac{\Gamma c_v}{\vartheta} \quad \text{et} \quad \frac{\partial s}{\partial T} \Big|_{\vartheta} = \frac{c_v}{T},$$

où Γ est le coefficient de Grüneisen. Une dernière grandeur essentielle permettant de caractériser un fluide est la vitesse du son c . A partir de la différentielle de la pression et du couple densité-entropie (ρ, s) , on a

$$dp = c^2 d\rho + \rho \Gamma T ds,$$

où $\Gamma = \frac{\vartheta}{T} \frac{\partial p}{\partial s} \Big|_{\rho}$ est encore le coefficient de Grüneisen et

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_s.$$

On peut trouver d'autres relations pour exprimer la vitesse du son. On utilisera notamment

$$c^2 = \vartheta^2 p \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \Big|_{\vartheta} - \vartheta^2 \frac{\partial p}{\partial \vartheta} \Big|_{\varepsilon}, \quad (2.4.1.6)$$

ou encore

$$c^2 = \chi + h\kappa, \quad (2.4.1.7)$$

avec

$$\chi = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_{\rho\varepsilon} \quad \text{et} \quad \kappa = \frac{\partial p}{\partial \rho\varepsilon} \Big|_{\rho}. \quad (2.4.1.8)$$

2.4.2 Lois d'états

Dans ce travail, on utilisera les lois d'états des gaz parfaits, des gaz raides et une loi de type Mie-Grüneisen. Les rappels de thermodynamique nous permettront de déterminer les différentes grandeurs thermodynamiques ainsi que la vitesse du son associées à ce type de lois.

Loi d'état des gaz parfaits

Pour un fluide donné, l'équation d'état de type gaz parfait est entièrement déterminée par l'énergie libre de Helmholtz (par unité de masse)

$$F_{\gamma}(\vartheta, T) = c_v T \left(1 - \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) - (\gamma - 1) \ln \left(\frac{\vartheta}{\vartheta_0} \right) \right) - s_o T,$$

où $\gamma > 1$ est le coefficient adiabatique, $c_v > 0$ est la capacité thermique à volume constant, et T_0 , ϑ_0 et s_o sont respectivement une température, un volume spécifique et une entropie spécifique

(par unité de masse) de référence. Les relations de thermodynamique introduites précédemment permettent de déterminer, d'après (2.4.1.4), la loi d'état

$$p(\rho, \varepsilon) = \rho\varepsilon(\gamma - 1),$$

d'après (2.4.1.3), la loi calorifique

$$\varepsilon(T) = c_v T,$$

d'après (2.4.1.6), la vitesse du son

$$c^2 = \gamma \frac{p}{\rho},$$

et d'après (2.4.1.5), l'entropie d'un gaz parfait

$$s(p, \vartheta) = s_0 + c_v \ln \left(\frac{p\vartheta^\gamma}{p_0\vartheta_0^\gamma} \right),$$

où p_0 est une pression de référence. Les coefficients de Grüneisen, de dilatation isobare et de compressibilité isotherme sont donnés par

$$\Gamma = \gamma - 1, \quad \alpha_p = \frac{1}{T}, \quad \text{et} \quad \beta_T = \frac{1}{p}.$$

Loi d'état des gaz raides

L'énergie libre de Helmholtz pour un gaz raide est donnée par

$$F(\vartheta, T)_{\gamma, \pi} = F_\gamma(\vartheta, T) + \vartheta\pi + q,$$

où $F_\gamma(\vartheta, T)$ est l'énergie libre de Helmholtz d'un gaz parfait, q est une énergie interne de référence et π une pression de référence. Cette loi sera largement utilisée dans ces travaux pour décrire les liquides. On remarque aisément que la loi des gaz parfaits correspond au cas particulier de la loi des gaz raides où $q = \pi = 0$. L'énergie interne de référence permettra entre autres d'ajuster le zéro de l'énergie interne et ne sera nécessaire que dans les applications avec du changement de phase, et ce pour tenir compte de l'enthalpie de formation. Les relations thermodynamiques précédentes permettent de déterminer la loi d'état

$$p(\rho, \varepsilon) = \rho(\varepsilon - q)(\gamma - 1) - \gamma\pi, \tag{2.4.2.1}$$

la loi calorifique

$$\varepsilon(\vartheta, T) = q + c_v T + \vartheta\pi,$$

la vitesse du son

$$c^2 = \gamma \frac{p + \pi}{\rho},$$

ainsi que l'entropie d'un gaz raide

$$s(p, \vartheta) = s_0 + c_v \ln \left(\frac{(p + \pi)\vartheta^\gamma}{(p_0 + \pi)\vartheta_0^\gamma} \right),$$

où p_0 est toujours une pression de référence. Les coefficients de Grüneisen, de dilatation isobare et de compressibilité isotherme sont donnés par

$$\Gamma = \gamma - 1, \quad \alpha_p = \frac{1}{T}, \quad \text{et} \quad \beta_T = \frac{1}{p + \pi}.$$

La pression de référence π permet de restituer le comportement mécanique des liquides. Généralement, cette pression est très grande devant l'unité, de l'ordre de 10^8 Pa pour de l'eau liquide. Ainsi, le coefficient de compressibilité β_T est très faible. Cependant, α_p ne dépend d'aucun paramètre permettant de restituer correctement le comportement de dilatation thermique du fluide. Celle-ci sera alors surestimée par cette loi d'état.

Loi d'état de type Mie-Grüneisen

Nous allons construire une loi d'état de type Mie-Grüneisen, permettant de rendre compte de dilatation thermique du fluide. Cette stratégie a notamment été utilisée par Latige [Lat13]. On rappelle que l'énergie libre de Helmholtz est donnée par

$$F(\vartheta, T) = \varepsilon(\vartheta, T) - s(\vartheta, T)T.$$

Pour une équation d'état générale avec un coefficient de Grüneisen et une capacité thermique fonctions du volume ϑ et de la température T , on a l'entropie, la pression et l'énergie interne suivantes

$$\begin{aligned} s(\vartheta, T) &= s_0 + \int_{T_0}^T \frac{1}{T'} c_v(\vartheta, T') dT' + \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} \frac{c_v(\vartheta', T) \Gamma(\vartheta', T)}{\vartheta'} d\vartheta', \\ p(\vartheta, T) &= p_c(\vartheta) - \frac{\Gamma c_v T_0}{\vartheta} - \frac{1}{\vartheta} \int_{T_0}^T c_v(\vartheta, T') \Gamma dT', \\ \varepsilon(\vartheta, T) &= \varepsilon_0 - \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} p_c(\vartheta') d\vartheta' + \int_{T_0}^T c_v(\vartheta, T') dT', \end{aligned}$$

où T_0 , s_0 , ε_0 et ϑ_0 sont respectivement des température, entropie, énergie interne et volume de référence [Men16]. La quantité $p_c(\vartheta)$ est homogène à une pression. On considère par souci de simplicité que la capacité thermique à volume constant c_v et le coefficient de Grüneisen Γ sont constants et ne dépendent pas du volume spécifique. On en déduit alors simplement l'expression de l'entropie

$$s(\vartheta, T) = s_0 + c_v \left(\ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + \Gamma \ln \left(\frac{\vartheta}{\vartheta_0} \right) \right).$$

L'énergie interne et la pression sont alors données avec le couple (ϑ, T)

$$\varepsilon(\vartheta, T) = \varepsilon_0 + c_v(T - T_0) - \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} p_c(\vartheta') d\vartheta', \quad (2.4.2.2)$$

$$p(\vartheta, T) = p_c(\vartheta) + \frac{\Gamma c_v}{\vartheta} T. \quad (2.4.2.3)$$

Il reste alors à déterminer la quantité $p_c(\vartheta)$. Pour cela, on suppose que la pression a la forme d'une équation d'état de type gaz raide

$$p(\vartheta, \varepsilon) = p_0 + \frac{\Gamma}{\vartheta} (\varepsilon - \varepsilon_0) + \Pi \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} - 1 \right). \quad (2.4.2.4)$$

En identifiant, d'après l'équation d'état de la pression d'un gaz raide (2.4.2.1), on trouve

$$\Gamma = \gamma - 1, \quad q = \varepsilon_0 - \vartheta_0 \frac{\Pi}{\gamma - 1} \quad \text{et} \quad \pi = \frac{\Pi - p_0}{\gamma}.$$

D'après (2.4.2.2), (2.4.2.3), on a

$$p(\vartheta, \varepsilon) = p_c(\vartheta) + \frac{\Gamma}{\vartheta} \left(\varepsilon - \varepsilon_0 + \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} p_c(\vartheta') d\vartheta' + c_v T_0 \right). \quad (2.4.2.5)$$

On peut ainsi identifier l'égalité suivante d'après (2.4.2.4) et (2.4.2.5)

$$p_c(\vartheta) + \frac{\Gamma}{\vartheta} \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} p_c(\vartheta') d\vartheta' = p_0 - \frac{\Gamma c_v T_0}{\vartheta} + \Pi \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} - 1 \right).$$

Cette équation aux dérivées ordinaires du premier ordre est facilement résoluble. On obtient, en posant

$$F(\vartheta) = \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} p_c(\vartheta') d\vartheta',$$

l'expression de $F(\vartheta)$

$$F(\vartheta) = \vartheta \frac{p_0 - \Pi}{\Gamma + 1} + \vartheta_0 \frac{\Pi}{\Gamma} - c_v T_0 + C \frac{1}{\vartheta^\Gamma}.$$

où C est une constante à déterminer. On a naturellement $F(\vartheta_0) = 0$, ainsi

$$F(\vartheta) = \left(\vartheta_0 \frac{\Pi}{\Gamma} - c_v T_0 \right) \left(1 - \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^\Gamma \right) + \vartheta \frac{p_0 - \Pi}{\Gamma + 1} \left(1 - \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^{\Gamma+1} \right).$$

La fonction $F(\vartheta)$ peut alors s'écrire en fonction des paramètres de type gaz raide

$$F(\vartheta) = (\varepsilon_0 - q - c_v T_0) \left(1 - \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^{\gamma-1} \right) - \vartheta \pi \left(1 - \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^\gamma \right),$$

soit

$$F(\vartheta) = -\vartheta \pi + \varepsilon_0 - q - c_v T_0 + \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^{\gamma-1} (q - \varepsilon_0 + c_v T_0 + \vartheta_0 \pi).$$

Finalement, l'énergie libre de Helmholtz de ce type d'équation d'état est alors donnée par

$$F(\vartheta, T) = F_{\gamma, \pi}(\vartheta, T) - \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^{\gamma-1} (q - \varepsilon_0 + c_v T_0 + \vartheta_0 \pi).$$

où $F_{\gamma, \pi}(\vartheta, T)$ est l'énergie libre de Helmholtz d'un gaz raide. Les relations thermodynamiques précédentes permettent de déterminer la loi d'état, identique à celle des gaz raides

$$p(\rho, \varepsilon) = \rho(\varepsilon - q)(\gamma - 1) - \gamma \pi,$$

la loi calorifique

$$\varepsilon(\vartheta, T) = q + c_v T + \vartheta \pi - \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} \right)^{\gamma-1} (q - \varepsilon_0 + c_v T_0 + \vartheta_0 \pi)$$

et la vitesse du son, identique à celle des gaz raides

$$c^2 = \gamma \frac{p + \pi}{\rho}.$$

Pour exprimer les constantes Γ et Π en fonction des coefficients de dilatation isobare et de compressibilité isotherme, on utilise les relations (2.4.1.1) et (2.4.1.2),

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \vartheta} \right|_T = -\frac{1}{\vartheta \beta_T} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_{\vartheta} = \frac{\alpha_p}{\beta_T}.$$

En évaluant les coefficients α_p et β_T à l'état de référence $(p_0, T_0, \vartheta_0, \varepsilon_0)$, on a

$$\Gamma = \frac{\vartheta_0 \alpha_{p,0}}{c_v \beta_{T,0}}, \quad (2.4.2.6)$$

et

$$\Pi = \frac{1}{\beta_{T,0}} - \Gamma p_0 + \frac{\Gamma^2 c_v T_0}{\vartheta_0}. \quad (2.4.2.7)$$

Cette loi d'état sera utilisée lorsque la conduction thermique sera prise en compte, notamment dans les cas applicatifs de fusion de d'aluminium.

2.4.3 Fermeture du modèle diphasique

La partie hyperbolique du modèle à cinq équations utilisé ici possède une inconnue de plus que d'équations, et la prise en compte de la diffusion thermique rajoute encore une inconnue. Il est nécessaire de fermer le modèle. Pour cela, on adopte une fermeture isobare [ACK02]. Cette fermeture est donnée par le système d'inconnues $\rho_1 \varepsilon_1$ et $\rho_2 \varepsilon_2$ suivant

$$\begin{cases} p_1(\rho_1, \rho_1 \varepsilon_1) = p_2(\rho_2, \rho_2 \varepsilon_2), \\ \rho \varepsilon = \rho_1 \varepsilon_1 z_1 + \rho_2 \varepsilon_2 z_2. \end{cases} \quad (2.4.3.1)$$

où ρ_1 , z_1 , ρ_2 et z_2 sont connues. Lorsque l'on considère des gaz parfaits, des gaz raides ou des gaz de type Mie Grüneisen, le système (2.4.3.1) peut être résolu explicitement et l'on obtient l'expression suivante pour la pression du mélange

$$p(\rho, \varepsilon, z_1) = \rho(\varepsilon - q)(\gamma(z_1) - 1) - \gamma(z_1)\pi(z_1),$$

où γ le rapport de capacité thermique de mélange, π la pression de référence et q sont donnés par

$$\frac{1}{\gamma - 1} = \sum_{k=1}^2 \frac{z_k}{\gamma_k - 1}, \quad \frac{\gamma \pi}{\gamma - 1} = \sum_{k=1}^2 \frac{z_k \gamma_k \pi_k}{\gamma_k - 1} \quad \text{et} \quad q = z_1 \rho_1 q_1 + z_2 \rho_2 q_2.$$

L'expression de la pression de mélange a donc la même forme que celle d'une phase pure (2.4.2.1) avec les coefficients de mélanges définis précédemment.

Dans la suite, on utilisera notamment y_k la fraction massique de la phase k telle que

$$y_k = \frac{\rho_k z_k}{\rho},$$

qui permet entre autres d'exprimer l'énergie interne spécifique de mélange

$$\varepsilon = \sum_{k=1}^2 y_k \varepsilon_k,$$

le volume spécifique de mélange

$$\vartheta = \sum_{k=1}^2 y_k \vartheta_k,$$

ainsi que l'enthalpie spécifique de mélange

$$h = \varepsilon + p\vartheta = \sum_{k=1}^2 y_k h_k,$$

où $h_k = \varepsilon_k + p_k \vartheta_k$ est l'enthalpie spécifique de la phase k . De plus, nous noterons $z = z_1$ la fraction volumique de la phase 1 et $y = y_1$ la fraction massique du fluide 1. La quantité $(1-z)$, respectivement $(1-y)$, désignera quant à elle la fraction volumique, respectivement massique, de la phase 2.

Remarque 2

Pour un grand nombre de lois d'état comme les lois de Mie-Grüneisen, de van der Waals ou les lois tabulées, la pression de mélange p peut être déduite explicitement du système (2.4.3.1). De manière générale, si les lois d'état de chaque phase pure vérifient

$$\rho_k \left. \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial p_k} \right|_{\rho_k} > 0, \quad p_k \geq 0, \quad p_k(\rho_k, \rho_k \varepsilon_k) \text{ est une fonction } \mathcal{C}^1 \text{ telle que } p_k(\rho_k, 0) = 0,$$

alors le système (2.4.3.1) possède une unique solution [ACK02, KL10].

2.5 Généralités sur les systèmes hyperboliques

Les sections précédentes nous ont permis d'introduire la modélisation retenue pour l'écoulement diphasique. Celle-ci est basée sur le modèle à cinq équations réduit dans lequel est ajouté la dissipation visqueuse, la conduction thermique ainsi que la force de tension de surface sous deux formulations différentes, la forme CSF (2.3.1.1) laquelle s'exprime avec un produit non-conservatif et la forme CSS (2.3.2.1). Avant de détailler les propriétés mathématiques des deux formulations, nous allons présenter quelques rappels sur les systèmes de lois de conservation généraux, du premier ordre en espace et en temps, présentant un terme différentiel non-conservatif. Pour une présentation plus détaillée sur les lois de conservation, nous renvoyons à [Bou04, GR21].

Soit $d \in \mathbb{N}$ la dimension de l'espace physique et Ω un ouvert de \mathbb{R}^d . Soit m la taille du système, $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^m$ le vecteur des variables conservatives avec $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times \mathbb{R}^+$, et \mathbf{F} de taille $m \times d$ le tenseur de flux dont les colonnes sont des fonctions régulières $(\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_d)$ telles que $\forall i = 1, d, \mathbf{f}_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$. De tels systèmes sont donnés sous la forme

$$\partial_t \mathbf{U} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{P}(\mathbf{U}) \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{U}) = 0, \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^+, \quad (2.5.0.1)$$

où \mathbf{B} une matrice de taille $m \times d$, et \mathbf{P} , une matrice de taille $m \times m$, constituent le terme différentiel non-conservatif. On ne donnera pas ici de sens au produit non-conservatif. Une définition rigoureuse

a été faite dans [DMLM95]. De manière générale, de tels systèmes sont invariants par rotation. On se ramène alors au cadre unidimensionnel. L'étude théorique de tels systèmes se fait sous la forme non-conservative

$$\partial_t \mathbf{U} + \mathbf{A} \partial_x \mathbf{U} = 0, \quad (2.5.0.2)$$

où a été introduite la matrice $\mathbf{A} = \partial_U \mathbf{F} + \mathbf{P} \partial_U \mathbf{B}$.

Définition 1 (Système hyperbolique)

Le système (2.5.0.1) est dit hyperbolique si et seulement si \mathbf{A} est diagonalisable et ses valeurs propres $(\lambda_j(\mathbf{U}))_{j=1,m}$ sont réelles et ses vecteurs propres à droite $(\mathbf{r}_j)_{j=1,m}$ sont linéairement indépendants.

Le système est strictement hyperbolique si ses valeurs propres sont de plus toutes distinctes.

Si ses valeurs propres sont réelles mais ses vecteurs propres à droite ne sont pas linéairement indépendants, il est faiblement hyperbolique.

Les valeurs propres du système correspondent à la vitesse de propagation des ondes. Elles sont de deux types.

Définition 2 (Nature des champs)

On dit que le j -champ ou le vecteur propre \mathbf{r}_j associé à λ_j est

- Vraiment Non Linéaire si $\forall \mathbf{U}, \nabla_U \lambda_j \cdot \mathbf{r}_j \neq 0$,
- Linéairement Dégénéré si $\forall \mathbf{U}, \nabla_U \lambda_j \cdot \mathbf{r}_j = 0$.

Les invariants de Riemann sont les quantités constantes le long des courbes caractéristiques, c'est-à-dire, les courbes d'équation

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \lambda_j(\mathbf{U}(\mathbf{x}(t), t)),$$

où λ_j est une des valeurs propres du système. Ils sont définis comme suit.

Définition 3 (Invariants de Riemann)

Les invariants de Riemann associés aux vecteurs propres \mathbf{r}_j sont les quantités Φ telle que

$$\nabla_U \Phi \cdot \mathbf{r}_j = 0.$$

Les solutions de (2.5.0.2) muni d'une condition initiale $\mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x)$ peuvent présenter des discontinuités. On cherche alors des solutions au sens faible à ce problème de Cauchy. Le produit non-conservatif $\mathbf{P} \partial_x \mathbf{B}$ a été interprété au sens faible dans [DMLM95]. Cependant, son interprétation est hors du cadre de ces travaux et on présente seulement les définitions dans le cadre conservatif $\mathbf{P} \partial_x \mathbf{B} = 0$.

Définition 4 (Solution au sens faible)

Une solution \mathbf{U} vérifiant

$$\int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} (\mathbf{U} \partial_t + \mathbf{F}(\mathbf{U}) \partial_x) \phi \, dx dt = - \int_{\mathbb{R}} \mathbf{U}_0(x) \phi(x, 0) \, dx,$$

est dite solution au sens faible pour toute fonction ϕ à support compact dans $\mathcal{C}^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+)$.

On remarque qu'une solution classique est une solution au sens faible. De plus, si la solution est discontinue, on a la propriété suivante.

Proposition 1 (Relation de Rankine-Hugoniot)

Soit $\sigma \in C^1(\mathbb{R}^+)$ une fonction dans l'ouvert Ω de \mathbb{R}^d et $\Gamma = \{(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d, \mathbf{x} = \sigma(t)\}$ la courbe coupant les ouverts $\Omega^- = \{(t, \mathbf{x}) \in \Omega, \mathbf{x} < \Gamma(t)\}$ et $\Omega^+ = \{(t, \mathbf{x}) \in \Omega, \mathbf{x} > \Gamma(t)\}$. Soit $\mathbf{U} \in C^1(\Omega^-) \cup C^1(\Omega^+)$, alors \mathbf{U} est solution au sens faible sur Ω si et seulement si

$$-\sigma'(\mathbf{U}^+ - \mathbf{U}^-) + \mathbf{F}(\mathbf{U}^+) - \mathbf{F}(\mathbf{U}^-) = 0.$$

en notant $\mathbf{U}^\pm = \mathbf{u}(t, \sigma(t))$ les limites de \mathbf{u} de part et d'autre de la courbe Γ où \mathbf{u} est solution au sens classique sur $\Omega \setminus \Gamma$. Cette relation est appelée la relation de saut de Rankine-Hugoniot.

La solution d'un tel problème n'est pas unique. Pour discriminer, on sélectionne la solution entropique. Nous allons définir le couple entropie-flux ainsi que la notion de solution entropique.

Définition 5 (Couple entropie-flux)

Soit $\eta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction strictement convexe. Elle est une entropie du système (2.5.0.1) si il existe un flux d'entropie $\mathbf{q} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tel que

$$\left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}}\right)^t \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{U}}. \tag{2.5.0.3}$$

Définition 6 (Solution entropique)

Une solution faible vérifiant

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (\eta(\mathbf{U})\partial_t + \mathbf{q}(\mathbf{U})\partial_x) \phi \, dx dt \leq - \int_{-\infty}^\infty \eta(\mathbf{U}_0(x))\phi(x, 0) \, dx,$$

est appelée solution entropique pour toute fonction ϕ positive à support compact dans $C^1(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^+)$ et pour tout couple entropie-flux (η, \mathbf{q}) .

2.6 Propriétés mathématiques

2.6.1 Vitesse du son

La vitesse du son est étroitement liée à l'hyperbolicité des systèmes provenant de la mécanique des milieux continus. Nous allons ici chercher à déterminer l'équation d'évolution de la pression. Celle-ci nous permettra de définir une vitesse du son de mélange pour le système à cinq équations sans les effets de dissipation visqueuse et de conduction thermique.

La pression de mélange est supposée être une fonction des masses de chacune des phases, de l'énergie interne de mélange et de la fraction volumique. La différentielle de la pression donne

$$dp = \sum_{k=1}^2 \frac{\partial p}{\partial \rho_k z_k} \Big|_{\rho_{k'} z_{k'}, \rho \varepsilon, z} d(\rho_k z_k) + \frac{\partial p}{\partial \rho \varepsilon} \Big|_{\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, z} d(\rho \varepsilon) + \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, z} dz.$$

Dans [ACK02], les auteurs montrent que les dérivées partielles de la pression sont données par

$$\frac{\partial p}{\partial \rho_k z_k} \Big|_{\rho_{k'} z_{k'}, \rho \varepsilon, z} = -\frac{\delta_k}{\xi}, \quad \frac{\partial p}{\partial \rho \varepsilon} \Big|_{\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, z} = \frac{1}{\xi} \quad \text{et} \quad \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, z} = \frac{M}{\xi},$$

où $\xi = \sum_{k=1}^2 z_k \xi_k$, $\xi_k = \left. \frac{\rho_k \partial \varepsilon_k}{\partial p} \right|_{\rho_k}$, $\delta_k = \left. \frac{\rho_k \partial \varepsilon_k}{\partial \rho_k} \right|_p$ et $M = \rho_1(\delta_1 - \varepsilon_1) - \rho_2(\delta_2 - \varepsilon_2)$.

Maintenant, à partir de la dérivée particulaire de la fraction volumique, des deux masses, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale, nous allons déterminer l'équation d'évolution de la pression. On note pour toute grandeur f sa dérivée particulaire $\frac{Df}{Dt}$ telle que

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f. \quad (2.6.1.1)$$

Étant donnée que les deux formulations CSF et CSS sont équivalentes, nous allons mener les calculs avec la forme CSF par simplicité. Les termes de diffusion sont négligés. On a la dérivée particulaire de la fraction volumique

$$\frac{Dz}{Dt} = 0,$$

les dérivées particulières des masses

$$\frac{D\rho_k z_k}{Dt} = -\rho_k z_k \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad k = 1, 2,$$

la dérivée particulaire du moment

$$\frac{D\rho \mathbf{u}}{Dt} = -\rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla p + \sigma \kappa \nabla z,$$

et la dérivée particulaire de l'énergie totale

$$\frac{D\rho E}{Dt} = -\rho E \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot (p\mathbf{u}) + \sigma \kappa \nabla z \cdot \mathbf{u}.$$

En combinant les équations du moment et de l'énergie totale, on obtient la dérivée particulaire de l'énergie interne

$$\frac{D\rho \varepsilon}{Dt} = -\rho h \nabla \cdot \mathbf{u}.$$

On remarque que la tension de surface ne joue pas sur cette équation, ce qui est logique car cette force dérive d'un potentiel et donc des forces conservatives. L'enthalpie de mélange, définie précédemment, est toujours telle que $h = \sum_{k=1}^2 y_k h_k$ où $h_k = \varepsilon_k + \frac{p}{\rho_k}$. En utilisant l'expression de la différentielle de p , on en déduit

$$\frac{Dp}{Dt} = -\rho \frac{1}{\xi} \sum_{k=1}^2 y_k (h_k - \delta_k) \nabla \cdot \mathbf{u}.$$

D'après (2.4.1.7) (2.4.1.8), on a la relation avec c_k la vitesse du son de la phase k

$$\begin{aligned} h_k - \delta_k &= \xi_k (\chi_k + \kappa_k h_k), \\ &= \xi_k c_k^2, \end{aligned}$$

et en l'injectant dans la dérivée particulaire de la pression, on obtient

$$\frac{Dp}{Dt} = -\rho \frac{1}{\xi} \sum_{k=1}^2 y_k \xi_k c_k^2 \nabla \cdot \mathbf{u}.$$

Dans le cas monophasique, l'équation de la pression est donnée par

$$\frac{Dp}{Dt} + \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0.$$

Ainsi, l'analogie nous permet de donner la vitesse de son du mélange pour le système à cinq équations. La proposition suivante synthétise les résultats démontrés dans [ACK02, MG05].

Proposition 2

La vitesse du son de mélange du système à cinq équations avec tension de surface est donnée par

$$c^2 = \frac{1}{\xi} \sum_{k=1}^2 y_k \xi_k c_k^2,$$

avec ξ_k l'inverse du coefficient de Grüneisen de la phase k , c_k la vitesse du son de la phase k et $\xi = \sum_{k=1}^2 z_k \xi_k$ l'inverse du coefficient de Grüneisen de mélange.

La vitesse du son de mélange peut être donnée explicitement lorsqu'on connaît la loi d'état de chacun des fluides. Dans le cas de deux gaz raides, les coefficients de Grüneisen des phases pures sont

$$\xi_k = \frac{1}{\gamma_k - 1}.$$

On a ainsi

$$c^2 = \gamma(z) \frac{p + \pi(z)}{\rho}.$$

Cette forme est exactement la même que celle donnée pour une phase pure. On peut aussi faire la même remarque pour un gaz parfait, qui est un cas particulier d'un gaz raide, et pour la loi de type Mie-Grüneisen.

2.6.2 Hyperbolicité

Nous allons étudier l'hyperbolicité du système à cinq équations avec les deux modèles de tension de surface. On peut se référer aux travaux de Périgaud & al. [PS05], respectivement à Schmidmayer & al. [SPD⁺17] pour plus de détails sur l'hyperbolicité des formulations CSF, respectivement CSS. L'analyse de la formulation CSS a aussi été menée dans [Cor20].

Formulation CSF

On considère le système à cinq équations avec la tension de surface sous la forme CSF en variable primitive \mathbf{W} telles que

$$\mathbf{W} = (\rho, y, u, v, p, z)^t,$$

où u et v sont les deux composantes de la vitesse \mathbf{u} . Le système s'écrit alors dans un cadre unidimensionnel

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + u \partial_x \rho + \rho \partial_x u = 0, \\ \partial_t y + u \partial_x y = 0, \\ \partial_t u + u \partial_x u + \frac{1}{\rho} \partial_x p = -\frac{\sigma \kappa}{\rho} \partial_x z, \\ \partial_t v + u \partial_x v = 0, \\ \partial_t p + u \partial_x p + \rho c^2 \partial_x u = 0, \\ \partial_t z + u \partial_x z = 0. \end{array} \right. \quad (2.6.2.1)$$

Comme dans [PS05], l'analyse suivante est menée en considérant la courbure κ figée, c'est-à-dire, comme un paramètre géométrique indépendant qui ne dépend plus de la fraction volumique. Cette approximation du premier ordre des forces de tension de surface est nécessaire afin de pouvoir étudier le système à cinq équations en variables primitives. La matrice jacobienne du système précédent est la suivante

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & \frac{1}{\rho} & \frac{\sigma\kappa}{\rho} \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho c^2 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}. \quad (2.6.2.2)$$

On peut alors réécrire (2.6.2.1) sous la forme non-conservative

$$\partial_t \mathbf{W} + \mathbf{A} \partial_x(\mathbf{W}) = 0.$$

Soit λ un réel, l'étude du déterminant de la matrice $\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_d$ permet de trouver les valeurs propres de \mathbf{A} . Si le carré de la vitesse du son est positif, on a

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_d) = (u - \lambda)^4 (u - c - \lambda)(u + c - \lambda).$$

Ses valeurs propres sont données par $\lambda_{1-4} = u$, $\lambda_5 = u - c$ et $\lambda_6 = u + c$. On peut montrer que les vecteurs propres associés sont tous linéairement indépendants. Le système est ainsi hyperbolique (voir Def. 1). Les ondes associées à u sont linéairement dégénérées tandis que celles associées à $u \pm c$ sont vraiment non linéaires (voir Def. 2).

Formulation CSS

L'étude de l'hyperbolicité d'un modèle diphasique avec tension de surface sous la forme CSS a été menée dans [SPD⁺17, Cor20]. L'analyse rappelée ici est similaire.

Tout d'abord, nous réécrivons l'équation de la fraction volumique en notant $\mathbf{w} = \nabla z$ son gradient. On a

$$\partial_t \mathbf{w} + \nabla(\mathbf{w} \cdot \mathbf{u}) = 0.$$

Cette équation peut se réécrire, en utilisant les propriétés du gradient, comme

$$\partial_t \mathbf{w} + \nabla(\mathbf{w})\mathbf{u} + \nabla^t(\mathbf{u})\mathbf{w} = 0.$$

Maintenant, en considérant le vecteur des variables primitives \mathbf{W} tel que

$$\mathbf{W} = (\rho, y, u, v, p, z, w_1, w_2)^t,$$

où $w_1 = \partial_x z$ et $w_2 = \partial_y z$ sont les deux composantes du gradients de la fraction volumique, on a

formellement

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + u \partial_x \rho + \rho \partial_x u = 0, \\ \partial_t y + u \partial_x y = 0, \\ \partial_t u + u \partial_x u + \frac{1}{\rho} \partial_x p = -\frac{1}{\rho} (\partial_{w_1} \Omega_{11} \partial_x w_1 + \partial_{w_2} \Omega_{11} \partial_x w_2), \\ \partial_t v + u \partial_x v = -\frac{1}{\rho} (\partial_{w_1} \Omega_{12} \partial_x w_1 + \partial_{w_2} \Omega_{12} \partial_x w_2), \\ \partial_t p + u \partial_x p + \rho c^2 \partial_x u = 0, \\ \partial_t z + u \partial_x z = 0, \\ \partial_t w_1 + u \partial_x w_1 + w_1 \partial_x u + w_2 \partial_x v = 0, \\ \partial_t w_2 + u \partial_x w_2 = 0, \end{array} \right.$$

avec les notations

$$\Omega_{11} = -\sigma \frac{w_2^2}{\sqrt{w_1^2 + w_2^2}} \quad \text{et} \quad \Omega_{12} = \sigma \frac{w_1 w_2}{\sqrt{w_1^2 + w_2^2}}.$$

Nous pouvons remarquer que la tension de surface n'a aucune contribution sur l'équation d'évolution de la pression. Ainsi, on peut écrire le système précédent sous la forme

$$\partial_t \mathbf{W} + \mathbf{A} \partial_x \mathbf{W} = 0,$$

où

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} \partial_{w_1} \Omega_{11} & \frac{1}{\rho} \partial_{w_2} \Omega_{11} \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \partial_{w_1} \Omega_{12} & \frac{1}{\rho} \partial_{w_2} \Omega_{12} \\ 0 & 0 & \rho c^2 & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_1 & w_2 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}. \quad (2.6.2.3)$$

Maintenant, pour déterminer les valeurs propres de \mathbf{A} on étudie le déterminant de $\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_d$. On a

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_d) = (u - \lambda)^4 ((u - \lambda)^4 + \alpha(u - \lambda)^2 + \beta),$$

où

$$\alpha = -c^2 - \frac{1}{\rho} (w_1 \partial_{w_1} \Omega_{11} + w_2 \partial_{w_1} \Omega_{12}) = -c^2 - \frac{\sigma \|\mathbf{w}\|}{\rho} n_2^2,$$

et

$$\beta = \frac{c^2}{\rho} w_2 \partial_{w_1} \Omega_{12} = c^2 \frac{\sigma \|\mathbf{w}\|}{\rho} n_2^4$$

avec la notation $n_k = w_k / \|\mathbf{w}\|$. Il y a 4 valeurs propres triviales λ_{1-4} égales à u . Pour déterminer les 4 dernières, il faut étudier les solutions de l'équation quadratique

$$X^2 + \alpha X + \beta = 0,$$

où $X = (u - \lambda)^2$. Le discriminant Δ est donné par

$$\begin{aligned}\Delta &= \left(c^2 + \frac{\sigma\|\mathbf{w}\|}{\rho}n_2^2\right)^2 - 4c^2\frac{\sigma\|\mathbf{w}\|}{\rho}n_2^4, \\ &\geq \left(c^2 + \frac{\sigma\|\mathbf{w}\|}{\rho}n_2^2\right)^2 - 4c^2\frac{\sigma\|\mathbf{w}\|}{\rho}n_2^2, \quad (\text{car } n_2 \leq 1), \\ &= \left(c^2 - \frac{\sigma\|\mathbf{w}\|}{\rho}n_2^2\right)^2 \geq 0.\end{aligned}$$

Ce dernier étant positif, on en déduit que le polynôme précédent possède 4 racines réelles distinctes. Les dernières valeurs propres de la matrice \mathbf{A} sont données par

$$\lambda_{5,6} = u \pm c_s,$$

$$\lambda_{7,8} = u \pm c_c,$$

où

$$c_s^2 = \frac{c^2 + \varepsilon_\sigma n_2^2 + \sqrt{(c^2 + \varepsilon_\sigma n_2^2)^2 - 4c^2\varepsilon_\sigma n_2^4}}{2},$$

et

$$c_c^2 = \frac{c^2 + \varepsilon_\sigma n_2^2 - \sqrt{(c^2 + \varepsilon_\sigma n_2^2)^2 - 4c^2\varepsilon_\sigma n_2^4}}{2},$$

sont respectivement des ondes associées aux ondes acoustiques et aux ondes capillaires. On remarque l'apparition de l'énergie capillaire $\varepsilon_\sigma = \frac{\sigma\|\mathbf{w}\|}{\rho}$ dans la définition des ondes. Le système précédent est cependant faiblement hyperbolique (voir [Def. 1](#)). Les vecteurs propres associés aux valeurs propres $\lambda_{1-4} = u$ ne sont pas linéairement indépendants [[SPD⁺17](#)] (voir [Def. 2](#)).

D'un point de vue numérique, la résolution ne se fera pas sous cette forme, mais en considérant le tenseur capillaire séparément de la partie acoustique, comme pour les effets diffusifs, contrairement à la formulation CSF où le produit non-conservatif sera pris en compte dans la construction du solveur.

2.6.3 Entropies mathématiques associées

Nous allons maintenant chercher les entropies du système à cinq équations sous la forme $\eta = \rho s$. L'entropie spécifique s étant transportée le long des lignes de courants, on considère des flux d'entropie de la forme $q = \eta u$. La tension de surface n'ayant aucune influence sur l'entropie [[PS05](#)], l'analyse sera menée en la négligeant.

Soit \mathbf{W} le vecteur des variables primitives tel que $\mathbf{W} = (\rho, y, u, v, p, z)^t$ et \mathbf{A} la jacobienne du flux dans la direction considérée. Elle est donnée par (2.6.2.2) ou (2.6.2.3) avec $\sigma = 0$. Le couple entropie-flux doit alors vérifier la relation (voir [Def. 5](#))

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{W}}\right)^t \mathbf{A} = \left(\frac{\partial q}{\partial \mathbf{W}}\right)^t.$$

En développant la relation précédente, on obtient

$$\begin{aligned}\partial_u s &= \partial_v s = 0, \\ \rho \partial_\rho s + \rho c^2 \partial_p s &= 0.\end{aligned}\tag{2.6.3.1}$$

L'entropie est donc une fonction de quatre variables $s = s(\rho, y, p, z)$, solution de (2.6.3.1).

Dans [ACK02], les auteurs ont seulement réussi à déterminer les entropies du système dans le cas d'un mélange de deux gaz parfaits. Plus tard, Périgaud & al. [PS05] ont déterminé des entropies du système dans le cas de deux gaz raides. Elles sont de la forme

$$s = ys_1 + (1 - y)s_2,$$

où les entropies s_k sont données par

$$s_k(\rho_k, p, z_k) = \frac{p + \pi(z)}{\rho_k^{\gamma(z)}}, \quad k = 1, 2.$$

Cependant, ces entropies ne sont pas les entropies phisiques. Elles dépendent des paramètres de mélange γ et π . En effet, Murrone & al [MG05] ont montré que les entropies de chaque phase prises séparément ne sont pas des entropies pour le système à cinq équations utilisé ici, contrairement au système de type Kapila [KMB⁺01] où l'influence des différences de pression sur l'équation de la fraction volumique n'est pas négligé [MG05]. Ceci est un des défauts du modèle. Enfin, Latige [Lat13] a donné la forme générale des entropies du système à cinq équations pour la loi d'état de type Mie-Grüneisen de la forme (2.4.2.4)

$$p = \Gamma(\vartheta, z, y) \left(\frac{\varepsilon}{\vartheta} + p_\infty(\vartheta, z, y) \right),$$

où

$$p_\infty(\vartheta, z, y) = \frac{p_0}{\Gamma} + \frac{\Pi}{\Gamma} \left(\frac{\vartheta_0}{\vartheta} - 1 \right) - \frac{\varepsilon_0}{\vartheta}.$$

Elles sont les fonctions convexes de la forme

$$s(\vartheta, \varepsilon, y, z) = s_0 \left(e^{a(\vartheta)} \left[\varepsilon + \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} \Gamma(\tau, z, y) p_\infty(\tau, z, y) e^{a(\tau) - a(\vartheta)} d\tau \right], y, z \right)$$

où $a(\vartheta) = \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} \frac{\Gamma(\tau, z, y)}{\tau} d\tau$ dépend de (ϑ, z, y) .

2.6.4 Structure du problème de Riemann

Nous allons étudier la structure du problème de Riemann pour le modèle à cinq équations avec tension de surface sous la forme CSF. Cette étude est essentielle considérant que les schémas numériques utilisés dans la suite de ce manuscrit sont basés sur la résolution approchée de problème de Riemann. En effet, pour l'approche CSF, nous utiliserons des schémas de type Godunov basés sur des solveurs de Riemann dans lesquels le terme différentiel non-conservatif est directement inclus. Pour l'approche CSS, la discrétisation du tenseur capillaire est faite séparément de la partie hyperbolique. Cette résolution séparée est contenue dans la présentation suivante en prenant simplement une courbure nulle.

2.6.4.1 Invariants de Riemann

Les variables primitives sont toujours données par $\mathbf{W} = (\rho, y, u, v, p, z)^t$. Le système sous forme primitive est alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \frac{Dy}{Dt} = 0, \\ \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \vartheta \nabla p = \vartheta \sigma \kappa \nabla z, \\ \frac{Dp}{Dt} + \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \frac{Dz}{Dt} = 0, \end{array} \right.$$

où $\frac{D\bullet}{Dt}$ est toujours la notation de la dérivée particulière (2.6.1.1). Comme énoncé dans la Def. 3, les invariants de Riemann sont les quantités Φ telles que

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{W}} \cdot \mathbf{r}_j = 0,$$

où \mathbf{r}_j sont les vecteurs propres. En considérant toujours la courbure comme un élément géométrique indépendant de la fraction volumique, les invariants de Riemann associés à la valeur propre u sont

$$\Phi_u = \{u, p - \sigma \kappa z\},$$

tandis que ceux associés aux valeurs propres $u \pm c$ sont

$$\Phi_{u \pm c} = \left\{ z, u \mp \frac{2c}{\gamma(z) - 1}, s_1, s_2 \right\},$$

où ici s_k est l'entropie liée à la phase k telle que

$$s_k(\rho_k, p, z_k) = \frac{p + \pi(z)}{\rho_k^{\gamma(z)}}, \quad k = 1, 2,$$

et c_k correspond à la vitesse du son de mélange.

La définition des invariants de Riemann permet notamment de mettre en lumière les états préservés par l'onde linéairement dégénérée, appelée discontinuité de contact. Dans le système à cinq équations avec tension de surface, l'onde u est une discontinuité de contact. Ainsi, les états à vitesse constante et saut de pression proportionnel à la courbure doivent être préservés. Ce saut correspond exactement à la Loi de Laplace $\Delta p = \sigma \kappa \Delta z$ (2.3.0.1).

2.6.4.2 Problème de Riemann

Résoudre un problème de Riemann consiste à trouver $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ la solution du problème

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{B}(\mathbf{U}) = 0, \quad \mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_l & \text{si } x < 0, \\ \mathbf{U}_r & \text{si } 0 \leq x. \end{cases}$$

La solution d'un problème de Riemann a originellement été utilisée par Godunov [God59] pour construire un schéma numérique permettant de résoudre les équations de l'hydrodynamique. On

peut montrer que pour un système hyperbolique, le problème de Riemann possède une solution \mathbf{W}_r qui se présente sous la forme d'une succession d'états constants $\mathbf{U}_l = \mathbf{U}_0, \mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_m = \mathbf{U}_r$ séparées par les ondes λ_k , $k = 1, m$ émanant de l'origine.

Nous avons vu précédemment que le système à cinq équations sous la forme CSF est hyperbolique et possède 3 ondes distinctes, tandis que le système à cinq équations sous la forme CSS est faiblement hyperbolique et possède 5 ondes distinctes. Pour le premier, la solution exacte du problème de Riemann, détaillée dans [Pé03], est utilisée pour construire un schéma numérique résolvant le système à cinq équations une loi d'état de type gaz raides. A notre connaissance, personne n'a résolu le problème de Riemann du système à cinq équations avec tension de surface sous la forme CSS de manière exacte.

2.6.5 Domaine de convexité

L'étude du domaine de convexité est nécessaire afin de construire des schémas respectant certaines propriétés telles que la positivité de la solution, ou le caractère entropique. Par positif, on entend qui préservent les états admissibles, comme la positivité de la densité, de l'énergie interne ou du carré de la vitesse du son. En effet, les schémas développés dans la suite sont des schémas de type Godunov basés sur la notion de solveur de Riemann approché, où le schéma global est une combinaison convexe entre les états initiaux et les états intermédiaires du solveur. Si ceux-ci sont positifs, alors le schéma l'est. En particulier, nous cherchons les ensembles convexes contenus dans le domaine d'hyperbolicité du système.

Le domaine d'hyperbolicité du système à cinq équations est

$$\mathcal{D}^E = \{(\rho, \rho y, \rho \mathbf{u}, \rho E, z)^t \in \mathbb{R}^6 \mid \rho > 0, c^2 > 0\}.$$

Ainsi, ce domaine est déterminé par la positivité de la densité et du carré de la vitesse du son. Dans la suite, nous construirons des schémas numériques en se basant sur la forme lagrangienne des équations. Les variables lagrangiennes sont données par $\vartheta = \frac{1}{\rho}$, y , \mathbf{u} , E et z . Le domaine d'hyperbolicité du système à cinq équations en variables lagrangiennes est

$$\mathcal{D}^L = \{(\vartheta, y, \mathbf{u}, E, \vartheta z)^t \in \mathbb{R}^6 \mid \vartheta > 0, c^2 > 0\}.$$

On peut notamment montrer que la transformation Euler-Lagrange

$$\begin{aligned} \mathcal{L} : \mathcal{D}^E &\rightarrow \mathcal{D}^L \\ \mathbf{U} = (\rho, \rho y, \rho \mathbf{u}, \rho E, z)^t &\mapsto \mathbf{V} = (\vartheta, y, \mathbf{u}, E, \vartheta z)^t, \end{aligned}$$

conserve les ensembles convexes [Pel17].

Le domaine d'hyperbolicité n'est pas suffisant pour définir un ensemble d'état admissible ayant un caractère physique. Par exemple, on veut préserver la relation de saturation et imposer que la fraction volumique z et la fraction massique y soient comprises entre 0 et 1. De plus, l'énergie interne de référence q doit toujours être inférieure à l'énergie interne ε . On peut ainsi définir les domaines des solutions physiques admissibles écrits en variables lagrangiennes

$$\mathcal{A}^L = \{(\vartheta, y, \mathbf{u}, E, \vartheta z)^t \mid \vartheta > 0, y \in (0, 1), \varepsilon > q, z \in (0, 1), p + \pi(z) > 0\}.$$

et en variable eulériennes

$$\mathcal{A}^E = \{(\rho, \rho y, \rho \mathbf{u}, \rho E, z)^t \mid \rho > 0, y \in (0, 1), \varepsilon > q, z \in (0, 1), p + \pi(z) > 0\},$$

La positivité de la quantité $p + \pi(z)$ assure que le carré de la vitesse du son est positif, et permet donc de préserver l'hyperbolicité. Pour une loi d'état de type gaz raide, on a la proposition suivante.

Proposition 3 (Convexités des ensembles d'admissibilités [Pel17])

Si on considère un mélange de deux gaz raides vérifiant

$$(\gamma_2 - \gamma_1)(\pi_2 - \pi_1) \geq 0,$$

alors les ensembles

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^E &= \{(\rho, \rho y, \rho \mathbf{u}, \rho E, z)^t \mid \rho > 0, y \in (0, 1), \varepsilon > q, z \in (0, 1), p + \pi(z) > 0\}, \\ \mathcal{A}^L &= \{(\vartheta, y, \mathbf{u}, E, \vartheta z)^t \mid \vartheta > 0, y \in (0, 1), \varepsilon > q, z \in (0, 1), p + \pi(z) > 0\}, \end{aligned}$$

sont convexes.

Il est donc nécessaire d'utiliser des paramètres γ_k et π_k , $k = 1, 2$ qui soient ordonnés. Dans les écoulements de type liquide/gaz, on a en général $\pi_g = 0$ et $\gamma_l \geq \gamma_g$. La convexité est ainsi assurée.

2.7 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de décrire le modèle à interface diffuse utilisé dans la suite de ces travaux. Ce modèle n'est autre que le système à cinq équations [ACK02, MSNA02], dans lequel sont ajoutés les effets liés à la viscosité et la diffusion de la chaleur dans le fluide. Deux formulations différentes des forces de tension de surface ont été considérées. Après avoir présenté la fermeture isobare du modèle, ainsi que les différentes lois d'état qui seront utilisées pour représenter le comportement mécanique des liquides, nous avons présenté les propriétés mathématiques du modèle à cinq équations avec les deux formulations de tension de surface. Puis, le domaine des solutions admissibles a été rappelé. Ce dernier, convexe, nous permettra de construire des schémas numériques positifs.

Chapitre 3

Modélisation du problème de thermique

Sommaire

3.1	Rappel des équations	60
3.2	Condition de fusion	61
3.2.1	Bilan de masse	61
3.2.2	Bilan d'énergie	62
3.3	Algorithme de couplage	62
3.3.1	Analyse dimensionnelle	63
3.3.2	Algorithme de couplage fluide/solide	65
3.4	Conclusion	66

Les boucliers thermiques des objets soumis à des écoulements hypersoniques et hyperenthalpiques sont généralement constitués de matériaux composites. De ce fait, la modélisation du problème de thermique dans le solide revient à considérer un problème de thermique multimatériaux [Lat13]. Chacun de ces matériaux peut avoir des propriétés bien distinctes, comme la température de changement de phase, qui rend complexe le couplage avec un domaine fluide (voir Fig. 3.1).

De plus, l'étude de l'ablation d'un matériau composite soumis à un écoulement hypersonique gazeux nécessite la prise en compte des effets de pyrolyse. Dans ce chapitre, on se concentre seulement sur un domaine solide composé uniquement d'un matériau métallique qui, soumis à un flux de chaleur intense, va fondre. Il est alors nécessaire de déterminer des conditions aux limites pour chacun des domaines permettant de traiter de la fusion d'un matériau. En effet, le changement de phase du solide en liquide induit une injection de masse dans la zone fluide et un déplacement de la paroi. Dans le cas le plus général, l'écoulement gazeux potentiellement multiespèces est le lieu de réactions chimiques avec radiation et conduction thermique. Cependant dans le cas de la présente étude, le fluide est considéré comme monoespèce et le régime de température étudié nous permet de négliger la radiation thermique. Dans le solide, on peut donc se ramener à un simple problème de conduction thermique.

Les bilans de masse et d'énergie au niveau de l'interface entre le solide et le fluide permettent de calculer la vitesse de récession de la paroi ainsi que la vitesse d'injection du matériau fondu dans le domaine fluide.

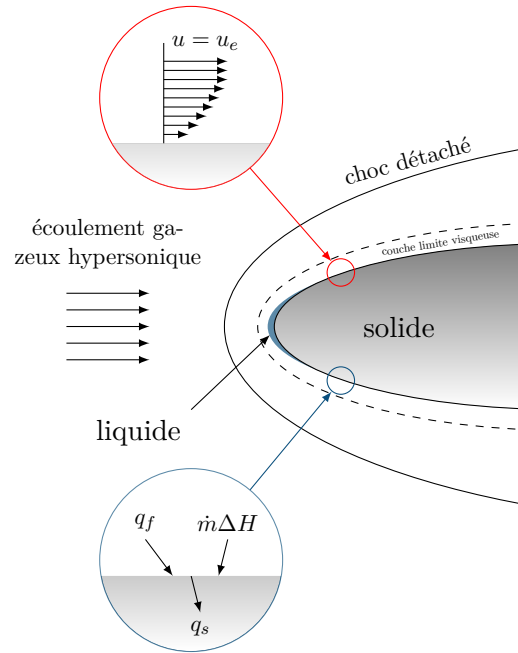


Fig. 3.1. Représentation schématique d'un objet entrant dans l'atmosphère.

Dans un premier temps, nous indiquerons les équations résolues dans le domaine solide, et rappellerons celles du fluide. Celles-ci nous permettront de déterminer des conditions de fusion pour traiter le problème de l'ablation liquide. Enfin, nous présenterons l'algorithme de couplage entre les deux domaines.

3.1 Rappel des équations

Afin d'exprimer la condition de fusion, on rappelle d'abord les équations à utiliser dans les domaines fluide et solide. Les quantités du domaine fluide seront indicées par \bullet_f tandis que celles du solides le seront par \bullet_s . Pour différencier les quantités du liquide de celles du gaz, on utilise également les indices \bullet_l et \bullet_g . Par soucis de simplicité, le domaine solide est considéré indéformable, nous n'avons pas pris en compte le phénomène de pyrolyse, et nous avons supposé que la densité ρ_s , la conductivité thermique λ_s ainsi que la capacité calorifique à volume constant $c_{v,s}$ ne dépendent pas de la température. De ce fait, le solide n'est gouverné que par l'équation de diffusion

$$\partial_t(\rho_s E_s) = \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s). \quad (3.1.0.1)$$

où E_s est l'énergie massique du solide et T_s sa température. Ces quantités sont liées par la relation $E_s = c_{v,s} T_s$.

Le domaine fluide est modélisé par le système à cinq équations réduit avec effets visqueux, diffusion thermique et tension de surface, ici sous la forme CSF (2.3.1.1)

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_g z_g) + \nabla \cdot (\rho_g z_g \mathbf{u}_f) & = 0, \\ \partial_t(\rho_l z_l) + \nabla \cdot (\rho_l z_l \mathbf{u}_f) & = 0, \\ \partial_t(\rho_f \mathbf{u}_f) + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f \otimes \mathbf{u}_f) + \nabla p_f & = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_f + \mathbf{F}_\sigma, \\ \partial_t(\rho_f E_f) + \nabla \cdot (\rho_f E_f \mathbf{u}_f + p_f \mathbf{u}_f) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_f \mathbf{u}_f) + \mathbf{F}_\sigma \cdot \mathbf{u}_f - \nabla \cdot \mathbf{q}_f, \\ \partial_t z_l + \mathbf{u} \cdot \nabla z_l & = 0, \end{cases}$$

avec des densité et énergie interne de mélange ρ_f et ε_f vérifiant

$$\rho_f = z_g \rho_g + z_l \rho_l \quad \text{et} \quad \varepsilon_f = y_g \varepsilon_g + y_l \varepsilon_l.$$

3.2 Condition de fusion

La condition de fusion est exprimée à l'aide des bilans de masse et d'énergie, en considérant le solide comme un fluide à vitesse nulle. On peut donc déterminer des relations de saut à l'interface fluide/solide. Celle-ci est caractérisée par la normale espace-temps (n_t, \mathbf{n}_X) où \mathbf{n}_X est supposé unitaire $\|\mathbf{n}_X\| = 1$.

3.2.1 Bilan de masse

Soit ρ la densité du fluide ou du solide. La conservation de la masse dans le milieu constitué du solide et du fluide est donnée par

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0.$$

En appliquant la relation de Rankine-Hugoniot dans le repère spatio-temporel normal à l'interface, on a

$$[\rho n_t] + [\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_X] = 0. \quad (3.2.1.1)$$

où $[\bullet] = \bullet_f - \bullet_s$. Le déplacement de l'interface fluide/solide est piloté par le vecteur vitesse $\mathbf{w}_I = w_I \mathbf{n}_X$ où $w_I = -n_t / \|\mathbf{n}_X\|$. En injectant la relation $n_t = -w_I \cdot \mathbf{n}_X$ dans (3.2.1.1), et en supposant également que l'injection de fluide se fait selon la normale à la paroi i.e. $\mathbf{u}_f = u_f \mathbf{n}_X$. on obtient

$$-(\rho_f - \rho_s) w_I + \rho_f u_f = 0.$$

En effet, la vitesse du solide est supposée nulle. Le flux de masse à travers l'interface est donné par

$$\dot{m} = \rho_f (u_f - w_I) = -\rho_s w_I.$$

Ces deux relations nous permettent de déduire la vitesse de récession de la paroi ainsi que la vitesse d'injection de liquide dans le domaine fluide à partir du flux de masse et des densités mises en œuvre

$$\begin{aligned} u_f &= \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_f}\right) w_I, \\ w_I &= -\frac{\dot{m}}{\rho_s}. \end{aligned} \quad (3.2.1.2)$$

On a alors deux configurations distinctes. La première concerne le cas où la température à l'interface est inférieure à la température de fusion. Dans ce cas, la vitesse de l'interface et la vitesse d'injection sont nulles et le domaine fluide est composé uniquement de gaz. Le ratio des densités ρ_s/ρ_f est très grand, de l'ordre de 10^3 dans le cas de l'aluminium. La seconde concerne l'instant où la température à la paroi atteint la température de fusion. Les vitesses w_I et u_f ne sont plus nulles, mais de signe opposé. Une fine couche de métal fondu recouvre la paroi, et le ratio ρ_s/ρ_f n'est plus que de 1.08.

3.2.2 Bilan d'énergie

Comme pour l'équation de la masse, l'équation d'énergie à l'interface entre le solide et le liquide peut s'écrire

$$\partial_t(\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) + \mathbf{F}_c \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q},$$

Nous avons ici considéré que la force de tension de surface est nulle au niveau de l'interface liquide-solide puisqu'elle n'intervient qu'au niveau de l'interface liquide-gaz. La relation de saut de Rankine-Hugoniot donne alors

$$[\rho E \mathbf{n}_t] + [(\rho E + p) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_X] = [\boldsymbol{\tau}^t \mathbf{n}_X \cdot \mathbf{u}] - [\mathbf{q}]. \quad (3.2.2.1)$$

Au niveau de l'interface, on peut négliger l'énergie cinétique devant l'énergie interne. De plus, dans le fluide, $\boldsymbol{\tau}^t \mathbf{n}_X$ désigne la contrainte visqueuse à la paroi qui est une contrainte tangentielle donc $\boldsymbol{\tau}^t \mathbf{n}_X \cdot \mathbf{u}_f = 0$ car \mathbf{u}_f est normal à l'interface. Dans le solide, $\mathbf{u}_s = 0$ donc $\boldsymbol{\tau}^t \mathbf{n}_X \cdot \mathbf{u}_s = 0$. La relation (3.2.2.1) donne alors

$$-(\rho_f \varepsilon_f - \rho_s \varepsilon_s) w_I + \rho_f \left(\varepsilon + \frac{p_f}{\rho_f} \right) u_I = -[\mathbf{q}],$$

en notant h l'enthalpie. En négligeant p_\bullet/ρ_\bullet devant ε_\bullet , cette relation devient

$$\dot{m}(h_f - h_s) = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right].$$

Le saut d'enthalpie $h_f - h_s$ n'est autre que la chaleur latente de fusion L . On retrouve alors la relation de Stefan

$$\dot{m}L = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right], \quad (3.2.2.2)$$

où $L = (h_f - h_s)$. Cette dernière relation permet de déterminer le flux de masse \dot{m} .

Maintenant que les relations nécessaires au couplage fluide/solide ont été déterminées, nous allons présenter l'algorithme de couplage.

3.3 Algorithme de couplage

Afin de définir un algorithme de couplage performant, il est nécessaire auparavant d'effectuer une analyse d'ordre de grandeur des temps caractéristiques. Pour cela, nous allons mener une analyse dimensionnelle des équations mises en jeu.

3.3.1 Analyse dimensionnelle

Domaine fluide

Nous introduisons les paramètres

$$\tilde{t}_f = \frac{t_f}{t_{f,0}}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{l_0}, \quad \tilde{\rho}_f = \frac{\rho_f}{\rho_{f,0}}, \quad \tilde{\mathbf{u}}_f = \frac{\mathbf{u}_f}{u_{f,0}}, \quad \tilde{p}_f = \frac{p_f}{\rho_{f,0}c_{f,0}^2}, \quad \tilde{\varepsilon}_f = \frac{\varepsilon_f}{c_{f,0}^2}, \quad \tilde{E}_f = \tilde{\varepsilon}_f + \frac{M^2}{2}\tilde{\mathbf{u}}_f^2 \text{ et } M = \frac{u_{f,0}}{c_{f,0}},$$

où $t_{f,0}$, l_0 , $\rho_{f,0}$, $u_{f,0}$, $c_{f,0}$ et M sont le temps, la longueur, la densité, la vitesse, la vitesse du son et le nombre de Mach caractéristiques de l'écoulement fluide. Les effets de tension de surface sont liés aux variables adimensionnées

$$\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{l_0}, \quad \tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{\sigma_0}, \quad \text{et } We = \frac{\rho_0 u_0^2 l_0}{\sigma_0}.$$

où κ , σ_0 et We sont l'échelle de longueur, le coefficient de tension de surface et le nombre de Weber caractéristiques. La fraction massique et volumique y et z sont sans dimension. Les effets dissipatifs sont liés aux variables adimensionnées

$$\tilde{\tau} = \frac{\tau}{\mu_{f,0}u_{f,0}}, \quad \tilde{T}_f = T_f \frac{c_{p,f,0}}{c_{f,0}^2}, \quad Re = \frac{\rho_{f,0}l_0u_{f,0}}{\mu_{f,0}} \text{ et } Pr = \frac{\mu_{f,0}c_{p,f,0}}{\lambda_{f,0}}$$

où $\mu_{f,0}$, $c_{p,f,0}$, $\lambda_{f,0}$, Re , Pr sont la viscosité, la capacité thermique à pression constante, la conductivité thermique, le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl de référence.

Le temps caractéristique de l'écoulement est

$$t_{f,0} = \frac{l_0}{u_{f,0}}.$$

Interface fluide/solide

A l'interface entre les domaines fluide et solide, le temps caractéristique est donné par

$$t_{I,0} = \frac{l_0}{w_{I,0}}, \tag{3.3.1.1}$$

où $w_{I,0}$ est la vitesse de référence liée au déplacement de la paroi.

Domaine solide

Le temps caractéristique de conduction de la chaleur dans le domaine solide est le suivant

$$t_{s,0} = \frac{l_0^2 \rho_{s,0} c_{p,s,0}}{\lambda_{s,0}},$$

où $\rho_{s,0}$, $c_{p,s,0}$ et $\lambda_{s,0}$ sont la densité, la capacité thermique et la conductivité de référence pour le solide.

Système d'équations adimensionné

Le temps caractéristique du système complet est considéré être le temps de référence de l'interface (3.3.1.1), qui est le temps caractéristique du système complet fluide+interface+solide. Il est utilisé pour adimensionner les équations fluide et solide. On a d'abord le système adimensionné

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{t_{f,0}}{t_{I,0}} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\rho}_f + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f) = 0, \\ \frac{t_{f,0}}{t_{I,0}} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\rho}_f y + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}_f y \tilde{\mathbf{u}}_f) = 0, \\ \frac{t_{f,0}}{t_{I,0}} \partial_{\tilde{t}} (\tilde{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f) + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho}_f \tilde{\mathbf{u}}_f \otimes \tilde{\mathbf{u}}_f) + \frac{1}{M^2} \tilde{\nabla} \tilde{p}_f = \frac{1}{Re} \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}_f + \frac{1}{We} \tilde{\sigma} \tilde{\kappa} \tilde{\nabla} \tilde{z}, \\ \frac{t_{f,0}}{t_{I,0}} \partial_{\tilde{t}} (\tilde{\rho}_f \tilde{E}_f) + \tilde{\nabla} \cdot ((\tilde{\rho}_f \tilde{E}_f + \tilde{p}_f) \tilde{\mathbf{u}}_f) = \frac{M^2}{Re} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\boldsymbol{\tau}}_f \tilde{\mathbf{u}}_f) + \frac{M^2}{We} \tilde{\sigma} \tilde{\kappa} \tilde{\nabla} \tilde{z} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_f + \frac{1}{Pe} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\lambda}_f \tilde{\nabla} \tilde{T}_f), \\ \frac{t_{f,0}}{t_{I,0}} \partial_{\tilde{t}} \tilde{z} + \tilde{\mathbf{u}}_f \cdot \tilde{\nabla} \tilde{z} = 0, \end{array} \right.$$

pour le domaine fluide où $Pe = RePr$ est le nombre de Péclet. La simulation de l'ablation liquide nécessite de se concentrer sur l'écoulement proche paroi, pour lequel la vitesse caractéristique de l'écoulement est bien inférieure à la vitesse amont. Dans des configurations de type cavité entraînées, c'est-à-dire lorsqu'on se place à l'échelle des aspérités de la paroi dues à l'ablation, la vitesse d'entraînement de la cavité peut être considérée comme la vitesse de référence de l'écoulement. Le ratio des temps caractéristiques

$$\frac{t_{f,0}}{t_{I,0}} = \frac{w_{I,0}}{u_{f,0}},$$

est alors proche de l'unité. Le calcul fluide doit donc être mené en instationnaire.

Pour le domaine solide, l'analyse dimensionnelle donne simplement

$$\frac{t_{s,0}}{t_{I,0}} \partial_{\tilde{t}} (\tilde{\rho}_s \tilde{E}_s) = \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\lambda}_s \tilde{\nabla} \tilde{T}_s).$$

Le ratio des temps caractéristiques entre le solide et l'interface est

$$\frac{t_{s,0}}{t_{I,0}} = \frac{l_0 \rho_{s,0} c_{p,s,0} w_{I,0}}{\lambda_{s,0}} = \frac{l_0 c_{p,s,0}}{L} [\partial_n T],$$

En estimant le gradient de température de l'ordre de

$$[\partial_n T] = \frac{T_\infty - T_{fusion}}{l_0},$$

avec l_0 la longueur caractéristique du gradient thermique dans le fluide, on a alors

$$\frac{t_{s,0}}{t_{I,0}} = c_{p,s,0} \frac{T_\infty - T_{fs}}{L}, \quad (3.3.1.2)$$

où T_{fs} est la température de fusion de l'aluminium. Ce rapport est lui aussi proche de l'unité. Pour s'en convaincre, prenons un objet en aluminium, capacité thermique $c_{p,s,0} = 1240 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$, et de chaleur latente de fusion $L = 3.94 \times 10^5 \text{ J.kg}^{-1}$. La température de fusion de l'aluminium se situe autour de $T_{fs} = 933 \text{ K}$. Ainsi, avec une température amont de $T_\infty = 2000 \text{ K}$, le rapport (3.3.1.2) est d'environ 3.3. Le domaine solide sera donc aussi traité en instationnaire.

Remarque 3

Si on se place à une échelle de longueur plus grande, liée par exemple aux dimensions du corps de rentrée complet, l'analyse précédente n'est plus valable. On a en général

$$t_{f,0} \ll t_{s,0} \ll t_{I,0},$$

et un couplage à chaque pas de temps du fluide n'est pas pertinent. Il faut passer à un couplage quasi-stationnaire pour le fluide, c'est-à-dire, au calcul d'une succession d'états stationnaires avec une remise à jour de la géométrie et du champ de température dans le solide à la fin de chaque itération en temps.

3.3.2 Algorithme de couplage fluide/solide

Maintenant, nous allons énoncer l'algorithme utilisé permettant de coupler les domaines fluides et solides.

Algorithme 1 Algorithme de couplage entre les domaines fluide et solide pour la fusion.

1. **Initialisation** : Les domaines fluides et solides sont initialisés en tout point. La position de l'interface est connue.
 2. **Bilan d'énergie** : Le bilan d'énergie permet de calculer le flux de masse \dot{m} (3.2.2.2) au temps t^n .
 3. **Bilan de masse** : Le bilan de masse donne alors la vitesse d'injection \mathbf{u}_f du liquide dans le domaine fluide ainsi que la vitesse de déplacement de l'interface fluide/solide \mathbf{w}_I .
 4. **Pas de temps** : Le pas de temps global est le minimum entre les contraintes de stabilité des domaines fluides et solides.
 5. **Mise à jour de la métrique** : Les métriques au temps $t^{n+\frac{1}{2}}$ et t^{n+1} sont calculées, à savoir l'aire des cellules, les longueurs des faces et les normales. Dans le domaine fluide, la métrique au temps t^n est sauvegardée. L'interface ainsi que le maillage sont déplacées au temps t^{n+1} .
 6. (a) **Calcul fluide** : Le domaine fluide est mis à jour avec la méthode de décomposition Lagrange-Transport présentée au Chapitre 5. **L'étape Lagrange** se fait sur le maillage fixe au temps n tandis que **l'étape de Transport** se fait sur le maillage au temps t^{n+1} . La GCL (*Loi de Conservation Géométrique*) est vérifiée lors de cette seconde étape. Une condition de Dirichlet permet d'imposer la température à l'interface. La vitesse du fluide à l'interface fluide/solide est donnée par la vitesse d'injection \mathbf{u}_f .
 - (b) **Calcul solide** : Le domaine solide est calculé en prenant en compte le déplacement du maillage, avec le schéma numérique (4.2.3.2) présenté dans le Chapitre 4. La même condition de Dirichlet permet d'imposer la température de fusion à l'interface. Le calcul du solide ne dépend pas de la résolution du fluide et peut être fait en parallèle.
 7. **Mis à jour de la solution** : On connaît la position du maillage et la solution dans les deux domaines au temps t^{n+1} . On connaît notamment les flux fluide et solide à l'interface. On reprend l'algorithme à l'étape **Bilan d'énergie** pour calculer la solution au temps t^{n+2} .
-

Remarque 4

Parfois, on ne résoudra pas l'équation de la chaleur dans le solide. On se contentera d'imposer au

domaine fluide une température et une densité à la paroi, afin de calculer les relations de saut. Pour traiter l'ablation liquide, la température imposée sera la température de fusion.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la modélisation du domaine fluide, ainsi que le traitement de la condition de couplage permettant d'étudier numériquement le processus d'ablation liquide. Les bilans de masse et d'énergie à la paroi nous ont permis de déterminer une vitesse de récession de la paroi ainsi qu'une vitesse d'injection de matière liquide dans le domaine fluide. Ensuite, l'étude des temps caractéristiques a permis de proposer un algorithme de couplage entre les domaines fluide et solide adapté à une configuration où les temps caractéristiques de l'écoulement du fluide, de la régression de l'interface et de la conduction dans le solide sont comparables.

Dans la partie suivante, nous allons présenter les méthodes numériques utilisées pour simuler le problème de l'ablation liquide.

Deuxième partie

Résolution numérique du problème de
l'ablation liquide

Chapitre 4

Résolution numérique du problème de thermique dans le solide et couplage

Sommaire

4.1	Prise en compte du déplacement de maillage	69
4.2	Résolution de la thermique	71
4.2.1	Transformation des coordonnées	72
4.2.2	Application à l'équation de diffusion	73
4.2.3	Discrétisation temporelle	75
4.3	Conclusion	77

Un objet pénétrant dans l'atmosphère d'une planète à très haute vitesse, comme des débris de lanceurs, un satellite, une capsule d'astronaute ou un météore, subit un échauffement très important dû à la friction avec les molécules des hautes couches de cette atmosphère, et à l'élévation de la température par compression au passage du choc. Le freinage de l'objet, souvent violent, entraîne également la conversion dans la couche limite d'une partie de l'énergie cinétique en énergie thermique. La composition chimique de la paroi de l'objet est la source de différentes réactions physico-chimiques. Une surface carbonée se sublimerait, tandis qu'une surface métallique va fondre. La conception de bouclier thermique robuste pour les capsules d'astronautes ou le design de satellites capable de se désintégrer entièrement dans l'atmosphère une fois leurs missions achevées nécessitent des méthodes permettant de calculer avec précision le flux thermique à l'interface fluide/solide, ainsi que l'influence du processus d'ablation sur ce dernier.

Ce chapitre présente la résolution numérique de la thermique dans le domaine solide. D'abord, nous présentons la prise en compte du déplacement du maillage entre les domaines fluide et solide par une approche ALE. Puis nous explicitons la dérivation d'un schéma de diffusion pour résoudre numériquement le problème de thermique du solide.

4.1 Prise en compte du déplacement de maillage

Dans ce travail, le maillage considéré est un maillage de type multibloc structuré. La partie fluide et la partie solide sont donc traitées dans différents blocs. Cela permet de suivre explicitement l'interface fluide/solide de façon lagrangienne.

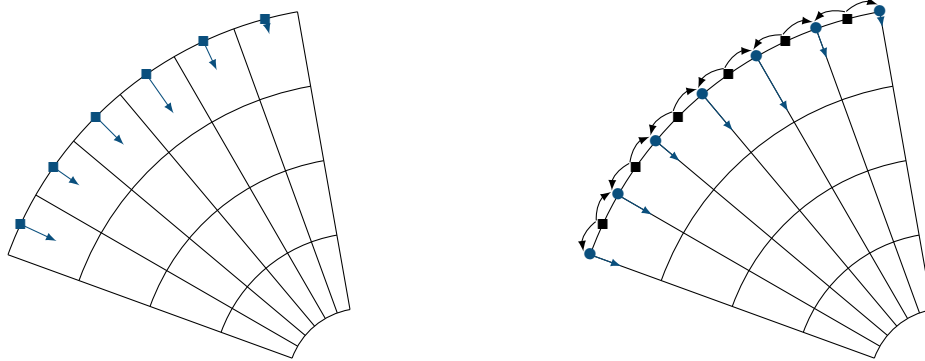
4.1. Prise en compte du déplacement de maillage

Les coordonnées des nœuds du maillage \mathbf{x}^{n+1} sont déterminées à l'aide de la vitesse de déplacement des nœuds, obtenue grâce à la condition de fusion et notamment au bilan de masse (3.2.1.2). En effet, on considère que le déplacement se fait le long des lignes de maillages. Par souci de généralité on appelle "face" aussi bien les arêtes en 2D que les faces en 3D. Ici, on se limite au cas bidimensionnel, donc une face s'agit en réalité d'une arête comme l'illustre la Fig. 4.1. Les bilans de masse et d'énergie effectués nous permettent d'obtenir la vitesse de récession de chaque face à l'interface entre les domaines fluide et solide comme

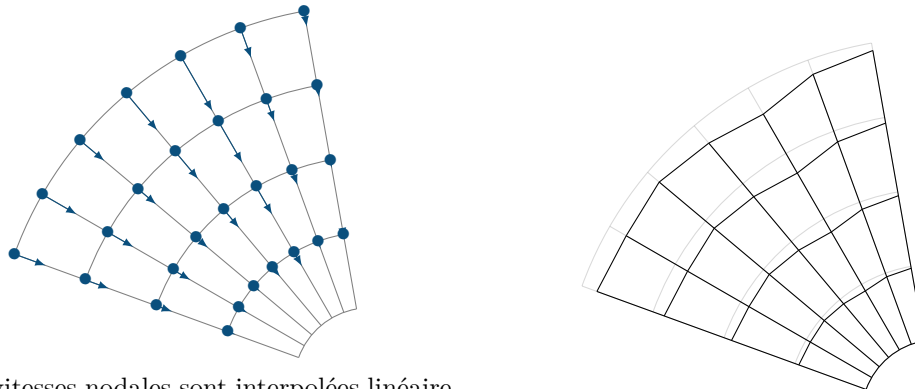
$$\mathbf{w} = -\frac{\dot{m}}{\rho_s} \mathbf{n}.$$

Connaissant cette vitesse de récession sur chaque face (voir Fig. 4.1.a), on en déduit la vitesse des nœuds à l'interface par une simple demi-somme (voir Fig. 4.1.b). Puis, par interpolation linéaire entre la paroi mobile et la face opposée du maillage supposée fixe, le champ de vitesse de tous les nœuds du maillage est déterminé (voir Fig. 4.1.c). La mise à jour du maillage (voir Fig. 4.1.d) se fait simplement par la relation

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \Delta t \mathbf{w}.$$



(a) Les vitesses au centre des faces sur l'interface (b) Les vitesses nodales à l'interface sont calculées à partir du bilan de masse.



(c) Les vitesses nodales sont interpolées linéairement entre la valeur à l'interface et la paroi fixe. (d) Le maillage est déplacé à sa nouvelle position

Fig. 4.1. Illustration de la méthode de déplacement du maillage.

Le déplacement du maillage nécessite de faire attention à la métrique utilisée. En effet, une bonne

façon de construire un schéma numérique capable de gérer la déformation du maillage est de vérifier que celui-ci préserve les champs constants. On appelle cela la Loi de Conservation Géométrique (*Geometric Conservation Law* ou GCL). Elle s'exprime de manière continue par

$$\partial_t (|\omega(t)|) - \nabla \cdot \mathbf{w} = 0, \quad (4.1.0.1)$$

où $|\omega(t)|$ désigne l'aire du volume de contrôle $\omega(t)$. Soit une cellule c d'aire $|\Omega_c|$, et $\mathcal{V}(c)$ l'ensemble des voisins par les faces de cette cellule. Soit $\mathbf{N}_{cd} = |\Gamma_{cd}| \mathbf{n}_{cd}$ avec \mathbf{n}_{cd} la normale sortante à la cellule et $|\Gamma_{cd}|$ sa longueur. La GCL (4.1.0.1) s'exprime de manière discrète par

$$|\Omega_c^{n+1}| = |\Omega_c^n| + \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \mathbf{w}_{cd} \cdot \mathbf{N}_{cd},$$

avec $\mathbf{w}_{cd} \cdot \mathbf{N}_{cd}$ à déterminer en fonction des maillages aux temps n et $n+1$. Dans [LF96], les auteurs montrent que l'utilisation de la règle du point milieu permet de respecter la GCL. La vitesse de déplacement du maillage \mathbf{w}_{cd} , correspondant à la vitesse de déplacement de la face commune à Ω_c et Ω_d , est alors calculée à l'aide de la formule

$$\mathbf{w}_{cd} = \frac{1}{2\Delta t} ((\mathbf{x}_{n^-}^{n+1} + \mathbf{x}_{n^+}^{n+1}) - (\mathbf{x}_{n^-}^n + \mathbf{x}_{n^+}^n)).$$

où \mathbf{x}_{n^-} et \mathbf{x}_{n^+} sont les coordonnées des deux nœuds constituant la face en question. La normale et la longueur de la face sur laquelle est calculée le flux sont calculées sur un maillage intermédiaire au temps $t^{n+\frac{1}{2}}$ tel que

$$\mathbf{x}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{x}^{n+1} + \mathbf{x}^n).$$

Enfin, la prise en compte du mouvement de maillage dans la résolution de la partie fluide et solide est explicite.

En réécrivant le GCL discrète sous la forme

$$|\Omega_c^{n+1}| = |\Omega_c^n| \left(1 + \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \mathbf{w}_{cd} \cdot \mathbf{N}_{cd} \right),$$

on se rend compte que le pas de temps doit être choisi de façon à assurer la positivité du terme entre parenthèses. La condition de stabilité sur le pas de temps est alors donnée par

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{1}{|\Omega_c^n|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| |w_{cd}| \right). \quad (4.1.0.2)$$

4.2 Résolution de la thermique

Dans les applications visées, le maillage utilisé est d'abord cartésien ou curviligne, et le processus d'ablation du matériau entraîne sa déformation. Ainsi, au cours du temps, le maillage sera légèrement déformé. Ces considérations nous autorisent à utiliser une discrétisation assez simple l'équation de diffusion (3.1.0.1). Par simple, on entend qu'on ne va pas chercher à préserver la positivité des quantités sur des maillages quelconques. La méthode employée est celle décrite dans [PGM21]. La discrétisation du gradient est basée sur une transformation entre le maillage physique curviligne et

un maillage de référence cartésien. Nous en rappelons les principes, en prenant soin de considérer le déplacement du maillage.

Plaçons nous alors dans le cadre d'une équation de diffusion du type

$$\partial_t U = \nabla \cdot (D \nabla U), \quad (4.2.0.1)$$

où U est notre inconnue et D correspond à un coefficient de diffusion dépendant de l'espace, telle une conduction thermique ou une viscosité. Une telle équation de diffusion met en jeux des dérivés secondes en espace.

4.2.1 Transformation des coordonnées

Le domaine solide est discrétisé par un maillage structuré mais pas nécessairement cartésien. Par exemple, dans le cadre d'un écoulement axisymétrique autour d'une bille, il sera curviligne. Nous considérons alors la transformation entre le maillage structuré curviligne (t, x, y) et un maillage structuré cartésien unitaire (T, X, Y) (voir Fig. 4.2). On considère en plus que le maillage évolue au

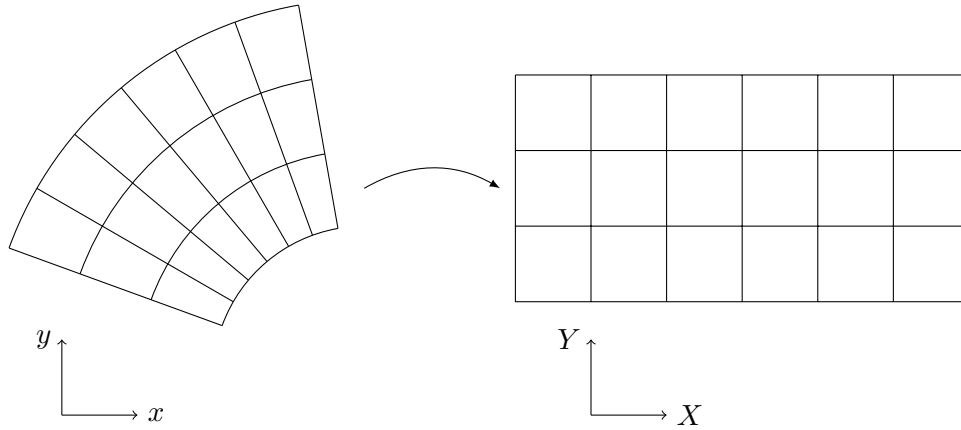


Fig. 4.2. Transformation entre le maillage structuré curviligne (à gauche) et le maillage structuré cartésien (à droite).

cours du temps. En notant \mathbf{A} la jacobienne de la transformation $(t, x, y) \mapsto (T, X, Y)$, et \mathbf{A}^{-1} celle de la transformation inverse $(T, X, Y) \mapsto (t, x, y)$, nous avons

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ X_t & X_x & X_y \\ Y_t & Y_x & Y_y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x_T & x_X & x_Y \\ y_T & y_X & y_Y \end{pmatrix}$$

en utilisant la notation $a_b = \partial_b a$. Cette transformation assure $T = t$. Soit $J = \left| \frac{dT dX dY}{dt dx dy} \right|$ le jacobien de la transformation. On en déduit facilement

$$\begin{aligned} x_T &= \frac{X_y Y_t - X_t Y_y}{J}, & x_X &= \frac{Y_y}{J}, & x_Y &= \frac{-X_y}{J}, \\ y_T &= \frac{X_t Y_x - Y_t X_x}{J}, & y_X &= \frac{-Y_x}{J}, & y_Y &= \frac{X_x}{J}. \end{aligned}$$

On peut alors déterminer les quantités

$$\begin{aligned}\frac{\nabla X}{J} &= (y_Y, -x_Y)^t = \frac{1}{\Delta Y} (\delta y, -\delta x), \\ \frac{\nabla Y}{J} &= (-y_X, x_X)^t = \frac{1}{\Delta X} (-\delta y, \delta x),\end{aligned}$$

où $\delta\bullet$ correspond à une variation de la quantité \bullet sur une ligne de maillage. En notant $\mathbf{N}^X = \mathbf{n}^X |\Gamma|^X = (\delta y, -\delta x)$ et $\mathbf{N}^Y = \mathbf{n}^Y |\Gamma|^Y = (-\delta y, \delta x)$, nous avons

$$\begin{aligned}\frac{\nabla X}{J} &= \frac{\mathbf{N}^X}{\Delta Y}, \\ \frac{\nabla Y}{J} &= \frac{\mathbf{N}^Y}{\Delta X}.\end{aligned}\tag{4.2.1.1}$$

Les vecteurs $\mathbf{n}^\bullet |\Gamma|^\bullet$ correspondent en fait à la normale multipliée par la longueur sur une ligne de maillage telle que $\bullet = cste$. À partir des relations précédentes, on peut en déduire la vitesse de déplacement du maillage $\mathbf{w} = (x_T, y_T)$ avec $\mathbf{X} = (X, Y)$ et $\mathbf{X}_t = (X_t, Y_t)$ telle que

$$\frac{\mathbf{X}_t}{J} = -\frac{\nabla X}{J} x_T - \frac{\nabla Y}{J} y_T = -\frac{\nabla \mathbf{X}}{J} \mathbf{w}.$$

Pour finir, les relations entre les dérivées en (t, x, y) et en (T, X, Y) sont données par l'opérateur $\partial_{(t,x,y)} = \mathbf{A}^t \partial_{(T,X,Y)}$ tel que

$$\begin{pmatrix} \partial_t \\ \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_t & Y_t \\ 0 & X_x & Y_x \\ 0 & X_y & Y_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_T \\ \partial_X \\ \partial_Y \end{pmatrix},\tag{4.2.1.2}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}\partial_t \psi &= \partial_T \psi + X_t \partial_X \psi + Y_t \partial_Y \psi \\ \partial_x \psi &= X_x \partial_X \psi + Y_x \partial_Y \psi, \\ \partial_y \psi &= X_y \partial_X \psi + Y_y \partial_Y \psi.\end{aligned}\tag{4.2.1.3}$$

Toutes ces relations entre le maillage structuré et le maillage cartésien de référence vont nous permettre de construire un schéma pour l'équation de diffusion.

4.2.2 Application à l'équation de diffusion

Notons par souci de simplification $D\nabla U = (-F(U), -G(U))$. Reprenons l'équation de diffusion (4.2.0.1), et intégrons la dans l'espace physique après l'avoir multipliée par une fonction test ψ

$$\int_{(t,x,y)} (\partial_t U + \partial_x F + \partial_y G) \psi \, dt dx dy = 0.$$

L'intégrale précédente devient après intégration par parties

$$\int_{(t,x,y)} (U \partial_t + F \partial_x + G \partial_y) \psi \, dt dx dy = 0.$$

Maintenant, on procède au changement de variable $(t, x, y) \mapsto (T, X, Y)$

$$\int_{(T,X,Y)} (U\partial_t + F\partial_x + G\partial_y) \psi \frac{1}{J} dT dX dY = 0.$$

l'opérateur (4.2.1.2) donne, après une deuxième intégration par parties

$$\int_{(T,X,Y)} \left(\partial_T \left(\frac{U}{J} \right) + \partial_X \left(U \frac{X_t}{J} + F \frac{X_x}{J} + G \frac{X_y}{J} \right) + \partial_Y \left(U \frac{Y_t}{J} + F \frac{Y_x}{J} + G \frac{Y_y}{J} \right) \right) \psi dT dX dY = 0.$$

Ainsi, dans le repère cartésien unitaire (T, X, Y) , l'équation précédente s'écrit

$$\partial_T \left(\frac{U}{J} \right) + \partial_X \left(U \frac{X_t}{J} + F \frac{X_x}{J} + G \frac{X_y}{J} \right) + \partial_Y \left(U \frac{Y_t}{J} + F \frac{Y_x}{J} + G \frac{Y_y}{J} \right) = 0.$$

L'équation (4.2.0.1) devient

$$\partial_T \left(\frac{U}{J} \right) = \partial_X \left(-U \frac{X_t}{J} + D \frac{X_x}{J} U_x + D \frac{X_y}{J} U_y \right) + \partial_Y \left(-U \frac{Y_t}{J} + D \frac{Y_x}{J} U_x + D \frac{Y_y}{J} U_y \right),$$

avec, d'après (4.2.1.3)

$$\begin{aligned} U_x &= X_x U_X + Y_x U_Y, \\ U_y &= X_y U_X + Y_y U_Y. \end{aligned} \tag{4.2.2.1}$$

Avec les définitions des gradients le long d'une ligne de maillage (4.2.1.1), on peut écrire l'équation précédente sous la forme plus compacte

$$\partial_T \left(\frac{U}{J} \right) = \partial_X \left(-U \frac{X_t}{J} + DJ \frac{\nabla_{x,y} X}{J} \cdot \frac{\nabla_{x,y} U}{J} \right) + \partial_Y \left(-U \frac{Y_t}{J} + DJ \frac{\nabla_{x,y} Y}{J} \cdot \frac{\nabla_{x,y} U}{J} \right).$$

soit

$$\partial_T \left(\frac{U}{J} \right) = -\nabla_{X,Y} \cdot \left(U \frac{\mathbf{X}_t}{J} \right) + \nabla_{X,Y} \cdot \left(DJ \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \nabla_{x,y} \left(\frac{U}{J} \right) \right). \tag{4.2.2.2}$$

Dans le cas d'un maillage mobile, on voit apparaître la formule de transport de Reynolds. En effet, en intégrant (4.2.2.2) sur un volume $\Omega_c(T)$ du maillage cartésien unitaire en (X, Y) , et en utilisant la vitesse de déplacement du maillage, on a

$$\partial_T \left(\frac{U_c}{J_c} \right) = \int_{\Omega_c(T)} \nabla_{X,Y} \cdot \left(U \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \mathbf{w} \right) + \nabla_{X,Y} \cdot \left(DJ \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \nabla_{x,y} \left(\frac{U}{J} \right) \right) dv,$$

ce qui, avec la formule de la divergence, donne

$$\partial_T \left(\frac{U_c}{J_c} \right) = \int_{\partial\Omega_c(T)} \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \left[U \mathbf{w} + DJ \nabla_{x,y} \left(\frac{U}{J} \right) \right] \cdot \mathbf{n}_{X,Y} ds.$$

L'équation précédente s'écrit enfin

$$\partial_T \left(\frac{U_c}{J_c} \right) = \int_{\partial\Omega_c(T)} \left[U \mathbf{w} + DJ \nabla_{x,y} \left(\frac{U}{J} \right) \right] \cdot \left(\nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right)^t \mathbf{n}_{X,Y} \right) ds. \tag{4.2.2.3}$$

Le maillage étant unitaire, l'aire et la longueur des faces du maillage cartésien n'apparaissent pas. Par définition, le jacobien J n'est autre que l'inverse de l'aire de la cellule considérée dans le repère curviligne. La quantité DJ correspond au coefficient de diffusion sur la face pondéré par une aire. Le terme

$$\left(\nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right)^t \mathbf{n}_{X,Y} \right),$$

quand à lui correspond à la longueur de la face portée par la normale unitaire sortante du domaine physique. Pour déterminer les grandeurs sur chaque face, on utilise le fait que la transformation est réalisée sur un maillage cartésien unitaire. Une cellule c peut s'indicer (i, j) . Ainsi, d'après (4.2.1.1) et les formules des différences finies

$$\begin{aligned} \left(\frac{\nabla X}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} &= \mathbf{N}_{i+\frac{1}{2},j}, \\ \left(\frac{\nabla Y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{4} \left(\mathbf{N}_{i,j+\frac{1}{2}} + \mathbf{N}_{i,j-\frac{1}{2}} + \mathbf{N}_{i+1,j+\frac{1}{2}} + \mathbf{N}_{i+1,j-\frac{1}{2}} \right), \\ \left(\frac{\nabla X}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{4} \left(\mathbf{N}_{i+\frac{1}{2},j} + \mathbf{N}_{i-\frac{1}{2},j} + \mathbf{N}_{i+\frac{1}{2},j+1} + \mathbf{N}_{i-\frac{1}{2},j+1} \right), \\ \left(\frac{\nabla Y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} &= \mathbf{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

où on rappelle que \mathbf{N} représente la normale à la face multipliée par la longueur. Pour le gradient de U_c/J_c , en utilisant les relations (4.2.2.1), on a

$$\begin{aligned} \left(\frac{U}{J} \right)_x &= \frac{X_x}{J} U_X + \frac{Y_x}{J} U_Y, \\ \left(\frac{U}{J} \right)_y &= \frac{X_y}{J} U_X + \frac{Y_y}{J} U_Y. \end{aligned}$$

Il reste à définir les quantités U_X et U_Y . On peut prendre simplement des formules de différences finies sur le maillage de cartésien de référence et on a

$$\begin{aligned} U_{X_{i+\frac{1}{2},j}} &= U_{i+1,j} - U_{i,j}, \\ U_{Y_{i+\frac{1}{2},j}} &= \frac{1}{4} (U_{i+1,j+1} - U_{i+1,j-1} + U_{i,j+1} - U_{i,j-1}), \\ U_{X_{i,j+\frac{1}{2}}} &= \frac{1}{4} (U_{i+1,j+1} - U_{i-1,j+1} + U_{i+1,j} - U_{i-1,j}), \\ U_{Y_{i,j+\frac{1}{2}}} &= U_{i,j+1} - U_{i,j}. \end{aligned}$$

Maintenant que toutes les grandeurs ont été définies, il nous reste à appliquer la discrétisation spatiale et temporelle de l'équation (4.2.2.3).

4.2.3 Discrétisation temporelle

Un schéma de diffusion explicite possède une contrainte de stabilité inversement proportionnelle au carré d'une longueur caractéristique. Elle est donnée par

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{1}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}|^2 \left(\frac{D}{|\Omega|} \right)_{cd} \right). \quad (4.2.3.1)$$

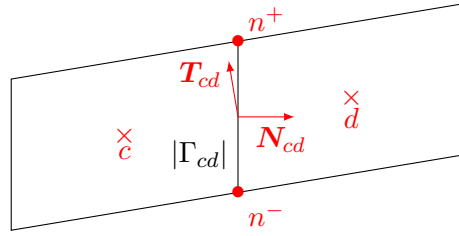


Fig. 4.3. Notations associée à la discrétisation de l'équation de la chaleur sur la face Γ_{cd} .

Dans le cas où un maillage très raffiné proche de la paroi est utilisé pour capturer un flux thermique, un schéma explicite est trop restrictif. C'est pourquoi on préfère utiliser un schéma implicite sur la partie de diffusion. On a alors le schéma volumes finis

$$|\Omega_c^{n+1}|U_c^{n+1} = |\Omega_c^n|U_c^n + \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \left[(U\mathbf{w})_{cd}^n + \left(\frac{D}{|\Omega|} \right)_{cd} \left(\mathbf{N}_{cd} (\Delta_n U)^{n+1} + \mathbf{T}_{cd} (\Delta_t U)^{n+1} \right) \right] \cdot \mathbf{N}_{cd}, \quad (4.2.3.2)$$

avec, sur la face $cd = (i + \frac{1}{2}, j)$ (voir Fig.4.3)

$$\begin{aligned} \Delta_n U &= U_d - U_c = U_{i+1,j} - U_{i,j}, \\ \Delta_t U &= U_{n+} - U_{n-}, \\ \mathbf{N}_{cd} &= \mathbf{n}_{cd} |\Gamma_{cd}|, \\ U_{n\pm} &= \frac{1}{4} (U_{i,j} + U_{i+1,j} + U_{i+1,j\pm 1} + U_{i,j\pm 1}), \\ \mathbf{T}_{cd} &= \frac{1}{4} \left(\mathbf{N}_{i,j+\frac{1}{2}} + \mathbf{N}_{i,j-\frac{1}{2}} + \mathbf{N}_{i+1,j+\frac{1}{2}} + \mathbf{N}_{i+1,j-\frac{1}{2}} \right). \end{aligned}$$

Pour calculer le terme de diffusion sur la face, la moyenne harmonique, qui permet de préserver les champs linéaires par morceaux, est utilisée [Cha04]. Cela donne

$$\left(\frac{D}{|\Omega|} \right)_{cd} = 2 \frac{D_c D_d}{D_c |\Omega_d| + D_d |\Omega_c|}.$$

De plus, nous avons vu que le déplacement du maillage oblige à calculer la métrique sur un pas de temps intermédiaire. Ainsi

$$\mathbf{N}_{cd} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{n}_{cd}^n |\Gamma_{cd}|^n + \mathbf{n}_{cd}^{n+1} |\Gamma_{cd}|^{n+1} \right).$$

La prise en compte du déplacement de maillage est explicite. Le flux $(U\mathbf{w})_{cd}^n$ est calculé avec le schéma décentré amont (dit *upwind*) d'ordre 1. La même contrainte sur le pas de temps que la GCL assure la stabilité du schéma (4.1.0.2). En pratique, cette contrainte est implicite, car la vitesse de déplacement du maillage dépend elle-même du pas de temps. Il serait donc nécessaire de vérifier, après chaque pas de temps, que cette condition n'est pas violée, et, si c'est le cas, de refaire le calcul avec un pas de temps plus petit.

Remarque 5

Ce schéma numérique est d'ordre 2 en espace pour tous maillages tels que pour chaque face, son

centre est aligné avec les centres des cellules voisines. De tels maillages sont appelés admissibles. C'est le cas des maillages cartésiens, mais pas des maillages curviligne. Sur un maillage cartésien, on retrouve le schéma à 5 points classique. En pratique, la précision est très peu dégradée sur des maillages légèrement déformés. Il est néanmoins possible d'utiliser des schémas plus sophistiqués, permettant entre autre d'être d'ordre 2 quelque soit le maillage [CVV99, DO05, MB12, BL14], ou de garantir la positivité [LP09].

4.3 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la méthodologie utilisée pour simuler la fusion d'un matériau solide en le couplant à un domaine fluide. Les relations de saut à l'interface, explicitées dans le chapitre précédent, permettent de déterminer les flux de masse, la vitesse d'injection de la matière en fusion dans le domaine fluide, ainsi que la vitesse de récession de la paroi solide. Une approche ALE des domaines fluides et solides permet de suivre avec précision l'évolution de l'interface entre les domaines. Le schéma de diffusion utilisé pour résoudre la thermique dans le solide prend en compte le déplacement du maillage et respecte la Loi de Conservation Géométrique.

Chapitre 5

Résolution numérique du système diphasique : approche générale

Sommaire

5.1	Décomposition Lagrange-Transport appliquée au modèle à cinq équations réduit	81
5.2	Discrétisation spatiale	82
5.2.1	Partie hyperbolique	83
5.2.2	Dissipation visqueuse et conduction thermique	84
5.2.3	Tension de surface	84
5.3	Résolution temporelle de l'étape Lagrange	85
5.3.1	Version explicite	86
5.3.2	Version implicite	86
5.4	Étape de Transport	88
5.5	Schéma global	90
5.6	Conclusion	91

Ce chapitre présente les outils généraux utilisés afin de résoudre l'écoulement diphasique, modélisé par le système diphasique présenté au [Chapitre 2](#). Ce modèle, largement utilisé dans la littérature, a été l'objet du développement de nombreuses méthodes numériques [[ACK02](#), [MSNA02](#), [Pé03](#), [SPA08](#), [BN09](#), [KL10](#), [Lat13](#), [LMSN14](#), [PGM17](#), [PGM21](#)]. On s'intéresse plus particulièrement à celles prenant en compte la tension de surface sous la forme CSS. La formulation CSF, quant à elle, est plus délicate à discrétiser à cause de la présence d'un terme différentiel non-conservatif.

Le modèle à 5 équations utilisé ici a été proposé indépendamment par Massoni et al. [[MSNA02](#)] et par Allaire et al. [[ACK02](#)]. Les premiers utilisent un schéma de type Godunov avec des flux de Rusanov tandis que les seconds adoptent un schéma de Roe. Plus tard, Périgaud et Saurel [[PS05](#)] enrichissent le modèle en ajoutant les effets capillaires et visqueux. Deux approches sont utilisées dans ce travail, la première utilisant une formulation conservative en étendant la formulation CSS de [[GLN⁺99](#)] au cadre compressible, et la seconde utilisant la formulation CSF de [[BKZ92](#)]. Dans ce chapitre, nous allons considérer les effets de la tension de surface sous la forme CSS. Cette forme a été utilisée dans le cadre d'écoulement compressible par [[Bla15](#)] dans un modèle à interface diffuse avec fermeture isobare, ou encore dans [[SPD⁺17](#)] appliqué à un modèle similaire à celui de Kapila [[KMB⁺01](#)]. La forme CSS étant conservative, sa discrétisation se fait naturellement dans le cadre

des méthodes volumes finis *Cell-Centered* que l'on considère dans ce travail. De plus, elle prend naturellement en compte les effets Marangoni, contrairement à la forme CSF qui, quant à elle, est plus délicate à traiter puisqu'elle fait intervenir un produit non-conservatif. Le [Chapitre 6](#) sera consacré à la construction d'un schéma adapté à prise en compte du produit non-conservatif dans le schéma numérique.

La construction d'un schéma numérique appliqué aux systèmes généraux de la dynamique des fluides est plus facile à réaliser sous sa forme lagrangienne que sa forme eulerienne. Bien qu'utilisable dans un cadre purement lagrangien [\[CHL20\]](#), on souhaite ici pouvoir gérer de grandes déformations de l'interface et l'apparition de liquide, ce qui est plus simple dans un formalisme eulérien. Pour revenir au cadre eulérien, plusieurs approches peuvent être suivies. Tout d'abord, l'approche Lagrange-Projection [\[Ben92, Des10a\]](#), utilisée par exemple dans [\[KL10\]](#). Après une étape purement lagrangienne, les variables sont projetées sur un maillage eulérien fixe. Une autre approche consiste à utiliser la transformation Lagrange-Euler de Gallice [\[Gal03\]](#), particulièrement adaptée à la dynamique des gaz. A partir du schéma sous sa forme lagrangienne, on peut directement se ramener au cadre eulérien via une relation discrète entre les états intermédiaires du solveur lagrangien et son équivalent eulérien. Latige a étendu cette approche au système à cinq équations [\[Lat13\]](#), mais son extension s'avère peu robuste avec un schéma temporel implicite pour des mélanges liquide/gaz. Une autre approche, utilisée ici, est appelée méthode de décomposition Lagrange-Transport [\[CGK16, CGK17\]](#). L'approche de Chalons & *al.* consiste à utiliser une décomposition d'opérateurs qui permet de résoudre successivement deux sous-systèmes en deux étapes distinctes. La première, appelée **étape Lagrange**, consiste à résoudre le premier sous-système en variable lagrangienne. La seconde, appelée **étape de Transport**, correspond simplement au transport des quantités conservatives à la vitesse matérielle. Initialement utilisée pour les équations d'Euler [\[CGK16\]](#), les écoulements diphasiques à quatre équations [\[CGK17\]](#) et les équations de Saint-Venant avec fond [\[CKKS16\]](#), Peluchon & *al.* [\[PGM17\]](#) ont étendu cette méthode au système à cinq équations puis en y ont ajouté les effets liés à la dissipation visqueuse et la dissipation thermique [\[PGM21\]](#). Plus récemment, cette approche a été appliquée au modèle de Baer & Nunziato barotrope [\[AAKM+23\]](#). L'intérêt de cette méthode réside dans la possibilité de résoudre **l'étape Lagrange** par un schéma implicite. En effet, les applications visées font intervenir des rapports de densité, de pression, de vitesse du son ou de viscosité très importants, ce qui peut être extrêmement contraignant au niveau du pas de temps. Une approche semi-implicite permet au schéma global de n'être contraint que par la vitesse matérielle puisque toute la physique est résolue dans **l'étape Lagrange** implicite. Cette approche s'avère très robuste, notamment pour résoudre des écoulements de type couche limite visqueuse et thermique avec un maillage raffiné en proche paroi, avec un pas de temps basé sur la vitesse matérielle. Ici, nous allons ajouter les effets de tension de surface sous la forme CSS et CSF dans **l'étape Lagrange**, afin de comparer les deux approches.

Dans l'approche de décomposition Lagrange-Transport, Zou et *al.* ne prennent pas en compte dans la première étape les termes de diffusion [\[ZAGT20, ZGK+21\]](#). Ils rajoutent une troisième étape pour les intégrer. Cette stratégie n'est viable que dans le cas où l'on souhaite utiliser un schéma temporel explicite sur l'étape Lagrange. Dans notre cas, le fait d'utiliser une discrétisation implicite de **l'étape Lagrange** dans laquelle est contenue toute la physique permet d'avoir un pas de temps soumis seulement à la contrainte liée à l'étape de transport, et non aux effets dissipatif, contraints par les maillages de type couche limite. Plus récemment, une approche de décomposition Lagrange-Transport à une seule étape a été mise au point pour les équations d'Euler avec gravité [\[BTKP23\]](#). Bien que présentée dans un cadre explicite, son extension avec une résolution implicite des ondes acoustiques semble possible.

L'approche de décomposition Lagrange-Transport sera présentée dans le cas général d'un système hyperbolique avec un produit non-conservatif et un terme dissipatif. Dans **l'étape Lagrange**, de nombreuses discrétisations peuvent être employées pour résoudre l'acoustique. Parmi les méthodes volumes finis *Cell-Centered*, nous distinguons deux catégories. La première consiste à utiliser un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann exact ou approché [Roe81, HLvL83, TSS94, Gal00]. Dans ce travail, nous utiliserons le paradigme des solveurs de Riemann simples de Gallice [Gal02a, Gal03, GCLM22]. Un tel solveur a notamment été utilisé pour résoudre **l'étape Lagrange** du système à cinq équations dans les travaux de Peluchon & al. [PGM17, PGM21]. La deuxième catégorie est composée des solveurs utilisés dans le cadre de l'hydrodynamique lagrangienne [DM05, MABO07, CM18]. Récemment, le lien entre ces deux types de solveur a été fait [GCLM22]. Celui-ci sera traité dans le chapitre suivant. Pour **l'étape de Transport**, un simple schéma décentré amont (d'ordre un dans un premier temps) est employé. Ce schéma, bien que très robuste, possède l'inconvénient d'être diffusif et induire un étalement numérique de l'interface entre les deux fluides. Plusieurs stratégies existent dans le but de limiter cette diffusion. Ce point sera traité dans le [Chapitre 7](#).

Après une présentation dans un cadre général de la méthode de décomposition Lagrange-Transport, nous l'appliquerons au modèle à cinq équations avec effets visqueux, dissipation thermique et tension de surface sous la forme CSS. La discrétisation spatiale de chaque terme sera donnée. Certains détails manquant, comme les conditions de positivité, seront explicitement traité dans le chapitre [Chapitre 6](#). **L'étape Lagrange** pouvant être résolue par un schéma explicite ou implicite, les deux approches seront détaillées.

5.1 Décomposition Lagrange-Transport appliquée au modèle à cinq équations réduit

L'approche consiste à utiliser une décomposition d'opérateurs qui permet de résoudre successivement deux sous-systèmes, un premier sous sa forme lagrangienne, et un second correspondant au transport des quantités conservatives. L'intérêt de cette approche est de séparer les ondes acoustiques et les ondes de transport à la vitesse matérielle, afin d'utiliser des schémas temporels adaptés. En effet, une intégration temporel implicite de **l'étape Lagrange** et explicite de **l'étape de Transport** permet d'avoir un schéma globalement stable uniquement sous une condition sur la vitesse matérielle.

Nous allons détailler la résolution du système complet, introduit au [Chapitre 2](#). Le système à cinq équations avec tension de surface, effets visqueux et dissipation thermique s'écrit dans sa forme eulérienne

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t (\rho y) + \nabla \cdot (\rho y \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q}, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z & = 0, \end{cases} \quad (5.1.0.1)$$

où les effets visqueux sont pris en compte via $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u} + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}),$$

5.2. Discrétisation spatiale

et $\mu = \sum_{k=1}^2 z_k \mu_k$ est la viscosité du mélange. L'hypothèse de Stokes est ainsi considérée vraie. La diffusion thermique est modélisée par le flux de chaleur \mathbf{q} qui suit la loi de Fourier

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T,$$

où $\lambda = \sum_{k=1}^2 z_k \lambda_{T,k}$ et T est la température de mélange. Les effets de tension de surface sont donnés par $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes capillaires avec

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma \left(|\nabla z| \mathbf{I}_d - \frac{\nabla z \otimes \nabla z}{|\nabla z|} \right),$$

où σ est le coefficient de tension de surface. Cette formulation introduit une énergie capillaire massique $\varepsilon_\sigma = \vartheta \sigma |\nabla z|$ dans l'énergie totale massique $E = \varepsilon + \varepsilon_\sigma + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$. La décomposition Lagrange-Transport nous mène à considérer le premier sous-système

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t (\rho y) + \rho y \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla p & = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \partial_t (\rho E) + \rho E \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q}, \\ \partial_t z & = 0, \end{cases}$$

ou sous sa forme lagrangienne

$$\begin{cases} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t y & = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p & = \vartheta \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \vartheta \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) + \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}) - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{q}, \\ \partial_t z & = 0. \end{cases} \quad (5.1.0.2)$$

La forme compacte de ce sous-système est donnée par

$$\partial_t \mathbf{V} + \vartheta \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \vartheta \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{V}, \nabla \mathbf{V}),$$

avec $\mathbf{V} = (\vartheta, y, \mathbf{u}, E, z)^t$, $\mathbf{G}(\mathbf{V}) = (-\mathbf{u}, 0, p, \rho \mathbf{u}, 0)^t$ et $\mathbf{D}(\mathbf{V}, \nabla \mathbf{V}) = (0, 0, \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau} \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} - \mathbf{q}, 0)^t$. Le second sous-système de Transport sous sa forme compacte est donné par

$$\partial_t \mathbf{U} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{U}) - \mathbf{U} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5.1.0.3)$$

où $\mathbf{U} = (\rho, \rho y, \rho \mathbf{u}, \rho E, z)^t$ correspond au vecteur des variables conservatives du système (5.1.0.1).

5.2 Discrétisation spatiale

Maintenant, nous allons détailler la discrétisation spatiale de la partie hyperbolique, ainsi que des termes de tension de surface et de diffusion visqueuse et thermique.

5.2.1 Partie hyperbolique

La discrétisation de la partie hyperbolique de l'**étape Lagrange** est succinctement détaillée car déjà fait dans la littérature [CGK16, CGK17, PGM17, PGM21]. Dans le chapitre suivant, une analyse plus approfondie du schéma sera donnée, car la prise en compte du terme non-conservatif de la modélisation CSF des forces de tension de surface est non trivial. Le système à résoudre est donné par

$$\begin{cases} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t y & = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p & = \mathbf{0}, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p\mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t z & = 0, \end{cases}$$

Pour discrétiser ce système, nous avons deux choix. Premièrement, on peut utiliser le schéma acoustique largement détaillé dans [CGK16, PGM17]. Ce schéma numérique est un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann simple à quatre états. En notant \bullet^\dagger les quantités calculées lors de l'**étape Lagrange**, on a formellement

$$\mathbf{V}_c^\dagger = \mathbf{V}_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \bar{\mathbf{G}}_{cd} \quad (5.2.1.1)$$

avec

$$\bar{\mathbf{G}}_{cd} = (-\bar{u}, 0, \bar{p}\mathbf{n}, \bar{p}\bar{u}, 0)_{cd}^t,$$

où les flux de vitesse et de pression \bar{u} et \bar{p} s'écrivent

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{\lambda^+ u_c + \lambda^- u_d}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\Delta p}{\lambda^+ + \lambda^-}, \\ \bar{p} &= \frac{\lambda^- p_c + \lambda^+ p_d}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\lambda^+ \lambda^- \Delta u}{\lambda^+ + \lambda^-}. \end{aligned} \quad (5.2.1.2)$$

en notant $\Delta \bullet = \bullet_d - \bullet_c$. Les coefficients λ^+ et λ^- sont les pentes du solveur de Riemann associé au flux numérique. Elles doivent être assez grandes pour assurer la positivité du schéma. Pour les calculer, nous utilisons la stratégie donnée dans [PGM17]. Le chapitre suivant détaille des conditions explicites sur ces pentes permettant d'assurer la positivité du schéma. Ce schéma est stable sous la condition sur le pas de temps

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{\vartheta_c}{|\Omega_c|} \max_{d \in \mathcal{V}(c)} (|\Gamma_{cd}| \lambda_c^-) \right). \quad (5.2.1.3)$$

Dans la littérature, il est connu que les schémas de type Godunov ne convergent pas asymptotiquement vers la limite incompressible des équations. Ce problème est généralement résolu en appliquant une correction bas-Mach, qui consiste à centrer le flux de pression en fonction du Mach local. Dans notre cas, on applique la même procédure que Chalons & al. [CGK16], basé sur la correction proposée par Dellacherie [DJOR16]. Les détails du problème bas-Mach sont traités dans le chapitre suivant.

Deuxièmement, on peut choisir d'utiliser un schéma lagrangien du type [DM05, MABO07, CM18]. Ces schémas ont été développés dans le cadre de l'hydrodynamique lagrangienne. Contrairement au schéma (5.2.1.1), où les flux sont basés sur un stencil aux faces, les schémas lagrangiens sont vraiment multidimensionnels dans le sens où le flux numérique est basé sur les voisins aux nœuds et pas seulement les voisins aux faces. La construction de tels schémas sera explorée dans le chapitre suivant, et donc pas détaillée ici. De la même manière que le schéma présenté précédemment, il est nécessaire d'utiliser une correction bas-Mach. On peut employer la correction proposée par Labourasse [Lab19].

5.2.2 Dissipation visqueuse et conduction thermique

L'étude du système à cinq équations avec effets dissipatifs a été réalisée dans [PGM21]. La même discrétisation est employée ici. Les gradients de vitesse et de température sont discrétisés par le schéma présenté au Chapitre 4. Pour la vitesse aux faces nécessaire sur l'équation d'énergie, dans les termes visqueux et capillaires, la moyenne arithmétique est suffisante pour préserver les champs linéaires [ND22]. Ainsi, considérons la face cd et τ_{cd} la discrétisation du tenseur des contraintes visqueuse sur cette face. Alors nous utilisons la discrétisation

$$(\tau \mathbf{u})_{cd} = \tau_{cd} \frac{\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_d}{2}.$$

Les contraintes de stabilité liées à la dissipation visqueuse et la conduction thermique, données par l'équation (4.2.3.1), sont les suivantes

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{1}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}|^2 \left(\frac{\mu}{|\Omega|} \right)_{cd} \right), \quad \frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{1}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}|^2 \left(\frac{\lambda}{|\Omega|} \right)_{cd} \right). \quad (5.2.2.1)$$

Ces conditions de stabilité sont très contraignantes. En effet, elles sont proportionnelles au carré de l'inverse d'une longueur caractéristique, ce qui, dans le cas d'un écoulement proche paroi pour lequel la couche limite doit être résolue avec un maillage très fin, avec l'utilisation d'une discrétisation temporelle explicite, affecte grandement le temps de simulation. Cette considération suggère d'utiliser un schéma implicite.

5.2.3 Tension de surface

Nous allons maintenant discuter de l'ajout des effets de tension de surface. Ces effets sont intrinsèquement liés à la courbure de l'interface, qui est un phénomène multidimensionnel. Par conséquent, le tenseur des contraintes capillaires ne peut pas être discrétisé par un schéma unidimensionnel. Ainsi, on ne peut pas utiliser le schéma de diffusion détaillé au Chapitre 4 sur un maillage cartésien. Le tenseur discrétisé sur la face $|\Gamma_{cd}|$ est donné par

$$\sigma_{cd}^n = \sigma \left(|\nabla z|_{cd}^n \mathbf{n}_{cd} - \frac{\nabla z_{cd}^n \cdot \mathbf{n}_{cd}}{|\nabla z|_{cd}^n} \nabla z_{cd}^n \right).$$

Pour calculer le gradient de la fraction volumique sur la face $|\Gamma_{cd}|$ Périgaud [PS05] utilise la méthode de Green-Gauss basée sur un maillage dual. Schmidmayer [SPD⁺17] utilise une méthode de différence finie d'ordre 2. Ici, afin de garder un stencil compact, et utiliser une méthode compatible avec des maillages non structurés ou structurés mais pas cartésien, le gradient aux nœuds est d'abord

calculé par une méthode des Moindres Carrés linéaire (voir [Annexe A.2](#)), en utilisant les cellules qui ont ce nœud comme sommet. Le gradient à la face est alors la demi-somme des gradients à ses sommets. Ainsi, en notant $\nabla z_{n\pm}$ les gradients aux nœuds d'une face cd , on a

$$\nabla z_{cd} = \frac{1}{2} (\nabla z_{n^+} + \nabla z_{n^-}).$$

De cette manière, l'aspect multidimensionnel de la force de tension superficielle est pris en compte, puisque tous les voisins des nœuds constituant la face sont utilisés, et cela quel que soit le type de maillage.

Nous avons montré dans le [Chapitre 2](#) que le modèle à cinq équations réduit avec tension de surface sous la forme CSS est faiblement hyperbolique et possède 5 ondes distinctes, une liée à la discontinuité de contact, une première paire liée aux ondes acoustiques et une seconde paire liée aux ondes capillaires. Il existe alors une contrainte de stabilité liée aux effets capillaires. On peut la déterminer en imposant à une onde capillaire de vitesse c de ne pas parcourir plus d'une maille par pas de temps. Cela revient à imposer au pas de temps la condition

$$c\Delta t \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\Omega_c|} \leq \frac{1}{2}.$$

La vitesse d'une onde capillaire est reliée à sa fréquence angulaire ω et son nombre d'onde $k = 2\pi/\lambda$ avec λ la longueur d'onde, telle que $c = \omega/k$. La fréquence est donnée par

$$\omega^2 = \frac{\sigma}{\rho_1 + \rho_2} k^3,$$

où ρ_1 et ρ_2 sont les densités des deux fluides. Si la plus petite longueur d'onde résoluble est liée au maillage par $\lambda = 2|\Omega_c|/|\Gamma_{cd}|$, alors on obtient la condition CFL

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \sqrt{2\pi\sigma\vartheta_c \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \left(\frac{|\Gamma_{cd}|}{|\Omega_c|} \right)^3}. \quad (5.2.3.1)$$

On retrouve ainsi la condition introduite dans [\[BKZ92\]](#).

5.3 Résolution temporelle de l'étape Lagrange

La résolution de l'étape **Lagrange** du système [\(5.1.0.2\)](#) a été brièvement détaillée dans les sections précédentes. Le schéma global peut s'écrire sous la forme

$$\mathbf{V}_c^\dagger = \mathbf{V}_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \left(\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \overline{\mathbf{G}}_{cd}^\# - \nabla_c \cdot \mathbf{D}^\# \right). \quad (5.3.0.1)$$

La discrétisation de la partie hyperbolique du système Lagrange avec le schéma unidimensionnel utilise le flux

$$\overline{\mathbf{G}}_{cd}^\# = (\overline{u}, 0, \overline{p}\mathbf{n}, \overline{p}u, 0)_{cd}^\#.$$

L'expression des flux est donnée explicitement par [\(5.2.1.2\)](#).

La fraction volumique z étant constante lors de l'**étape Lagrange**, les termes de tension de surface sont pris au temps n . Ainsi, le terme

$$\nabla_c \cdot \mathbf{D}^\# = \nabla_c \cdot \left(0, 0, \boldsymbol{\tau}^\# + \boldsymbol{\sigma}^n, \boldsymbol{\tau}^\# \mathbf{u}^\# + \boldsymbol{\sigma}^n \mathbf{u}^\# - \mathbf{q}^\#, 0 \right)^t,$$

correspond à la discrétisation spatiale des termes capillaires et de diffusion. Le schéma utilisé pour le calcul des gradients de chaque grandeur (u_x, u_y, T) est le même que celui détaillé dans le [Chapitre 4](#) sur la résolution de la thermique.

5.3.1 Version explicite

La version explicite du schéma s'obtient en prenant $\# = n$. On a alors

$$\mathbf{V}_c^\dagger = \mathbf{V}_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \left(\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \overline{\mathbf{G}}_{cd}^n - \nabla_c \cdot \mathbf{D}^n \right).$$

Ce schéma est stable sous les conditions (5.2.1.3), (5.2.2.1) et (5.2.3.1). La forme explicite du système n'a que peu d'intérêt dans notre application. En effet, on considère principalement des écoulements avec des grands ratios de densité et de pression, où la phase liquide est quasi-incompressible. De plus, pour des écoulements proche paroi, la nécessité de résoudre la couche limite avec un maillage très raffiné va drastiquement affecter le pas de temps, à cause des conditions de stabilité liées aux effets dissipatifs (5.2.2.1). Il est alors nécessaire d'utiliser une discrétisation implicite, pour laquelle le schéma est stable sans condition sur le pas de temps.

5.3.2 Version implicite

La forme implicite de (5.3.0.1) nécessite la résolution d'un système non linéaire, qui peut s'avérer complexe, coûteux en terme de temps CPU et peu robuste. Ainsi, l'approche de Chalons & al. [CGK16, CGK17] étendue au modèle à cinq équations par Peluchon & al. [PGM17] est utilisée. Elle consiste à remarquer que, en l'absence de choc, l'équation de l'évolution de l'entropie dans l'**étape Lagrange** est simplement $\partial_t s = 0$. On peut alors changer de variables pour résoudre le système en $(\vartheta, \mathbf{u}, E)$ par (\mathbf{u}, p, s) . L'équation de la pression lors de l'**étape Lagrange** est donnée par

$$\partial_t p + a^2 \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} = \vartheta \frac{\boldsymbol{\tau} : \mathbf{d} - \nabla \cdot \mathbf{q}}{\gamma - 1}, \quad (5.3.2.1)$$

où \mathbf{d} est le tenseur de déformation et $a = \rho c$ est la vitesse du son lagrangienne. Les effets de tension de surface ne jouent pas sur cette dernière équation. La résolution de (5.3.2.1) sous cette forme est difficile à cause des termes non-linéaires liés aux effets visqueux. Ils seront dans un premier temps négligés [PGM21]. De plus, on omet aussi les termes liés à la diffusion thermique par soucis de simplicité et pour ne pas coupler la résolution à l'équation d'énergie. Le système vitesse-pression-entropie qui sera résolu s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p & = \vartheta \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \vartheta \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \partial_t p + a^2 \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t s & = 0. \end{cases} \quad (5.3.2.2)$$

Puisque le flux ne dépend que de la vitesse et de la pression, on peut se ramener au système vitesse-pression en omettant l'équation d'entropie. Ce système est quasi-linéaire, et même linéaire si la vitesse a et le volume massique ϑ sont figés. Il s'écrit

$$\partial_t \mathbf{V}^{up} + \vartheta \mathbf{A} \nabla \cdot \mathbf{G}^{up}(\mathbf{V}) = \vartheta \nabla \cdot \mathbf{D}^{up}(\mathbf{V}, \nabla(\mathbf{V})),$$

avec $\mathbf{V}^{up} = (\mathbf{u}, p)$, $\mathbf{G}^{up} = (p, \mathbf{u})$, $\mathbf{D}^{up} = (\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\sigma}, 0)$ et

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a^2 \end{pmatrix}.$$

Sa résolution par un schéma implicite nécessite seulement la résolution d'un système linéaire. Ce dernier est résolu avec le schéma temporel Euler-implicite suivant

$$\mathbf{V}_c^{up,\dagger} = \mathbf{V}_c^{up,n} - \vartheta_c^n \mathbf{A}_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \left(\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \overline{\mathbf{G}}_{cd}^{up,\dagger} - \nabla_c \cdot \mathbf{D}^{up,\dagger} \right).$$

Il peut se mettre sous la forme matricielle

$$\left(\mathbf{I}_d + \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{M}^{up} \right) \mathbf{V}^\dagger = \mathbf{V}^n + \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} ([[C]])^{up,n}.$$

En dimension deux, lorsque le maillage est structuré, \mathbf{M}^{up} est une matrice bloc à cinq diagonales pour le solveur unidimensionnel de la partie hyperbolique présenté précédemment et une matrice bloc à neuf diagonales pour un solveur multidimensionnel de type GLACE [DM05] ou EUCCLHYD [MABO07]. Les effets visqueux induisent également une matrice à neuf diagonales sur une grille curviligne. Les coefficients de la matrice dépendent des pentes du solveur de Riemann λ^\pm , de la vitesse du son lagrangienne a , de la géométrie et de la viscosité pour la partie visqueuse. La force de tension de surface est prise en compte dans $([[C]])^n$. On voit qu'elle agit comme un terme explicite puisque la fraction volumique n'est pas modifiée lors de cette étape. En pratique, le système obtenu est résolu sous delta-forme

$$\left(\mathbf{I}_d + \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{M}^{up} \right) \delta \mathbf{V} = -\vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{R}^{up,n},$$

où $\delta \mathbf{V} = \mathbf{V}^\dagger - \mathbf{V}^n$ et $\mathbf{R}^{up,n}$ est le membre de droite, donné pour chaque cellule par

$$\mathbf{R}_c^{up,n} = \mathbf{A}_c^n \left(\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \overline{\mathbf{G}}_{cd}^{up,n} - \nabla_c \cdot \mathbf{D}^{up,n} \right).$$

Mise à jour du volume spécifique

La résolution de ce système linéaire donne alors une nouvelle vitesse et une prévision de la pression. Ces prédictions de pression sont utilisées pour évaluer le flux numérique du système complet $\overline{\mathbf{G}}_{ncf}^\dagger$ et mettre à jour le volume spécifique ϑ^\dagger explicitement avec les formules (5.3.0.1), c'est-à-dire

$$\vartheta_c^\dagger = \vartheta_c^n + \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \overline{\mathbf{u}}_{ncd}^\# \quad (5.3.2.3)$$

Mise à jour de l'énergie totale

Pour la mise à jour de l'énergie totale E , on prend cette fois en compte la diffusion thermique, négligée dans un premier temps. L'équation d'évolution de l'énergie est donnée par

$$\partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p\mathbf{u}) = \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}\mathbf{u}) + \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{u}) - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{q}.$$

Pour la résoudre, on va la transformer pour se ramener à une équation sur l'énergie interne puisque $E = \varepsilon + \frac{1}{2}\mathbf{u}^2 + \varepsilon_\sigma$. On a

$$\partial_t \varepsilon + \vartheta \nabla \cdot \mathbf{q} = \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}\mathbf{u}) + \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{u}) - \vartheta \nabla \cdot (p\mathbf{u}) - \partial_t \frac{\mathbf{u}^2}{2} - \partial_t \varepsilon_\sigma.$$

Une discrétisation implicite de cette équation donne

$$\varepsilon_c^\dagger - \varepsilon_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \nabla_c \cdot \mathbf{q}^\dagger = \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \mathbf{R}_\varepsilon^\dagger, \quad (5.3.2.4)$$

où, après la résolution du système vitesse-pression (5.3.2.2) et la mise à jour du volume (5.3.2.3), tout le membre droit $\mathbf{R}_\varepsilon^\dagger$ est connu. Le flux thermique est supposé suivre la loi de Fourier $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$ avec une conduction thermique de mélange définie par $\lambda = z\lambda_1 + (1-z)\lambda_2$ et la température de mélange T telle que

$$T = \frac{1}{c_v} \sum_{k=1}^2 y_k c_{v_k} T_k,$$

où la température de chaque phase suit l'équation d'état $T_k(p, \vartheta_k) = \vartheta_k \frac{p + \pi_k}{c_{v_k}(\gamma_k - 1)}$. La résolution de (5.3.2.4) se fait alors avec une méthode de Newton en température de mélange

$$\varepsilon \left(T_c^\dagger, \vartheta_c^\dagger, z_c^\dagger, y_c^\dagger \right) - \varepsilon \left(T_c^n, \vartheta_c^n, z_c^n, y_c^n \right) - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \nabla_c \cdot \left(\lambda \nabla \mathbf{q}^\dagger \right) = \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c^n|} \mathbf{R}_\varepsilon^\dagger,$$

Une fois la convergence atteinte, l'énergie totale peut être calculée d'après l'énergie interne et la vitesse par

$$E_c^\dagger = \varepsilon_c^\dagger + \frac{1}{2} |\mathbf{u}_c^\dagger|^2 + \varepsilon_{\sigma c}^\dagger.$$

La pression réelle est alors déterminée par l'équation d'état.

5.4 Étape de Transport

La résolution de l'étape de transport est très classique. Cependant, puisque le mouvement de maillage de l'algorithme de couplage s'effectue dans cette étape, il est nécessaire de faire attention au flux utilisé. Pour établir un tel schéma, on reprend la démarche utilisée pour construire le schéma de diffusion sur maillage mobile [Chapitre 4](#). On rappelle notamment que ce schéma numérique a été obtenu par transformation entre une grille curviligne et un maillage cartésien unitaire de référence. Lorsqu'on applique cette transformation à l'équation de transport (5.1.0.3) sur une quantité ϕ , on a sous forme compacte

$$\partial_T \left(\frac{\phi}{J} \right) + \nabla_{X,Y} \cdot \left(\phi \frac{\mathbf{X}_t}{J} + \phi \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \mathbf{u} \right) - \phi \nabla_{X,Y} \cdot \left(\nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \mathbf{u} \right) = 0.$$

En remplaçant la dérivé temporelle du maillage par sa vitesse de déplacement, on obtient

$$\partial_T \left(\frac{\phi}{J} \right) + \nabla_{X,Y} \cdot \left(\phi \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \right) - \phi \nabla_{X,Y} \cdot \left(\nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \mathbf{u} \right) = 0,$$

où on rappelle que \mathbf{w} est la vitesse de déplacement du maillage. En intégrant l'équation précédente sur une cellule c du maillage de référence, on en déduit

$$\partial_T \left(\frac{\phi_c}{J_c} \right) + \int_{\Omega_c(t)} \nabla_{X,Y} \cdot \left(\phi \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \right) dv - \phi_c \int_{\Omega_c(t)} \nabla_{X,Y} \cdot \left(\nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right) \mathbf{u} \right) dv = 0.$$

En utilisant le théorème de la divergence, on obtient

$$\partial_T \left(\frac{\phi_c}{J_c} \right) + \int_{\partial\Omega_c(t)} \phi (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right)^t \mathbf{n} ds - \phi_c \int_{\partial\Omega_c(t)} \mathbf{u} \cdot \nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right)^t \mathbf{n} ds = 0.$$

Là encore, la quantité

$$\nabla_{x,y} \left(\frac{\mathbf{X}}{J} \right)^t \mathbf{n},$$

correspond à la longueur de la face portée par la normale unitaire sortante. Après une discrétisation temporelle explicite, on obtient finalement le schéma de transport

$$|\Omega_c^{n+1}| \phi_c^{n+1} = |\Omega_c^n| \phi_c^\dagger - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \phi_{cd}^\dagger (\tilde{u}_{cd} - \bar{w}_{cd}) + \Delta t \phi_c^\dagger \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \tilde{u}_{cd},$$

pour la quantité ϕ où \tilde{u}_{cd} est un flux de vitesse à déterminer, \bar{w}_{cd} correspond à la vitesse du déplacement de maillage d'une face, et ϕ_{cd}^\dagger est un flux. En revenant aux quantités conservatives \mathbf{U} , on doit donc résoudre

$$|\Omega_c^{n+1}| \mathbf{U}_c^{n+1} = |\Omega_c^n| \mathbf{U}_c^\dagger + \mathbf{U}_c^\dagger \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \tilde{u}_{cd} - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \mathbf{U}_{cd}^\dagger (\tilde{u}_{cd} - \bar{w}_{cd}).$$

Le choix de discrétisation de la vitesse matérielle \tilde{u}_{cd} est déterminant pour avoir un schéma globalement conservatif. Pour cela, il suffit de prendre pour \tilde{u}_{cd} l'opposé de la première composante du flux $\bar{\mathbf{G}}_{cd}$ soit \bar{u}_{cd} . Ainsi, ce flux est donné explicitement dans le cas du schéma unidimensionnel par

$$\bar{u}_{cd} = \frac{\lambda^+ \mathbf{u}_c^\dagger + \lambda^- \mathbf{u}_d^\dagger}{\lambda^+ + \lambda^-} \cdot \mathbf{n}_{cd} - \frac{\Delta p^\dagger}{\lambda^+ + \lambda^-}.$$

Pour le flux \mathbf{U}_{cd} , plusieurs choix sont possibles. Le plus naturel est d'utiliser le flux décentré amont [CGK16] (ou flux *upwind*) suivant le flux de vitesse tel que

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{cd} = \mathbf{U}_c & \text{si } \bar{u}_{cd} - \bar{w}_{cd} > 0, \\ \mathbf{U}_{cd} = \mathbf{U}_d & \text{sinon,} \end{cases}$$

qui correspond au schéma de Godunov d'ordre un. On peut l'écrire sous la forme d'un schéma de type Godunov comme

$$\mathbf{U}_{cd} = \frac{\bar{u}_{cd} - \bar{w}_{cd}}{2} (\mathbf{U}_c + \mathbf{U}_d) - \frac{|\bar{u}_{cd} - \bar{w}_{cd}|}{2} (\mathbf{U}_d - \mathbf{U}_c).$$

Ce schéma va donc naturellement diffuser les quantités et notamment la fraction volumique z . Dans ce travail, nous considérons les fluides comme non-miscibles. Il existe de nombreuses techniques pour limiter la diffusion de l'interface entre les phases. Ce problème sera traité au chapitre [Chapitre 7](#). **L'étape de Transport** est stable sous la condition sur le pas de temps

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{1}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| |(\bar{u}_{cd} - \bar{w}_{cd})| \right). \quad (5.4.0.1)$$

Remarque 6

Dans le cas d'une résolution par un schéma implicite de **l'étape Lagrange**, cette condition sur le pas de temps est implicite [\[CGK16\]](#). Elle doit donc être vérifiée entre la fin de **l'étape Lagrange** et le début de **l'étape de Transport**. En pratique, si cette condition n'est pas vérifiée, on divise le pas de temps par deux et on reprend le calcul de **l'étape Lagrange**.

5.5 Schéma global

Maintenant que nous avons détaillé la résolution du système [\(5.1.0.1\)](#) par la méthode de décomposition Lagrange-Transport, nous pouvons donner le schéma numérique global. Il est donné par

$$\left\{ \begin{array}{l} |\Omega_c^{n+1}| \rho_c^{n+1} = |\Omega_c^n| \rho_c^n - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \rho_{cd}^\dagger (\bar{u}_{cd}^\# - \bar{w}_{cd}^\#), \\ |\Omega_c^{n+1}| (\rho y)_c^{n+1} = |\Omega_c^n| (\rho y)_c^n - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| (\rho y)_{cd}^\dagger (\bar{u}_{cd}^\# - \bar{w}_{cd}^\#), \\ |\Omega_c^{n+1}| (\rho \mathbf{u})_c^{n+1} = |\Omega_c^n| (\rho \mathbf{u})_c^n - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \left((\rho \mathbf{u})_{cd}^\dagger (\bar{u}_{cd}^\# - \bar{w}_{cd}^\#) + \bar{p}_{cd}^\# \right) \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \Delta t \nabla_c \cdot (\boldsymbol{\tau}^\# + \boldsymbol{\sigma}^n), \\ |\Omega_c^{n+1}| (\rho E)_c^{n+1} = |\Omega_c^n| (\rho E)_c^n - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \left((\rho E)_{cd}^\dagger (\bar{u}_{cd}^\# - \bar{w}_{cd}^\#) + \bar{p}_{cd}^\# \bar{u}_{cd}^\# \right) \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad + \Delta t \nabla_c \cdot (\boldsymbol{\tau}^\# \mathbf{u}^\# + \boldsymbol{\sigma}^n \mathbf{u}^\# - \mathbf{q}^\#), \\ |\Omega_c^{n+1}| z_c^{n+1} = |\Omega_c^n| z_c^n - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| z_{cd}^n (\bar{u}_{cd}^\# - \bar{w}_{cd}^\#) + z_c^n \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \bar{u}_{cd}^\#. \end{array} \right. \quad (5.5.0.1)$$

Ce schéma est clairement conservatif pour les équations de densité, de quantité de mouvement et d'énergie totale. Sa version explicite est stable sous les conditions sur le pas de temps [\(5.2.1.3\)](#), [\(5.2.2.1\)](#), [\(5.4.0.1\)](#), alors que sa version implicite est stable seulement sous la condition [\(5.4.0.1\)](#). Il préserve les discontinuités de contact, à savoir les états \mathbf{u} et p constants lorsque les effets de tension de surface ne sont pas pris en compte [\[CGK16\]](#). En effet, les effets capillaires provoquent un saut de pression sur la discontinuité de contact, vérifiant la loi de Laplace. De plus, la formulation CSS utilisée ici n'est pas équilibrée avec le flux de pression, ce qui peut produire des courants parasites, bien connus dans la simulation numérique des effets capillaires [\[GLN⁺99, PS05, SPD⁺17\]](#).

Remarque 7

Le flux numérique global, donné dans [\(5.5.0.1\)](#) dépend lui même du pas de temps Δt . En effet, les

variables du flux avec l'exposant \dagger sont mises à jour par l'**étape Lagrange** (5.3.0.1) qui dépend du pas de temps. Ainsi, les solutions stationnaires dépendent du pas de temps. Nous pouvons considérer les deux étapes comme une méthode implicite pour calculer le flux numérique associé à (5.5.0.1). En pratique, cela n'empêche pas de converger vers une solution stationnaire qui ne dépend pas de Δt .

5.6 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre le cadre général de la méthode de décomposition Lagrange-Transport. Cette stratégie a ainsi été employé pour résoudre le système à cinq équations avec effets visqueux, dissipation thermique et tension de surface sous la forme CSS.

Cette méthode consiste à résoudre successivement une première étape appelée **étape Lagrange** puis une seconde étape appelée **étape de Transport**. La partie hyperbolique de l'**étape Lagrange** est résolue avec un solveur de Riemann simple [PGM17], mais il est aussi possible d'utiliser un solveur lagrangien de type GLACE ou EUCCLHYD [DM05, MABO07]. Une correction bas-Mach doit être utilisée dans les deux méthodes pour que le schéma converge asymptotiquement vers la limite incompressible des équations [DJOR16, Lab19]. Celles-ci seront détaillées dans le prochain chapitre.

La discrétisation des termes dissipatifs est la même que celle employée pour résoudre la thermique dans le solide. Pour traiter les effets de tension de surface, et l'aspect vraiment multidimensionnel, le calcul des gradients de la fraction volumique aux faces est basé sur l'interpolation des gradients aux nœuds par une méthode des moindres carrés. Les contraintes de stabilité sur le pas de temps de l'**étape Lagrange** pouvant être très limitantes, nous en avons étendue la version implicite utilisée dans [CGK16]. Ainsi, la stabilité globale n'est contrainte que par l'**étape de Transport**.

Cependant, le schéma construit dans cette partie n'est pas exempt de tous défauts. Premièrement, il n'est que d'ordre un en espace et en temps, ce qui est insuffisant. La montée en ordre permettra d'avoir des résultats plus précis et de limiter la diffusion numérique de l'interface entre les phases considérées non-miscibles. Ce point sera traité dans le [Chapitre 7](#). Deuxièmement, la prise en compte des effets de tension de surface, bien que conservative, ne permet pas de préserver les solutions équilibres du type loi de Laplace. Ainsi, lorsque le nombre de Weber, rapport des forces d'inertie aux forces de tension superficielle, est petit, l'écoulement peut présenter des courants parasites comme on l'illustre dans le [Chapitre 8](#). Ces courants sont des vitesses artificielles qui proviennent de la mauvaise discrétisation de la divergence du tenseur capillaire face au gradient de pression. Pour tenter de réduire leur amplitude, la prise en compte des effets de tension de surface sous la forme CSF peut être employée. Celle-ci, bien que délicate à prendre en compte à cause du produit non-conservatif, est étudiée dans le chapitre suivant.

Chapitre 6

Résolution numérique du système diphase : approche non-conservative

Sommaire

6.1 Schéma de type Godunov non-conservatif	95
6.1.1 Schéma de type Godunov unidimensionnel	95
6.1.2 Schéma de type Godunov multidimensionnel	103
6.1.3 Solveur de Riemann simple	112
6.1.4 Application aux systèmes généraux de la mécanique des fluides	116
6.2 Application au système à cinq équations avec tension de surface	117
6.2.1 Rappel des équations	117
6.2.2 Solveur de Riemann simple lagrangien : cas unidimensionnel	118
6.2.3 Solveur de Riemann simple lagrangien : cas multidimensionnel	123
6.2.4 Stabilité	128
6.3 Régime bas-Mach	129
6.3.1 Analyse asymptotique du modèle diphase en régime bas-Mach	129
6.3.2 Correction bas-Mach : schéma unidimensionnel	132
6.3.3 Correction bas-Mach : schéma multidimensionnel	133
6.4 Conclusion	135

Ce chapitre présente les outils numériques utilisés afin de résoudre l'écoulement diphase par une modélisation non-conservative des effets de tension de surface. Ce modèle, appelé formulation CSF est largement utilisé dans la littérature et a été l'objet du développement de nombreuses méthodes numériques [PS05, Bra07, ND15, GOR17, ZAGT20].

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté une approche simple, basée sur les méthodes de la littérature, pour résoudre le modèle à cinq équations en prenant en compte la tension de surface sous la forme CSS. Cette forme conservative de la contribution des effets capillaires rend sa prise en compte simple. Dans ce chapitre, nous allons considérer les effets de la tension de surface sous la forme CSF, qui est quant à elle, plus délicate à traiter numériquement. Récemment, de nombreux auteurs ont proposé des schémas pour traiter la tension de surface sous cette forme dans un modèle compressible à deux phases, en incluant ce produit non-conservatif directement dans

le solveur. P rigaud & al. [PS05] ont utilis  un sch ma de type Godunov bas  sur le solveur de Riemann exact incluant la tension de surface. Plus tard, Braconnier & al. [Bra07] ont propos  un solveur de Riemann approch  avec la tension de surface, bas  sur un sch ma de relaxation. Nguyen & al. [ND15] ont r solu le mod le   cinq  quations avec un sch ma bas  sur un solveur de Riemann de type Osher  quilibr . Ensuite, le sch ma HLLC [TSS94] a  t   tendu pour prendre en compte la force de tension de surface par Garrick & al. [GOR17]. Dans le contexte de la m thode Level-Set, Zou & al. [ZAGT20, ZGK⁺21] ont utilis  la strat gie de d composition Lagrange-Transport de Chalons & al. [CGK16] o  les flux   l'interface contiennent la force de tension de surface.

L'objectif est donc d'adapter la m thode num rique pr sent e pr c demment   la formulation CSF, en construisant un sch ma permettant de v rifier exactement la loi de Laplace   travers une interface stationnaire courbe. On rappelle que la partie hyperbolique de l' tape **Lagrange** est r solue soit avec un sch ma de type Godunov bas  sur un solveur de Riemann simple de Gallice [Gal00, Gal02b, Gal02a, Gal03], soit avec un sch ma lagrangien multidimensionnel [DM05, MABO07, CM18]. L'utilisation d'un solveur simple permet de construire un sch ma positif dans la phase lagrangienne, en prenant soin de v rifier de mani re discr te la pr servation de certaines solutions stationnaires. Un sch ma multidimensionnel, quant   lui, permet de prendre en compte l'aspect multidimensionnel des  coulements et de la tension de surface.

Ainsi, nous allons pr senter l'extension de la notion de sch ma de type Godunov au cadre non-conservatif bas  sur un solveur de Riemann approch . La difficult  principale r side dans le fait que le produit non-conservatif n'est pas d fini par les concepts usuels de la th orie des distributions. Ce point a  t  abord  dans [DMLM95], et ne sera pas abord  ici. La construction de sch ma de type Godunov non-conservatifs a d j   t  abord  par plusieurs auteurs [Tou92, Gal02b, Gal02a, Par06, CGP06, CLMRP08, AK10, CC17, CKMdL19].

G n ralement, l'extension en dimension sup rieure   un se fait en r solvant le probl me de Riemann approch  sur chaque face s parant les cellules du maillage. Le sch ma n'est donc pas purement multidimensionnel puisqu'il n'utilise que le voisinage aux faces, et pas le voisinage aux n uds. Des sch mas vraiment multidimensionnels ont d'abord  t  introduits pour la r solution de l'hydrodynamique lagrangienne [DM05, MABO07]. Plusieurs travaux r cents ont consist     tendre la notion de sch ma multidimensionnel au cadre eul rien [Bal10, SYY14]. R cemment, Gallice & al. [GCLM22] ont montr  le lien profond entre le sch ma lagrangien EUCCLHYD [MABO07] et la notion de sch ma de type Godunov. Ils ont alors introduit les sch mas de type Godunov multidimensionnels, pour obtenir un sch ma num rique multidimensionnel, positif et entropique bas  sur la notion de solveur simple. Son extension aux probl mes avec terme source a  t  fait dans [Cha22, Gal23, DGCC⁺23]. Aussi, les effets de tension de surface  tant un ph nom ne vraiment multidimensionnel, l'extension de la th orie de sch ma de type Godunov multidimensionnel au cadre non-conservatif bas  sur un solveur de Riemann approch  s'av re int ressante, et une  tude comparative des approches unidimensionnelle et multidimensionnelle va  tre r alis e. L'extension de la tension de surface dans le cadre lagrangien a d j   t   tudi e dans [CHL20], mais   ce jour, elle n'a jamais  t  r alis e dans le cadre eul rien.

Cependant, il est connu que les sch ma de type Godunov n cessitent un traitement particulier dans le r gime bas-Mach [GV99, GM04, Rie11, Del10, DJOR16]. En effet, lorsque le nombre de Mach tend vers 0, la solution discr te du sch ma ne tend pas vers la limite asymptotique du mod le r solu. Or, les applications vis es n cessitent d'avoir un sch ma num rique tout-r gime, qui soit pr cis pour les  coulements supersonique ou hypersonique comme pour les  coulements quasi incompressible.

Aussi, apr s avoir pr sent  la th orie des sch mas de type Godunov non-conservatifs unidimensionnels et multidimensionnels, nous appliquerons ces r sultats au syst me   cinq  quations avec

tension de surface sous la forme CSF. Enfin, nous étudierons des corrections des schémas permettant de capturer correctement la limite incompressible lorsque le nombre de Mach tend vers 0.

6.1 Schéma de type Godunov non-conservatif

6.1.1 Schéma de type Godunov unidimensionnel

Soit Ω un ouvert de \mathbb{R} . On se donne une discrétisation de cet espace en N cellules $([x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}])_{i \in \mathbb{Z}}$ de taille $\Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$. Le temps est discrétisé par $t^n = n\Delta t$ pour $n \in \mathbb{N}$, où $\Delta t > 0$ est le pas de temps. Dans l'approche des schémas de type volumes finis *Cell-Centered* qui est utilisée, la notation ϕ_i^n est une approximation de

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \phi(x, t^n) dx,$$

pour toute quantité $\phi(x, t)$.

Nous considérons des systèmes hyperboliques unidimensionnels qui ont la forme suivante

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{B}(\mathbf{U}) = 0, \quad (6.1.1.1)$$

avec \mathbf{U} , \mathbf{F} et \mathbf{B} vecteurs de \mathbb{R}^d et \mathbf{P} une matrice $d \times d$ où d est le nombre d'inconnues du système. Comme rappelé dans le [Chapitre 2](#), on suppose que le système (6.1.1.1) est muni d'un couple entropie-flux (η, \mathbf{q}) avec η une fonction strictement convexe vérifiant (2.5.0.3). On cherche en outre la solution entropique satisfaisant l'inégalité d'entropie

$$\partial_t \eta(\mathbf{U}) + \partial_x \mathbf{q}(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\pi}(\mathbf{U}) \partial_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{U}) \leq 0. \quad (6.1.1.2)$$

On suppose ici qu'il existe une matrice $\boldsymbol{\pi}$ et un flux $\boldsymbol{\beta}$ vérifiant

$$\left(\mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \mathbf{U}} \right)^t \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{U}} = \boldsymbol{\pi} \frac{\partial \boldsymbol{\beta}}{\partial \mathbf{U}}.$$

La construction de schéma numérique pour des systèmes non-conservatif de la forme (6.1.1.1) reste un problème ouvert, notamment lorsque les quantités $\mathbf{P}(\mathbf{V})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{V})$ peuvent être discontinues en même temps. La classe de schémas Path-Conservative introduits par Parès [\[Par06\]](#) et Castro [\[CGP06\]](#) est basée sur les travaux de la théorie de Dal Maso & al. [\[DMLM95\]](#). Ces schémas sont une extension des travaux de Tourni sur la formulation faible du solveur de Roe [\[Tou92\]](#). Il est mis en évidence dans [\[CLMRP08\]](#) que la convergence de tels schémas vers la solution faible ne peut être obtenue que si la diffusion numérique est nulle. Ce résultat est illustré dans [\[AK10\]](#), où même avec le bon chemin, le schéma écrit sous forme non-conservative ne converge pas. L'idée d'avoir un schéma sans diffusion numérique a été reprise dans [\[CC17\]](#), afin de construire un schéma Path-Conservative basé sur la méthode de tirage aléatoire de Glimm, appliqué à la dynamique des gaz dans le cadre lagrangien. Dans ces travaux, on se contentera uniquement des configurations où de tels théories et schémas ne sont pas nécessaires, c'est-à-dire, lorsque le sens du produit non-conservatif est clairement défini. C'est le cas par exemple du modèle à sept équations de Baer & Nunziato [\[BN86\]](#), du système à cinq équations de Kapila [\[KMB⁺01\]](#), des équations de Saint-Venant avec fond, ou encore de la Magnétohydrodynamique et du système de Powell, pour lesquels les quantités $\mathbf{P}(\mathbf{V})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{V})$ ne sont pas discontinues en même temps.

Un schéma de type Godunov est basé sur la résolution du problème de Riemann suivant

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{B}(\mathbf{U}) = 0, \quad \mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_l & \text{si } x < 0, \\ \mathbf{U}_r & \text{si } 0 \leq x. \end{cases} \quad (6.1.1.3)$$

Soit $\mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r)$, une approximation du problème de Riemann défini par le système (6.1.1.3) à chaque interface entre les états gauche et droit $\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r$. La fonction auto-similaire \mathbf{W} est telle que

- $\mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r) = \mathbf{U}_l$ pour $-x/t$ suffisamment grand,
- $\mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r) = \mathbf{U}_r$ pour x/t suffisamment grand.

De plus, le solveur doit être consistant dans le sens où $\mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbf{U}$. Sur une face $i + \frac{1}{2}$, on utilisera régulièrement la notation

$$\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{W}\left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}\right).$$

Nous allons maintenant énoncer quelques définitions générales.

Définition 7 (Schéma de type Godunov [Har83])

Le solveur de Riemann \mathbf{W} induit un schéma de type Godunov tel que

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{U}_{i-\frac{1}{2}}^+ + \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^- \right), \quad (6.1.1.4)$$

avec

$$\mathbf{U}_{i-\frac{1}{2}}^+ = \frac{2}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \mathbf{W}\left(\frac{x - x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_{i-1}, \mathbf{U}_i\right) dx, \quad \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^- = \frac{2}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{W}\left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}\right) dx. \quad (6.1.1.5)$$

Cette définition illustre la forme d'un schéma de type Godunov (voir Fig. 6.1). La solution est mise à jour dans chaque cellule par la résolution d'un problème de Riemann à chaque interface. Le solveur de Riemann peut être exact ou approché. Dans le paradigme des volumes finis, cette forme

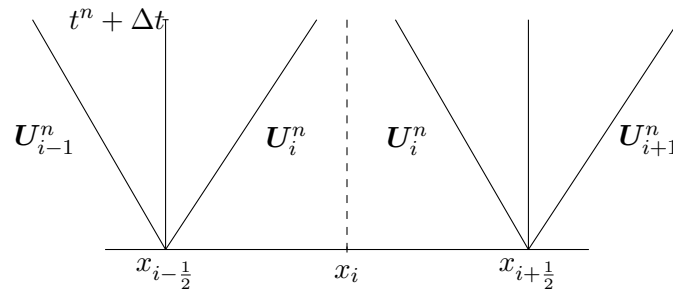


Fig. 6.1. Illustration d'un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann.

en elle même n'est pas évidente à utiliser en pratique. Il est préférable de définir des flux numériques basés sur le solveur de Riemann \mathbf{W} .

Définition 8 (Flux numériques associés au solveur de Riemann)

Soit $\overline{\mathbf{F}}_{i-\frac{1}{2}}^+$ et $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^-$ les flux numériques associés au solveur de Riemann sur les faces $i - \frac{1}{2}$ et $i + \frac{1}{2}$ de la cellule i . Par intégration de (6.1.1.1) sur leur domaine spatio-temporel respectif, ces flux numériques sont donnés par

$$\begin{aligned}\overline{\mathbf{F}}_{i-\frac{1}{2}}^+ &= \mathbf{F}(\mathbf{U}_i) - \frac{\Delta x}{2\Delta t} \mathbf{U}_i + \frac{1}{\Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}} dx + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^+, \\ \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- &= \mathbf{F}(\mathbf{U}_i) + \frac{\Delta x}{2\Delta t} \mathbf{U}_i - \frac{1}{\Delta t} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} dx - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^-.\end{aligned}\tag{6.1.1.6}$$

où $(\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^+$ et $(\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^-$ sont deux approximations du terme non-conservatif vérifiant

$$(\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^+ \simeq \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{B}(\mathbf{U}) dx \quad \text{et} \quad (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^- \simeq \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{B}(\mathbf{U}) dx.$$

Cette définition des flux est identique à [GCLM22] sans produit non-conservatif et similaire à [Gal23, DGCC⁺23] dans le cas d'un terme source et où le solveur de Riemann est basé sur un solveur simple. On adopte la notation $\mathbf{F}_i = \mathbf{F}(\mathbf{U}_i)$ dans la suite. On a alors le Lemme suivant.

Lemme 1

La définition précédente équivaut à

$$\begin{aligned}\frac{2}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}} dx &= \mathbf{U}_i + \frac{2\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{F}}_{i-\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{F}_i \right) - \frac{2\Delta t}{\Delta x} (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^+, \\ \frac{2}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} dx &= \mathbf{U}_i + \frac{2\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_i - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) - \frac{2\Delta t}{\Delta x} (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^-.\end{aligned}$$

On peut alors réécrire (6.1.1.4) sous la forme non-conservative suivante

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- - \overline{\mathbf{F}}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^+ \right).\tag{6.1.1.7}$$

Les flux numériques (6.1.1.6) sont non-conservatifs dans le sens où $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ \neq 0$. D'après la définition des flux (6.1.1.6), on a la relation

$$\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- = \Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} + \frac{1}{\Delta t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0 \right) dx,\tag{6.1.1.8}$$

avec les notations

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} = \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^+ \right), \quad \Delta \mathbf{F} = \mathbf{F}_{i+1} - \mathbf{F}_i, \quad \text{et} \quad \mathbf{U}_0 = \mathbf{U}_0(x).$$

En remarquant que les flux $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^\pm$ vérifient la relation

$$\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^\pm = \frac{1}{2} \left(\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) \pm \frac{1}{2} \left(\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- \right),$$

ils peuvent être réécrits comme

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm} &= \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} - \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx - \int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx \right) \right) \\ &\pm \frac{1}{2} \left(\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} + \frac{1}{\Delta t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx \right) + \frac{1}{2} \overline{\Delta(\mathbf{P}\Delta\mathbf{B})}_{i+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (6.1.1.9)$$

avec

$$\overline{\Delta(\mathbf{P}\Delta\mathbf{B})}_{i+\frac{1}{2}} = (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^+ - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^-.$$

Maintenant que nous avons explicité la forme des flux numériques $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm}$, il reste à définir les approximations du produit non-conservatif

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^+ \text{ et } \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^- \quad (6.1.1.10)$$

Plusieurs choix sont possibles. L'analyse avec le cas conservatif va nous permettre de donner une bonne définition. En effet, dans le cas dégénéré où $\mathbf{P} = \mathbf{I}_d$ la matrice identité, il suffit de définir

$$\overline{\Delta\mathbf{B}}_{i\pm\frac{1}{2}}^{\mp} = \pm(\overline{\mathbf{B}}_{i\pm\frac{1}{2}}^{\mp} - \mathbf{B}_i),$$

avec $\overline{\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^{\mp} = \overline{\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^{\mp}(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1})$ un flux consistant dépendant des états gauches et droits, et la notation $\mathbf{B}_i = \mathbf{B}(\mathbf{U}_i)$, pour que la définition des flux soit consistante avec le système (6.1.1.1). Dans le cas où $\mathbf{P} \neq \mathbf{I}_d$, on verra dans la suite que la relation de consistance nécessite de définir le terme $\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}$ tel que

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}} = \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^+ \right),$$

qui correspond à l'approximation du produit non-conservatif sur la face $i + \frac{1}{2}$. On suppose l'existence d'une matrice $\overline{\mathbf{P}}$ telle que $\overline{\mathbf{P}}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbf{P}(\mathbf{U})$, et telle que par construction

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}} \simeq \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{B}(\mathbf{U}) dx \simeq \overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}) (\mathbf{B}_{i+1} - \mathbf{B}_i). \quad (6.1.1.11)$$

Il est aussi possible de définir les termes non-conservatifs (6.1.1.10) de la manière suivante

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^+ = \overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^+ (\mathbf{B}_{i+1} - \overline{\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^+) \text{ et } \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^- = \overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^- (\overline{\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^- - \mathbf{B}_i),$$

avec $\overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm} = \overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm}(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1})$. En choisissant une discrétisation centrée de $\overline{\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm}$, telle que $\overline{\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm} = (\mathbf{B}_{i+1} + \mathbf{B}_i)/2$, on a alors

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^-) (\mathbf{B}_{i+1} - \mathbf{B}_i).$$

Le lien avec la définition (6.1.1.11) est évident, on a

$$\overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \overline{\mathbf{P}}_{i+\frac{1}{2}}^-).$$

Remarque 8

La discrétisation de ce terme sera discuté plus tard, au regard de la préservation des solutions équilibrées. On a donc une approximation d'ordre un du terme non-conservatif. Pour avoir un schéma d'ordre deux vis-à-vis du terme non-conservatif, il est nécessaire d'introduire une approximation centré de $\mathbf{P}\partial_x\mathbf{B}$ dans chacune des cellules (voir [Bou04] par exemple). Ce point sera traité dans le chapitre suivant.

L'écriture des flux sous la forme (6.1.1.9) permet entre autres de réécrire le schéma sous différentes formes intéressantes.

- La première

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}^- - \overline{\mathbf{H}}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}} + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}} \right). \quad (6.1.1.12)$$

avec

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}^\pm &= \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} - \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx - \int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx \right) \right) \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \left(\Delta\mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} + \frac{1}{\Delta t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx \right). \end{aligned}$$

On peut voir sous cette forme que le schéma numérique est composé d'un flux classique constitué d'une partie centrée et d'une partie de diffusion, et d'un traitement centré du terme non-conservatif.

- La seconde

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{\mathbf{H}}_{i-\frac{1}{2}} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{E}}_{i+\frac{1}{2}} + \overline{\mathbf{E}}_{i-\frac{1}{2}} \right). \quad (6.1.1.13)$$

avec

$$\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} - \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx - \int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx \right) \right),$$

et

$$\overline{\mathbf{E}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\Delta\mathbf{F} + \frac{1}{\Delta t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx \right).$$

Du point de vue de la mise en œuvre dans un code de calcul, cette forme est très attrayante : il suffit de se doter d'un solveur de Riemann exact ou approché, d'être capable d'évaluer seulement son intégrale, et le schéma est simple. Le terme non-conservatif est toujours présent, mais contenu dans le solveur de Riemann. Le schéma est toujours non-conservatif par la présence des termes $\overline{\mathbf{E}}_{i\pm\frac{1}{2}}$.

6.1.1.1 Stabilité

La stabilité du schéma numérique est assurée si la solution reste dans l'ensemble des solutions admissibles. Cette propriété peut être garantie si la solution est constituée d'une combinaison convexe de solutions admissibles. La propriété suivante donne une condition de stabilité sur le pas de temps.

Proposition 4

Soit $\xi_{i-\frac{1}{2}}^{\max}$ et $\xi_{i+\frac{1}{2}}^{\min}$ deux vitesses positives telles que

- $\forall \xi \geq \xi_{i-\frac{1}{2}}^{\max}, \mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_i = 0,$
- $\forall \xi \leq -\xi_{i+\frac{1}{2}}^{\min}, \mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_i = 0.$

Le schéma défini par (6.1.1.4) et (6.1.1.5) est stable sous la condition

$$\forall i, \frac{1}{\Delta t} \geq \frac{\xi_{i-\frac{1}{2}}^{\max} + \xi_{i+\frac{1}{2}}^{\min}}{\Delta x}.$$

Démonstration. Le schéma peut être réécrit sous la forme

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n + \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_i) dx + \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_i) dx \right).$$

D'après la définition de $\xi_{i-\frac{1}{2}}^{\max}$ et $\xi_{i+\frac{1}{2}}^{\min}$, l'équation précédente devient

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\xi_{i-\frac{1}{2}}^{\max} + \xi_{i+\frac{1}{2}}^{\min}}{\Delta x} \Delta t \right) \mathbf{U}_i^n + \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}^{\min} \Delta t} \mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} dx + \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}^{\max} \Delta t}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}} dx \right).$$

Si les quantités \mathbf{U}_i , $\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}}$ et $\mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}}$ sont admissibles, alors la solution est constituée d'une combinaison convexe de solutions admissibles sous la condition sur le pas de temps. \square

6.1.1.2 Conservation

Dans le cadre des schémas classiques de type Godunov, la conservation est obtenue de manière classique par l'égalité sur chaque interface des flux donnés par (6.1.1.6) i.e. $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- = 0$ ce qui n'est pas encore le cas ici. La définition de la consistance avec la forme intégrale, similaire à [HLvL83], va nous permettre d'énoncer une proposition sur la conservation des flux. Même si le système étudié est non-conservatif, on parle de flux conservatif dans le sens où, sans produit non-conservatif, les flux sont égaux de part et d'autre de l'interface.

Définition 9 (Consistance avec la forme intégrale [Gal02a])

Le solveur de Riemann \mathbf{W} est consistant avec la forme intégrale de (6.1.1.1) si et seulement si il existe une approximation du terme non-conservatif $\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}$ telle que

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1} \right) - \mathbf{U}_0 \right) dx + \Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} = 0. \quad (6.1.1.14)$$

Dans ce cas, (6.1.1.4) est appelé schéma de type Godunov conservatif.

Proposition 5 ([Gal02a])

Le schéma de type Godunov induit par le solveur de Riemann \mathbf{W} associé à l'approximation du terme non-conservatif $\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}$ est consistant avec la forme intégrale si et seulement si

$$\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- = 0.$$

Démonstration. D'après l'équation (6.1.1.8), la relation (6.1.1.14) est vraie si et seulement si $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- = 0$. \square

Cette dernière proposition permet de faire deux remarques sur les schémas précédents.

- Si le schéma (6.1.1.4) possède des flux conservatifs, alors (6.1.1.12) devient

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{\mathbf{H}}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}} + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}} \right),$$

avec $\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}^\pm = \overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}$.

- De plus, on peut voir que sans terme non-conservatif, les termes $\overline{\mathbf{E}}_{i\pm\frac{1}{2}}$ s'annulent dans (6.1.1.13) et le schéma a exactement la forme d'un schéma de type Godunov, avec un flux composé d'une partie centrée et d'une partie de diffusion. On retrouve alors exactement les définitions et propositions énoncées dans [HLvL83].

6.1.1.3 Entropie

De la même façon que précédemment, nous allons énoncer des définitions similaire concernant l'entropie.

Définition 10

Soit $\overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^-$ et $\overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^+$ les flux d'entropie associés au solveur de Riemann sur les faces $i - \frac{1}{2}$ et $i + \frac{1}{2}$ de la cellule i . Par intégration sur leur domaine spatio-temporel respectif, ces flux sont donnés par

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{q}}_{i-\frac{1}{2}}^+ &= \mathbf{q}_i - \frac{\Delta x}{2\Delta t} \eta_i + \frac{1}{\Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \eta(\mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}}) dx + (\overline{\pi\Delta\beta})_{i-\frac{1}{2}}^+, \\ \overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^- &= \mathbf{q}_i + \frac{\Delta x}{2\Delta t} \eta_i - \frac{1}{\Delta t} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \eta(\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}}) dx - (\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^-. \end{aligned} \quad (6.1.1.15)$$

en notant $\mathbf{q}_i = \mathbf{q}(\mathbf{U}_i)$ et $\eta_i = \eta(\mathbf{U}_i)$, et où $(\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^-$ et $(\overline{\pi\Delta\beta})_{i-\frac{1}{2}}^+$ sont deux approximations du terme non-conservatif vérifiant

$$(\overline{\pi\Delta\beta})_{i-\frac{1}{2}}^+ \simeq \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \pi(\mathbf{U}) \partial_x \beta(\mathbf{U}) dx, \quad (\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^- \simeq \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \pi(\mathbf{U}) \partial_x \beta(\mathbf{U}) dx.$$

On a en outre le Lemme suivant.

Lemme 2

La définition précédente équivaut à

$$\begin{aligned} \frac{2}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \eta(\mathbf{W}_{i-\frac{1}{2}}) dx &= \eta_i + \frac{2\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{q}}_{i-\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{q}_i \right) - \frac{2\Delta t}{\Delta x} (\overline{\pi\Delta\beta})_{i-\frac{1}{2}}^+, \\ \frac{2}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \eta(\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}}) dx &= \eta_i + \frac{2\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{q}_i - \overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) - \frac{2\Delta t}{\Delta x} (\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^-. \end{aligned}$$

D'après la convexité de l'entropie et l'inégalité de Jensen, on a

$$\eta_i^{n+1} \leq \eta_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^- - \overline{\mathbf{q}}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{\pi\Delta\beta})_{i-\frac{1}{2}}^+ \right).$$

Cette inégalité n'est rien d'autre que l'équivalent de (6.1.1.7) pour l'entropie.

On note, par analogie avec l'approximation du produit non-conservatif, le terme

$$\overline{\pi\Delta\beta} = (\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^+ + (\overline{\pi\Delta\beta})_{i+\frac{1}{2}}^-.$$

De même que l'égalité des flux permet d'avoir un schéma conservatif, il est nécessaire de s'assurer que l'entropie décroît afin d'avoir un schéma numérique entropique. On impose donc au flux d'entropie de vérifier $\overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^- \geq \overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^+$. Nous avons alors la définition suivante.

Définition 11 (Consistance avec la forme intégrale de l'inégalité d'entropie [Gal02a])

Le solveur de Riemann \mathbf{W} est consistant avec la forme intégrale de (6.1.1.2) si et seulement si il existe une approximation du terme non-conservatif $\overline{\pi\Delta\beta}$ telle que

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\eta \left(\mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1} \right) \right) - \eta_0 \right) dx + \Delta q + \overline{\pi\Delta\beta} \leq 0. \quad (6.1.1.16)$$

avec $\eta_0 = \eta(\mathbf{U}_0(x))$. Dans ce cas, le schéma (6.1.1.4) a des flux entropiques et est appelé schéma de type Godunov entropique.

Proposition 6

Le schéma de type Godunov induit par le solveur de Riemann \mathbf{W} associé à l'approximation du terme non-conservatif $\overline{\pi\Delta\beta}$ est consistant avec la forme intégrale de l'inégalité d'entropie si et seulement si

$$\overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^- \leq 0.$$

Démonstration. D'après l'expression des flux d'entropie (6.1.1.15), on a directement

$$\overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^- = \frac{1}{\Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\eta \left(\mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1} \right) \right) - \eta_0 \right) dx + \Delta q + \overline{\pi\Delta\beta}.$$

Ainsi, l'inégalité (6.1.1.16) est vérifiée si et seulement si $\overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{q}_{i+\frac{1}{2}}^- \leq 0$. Cela conclut la preuve. \square

6.1.1.4 Solution équilibre

Il est essentiel d'avoir des schémas qui préservent les solutions stationnaires. Dans un premier temps, nous donnons la définition de la solution d'équilibre au sens de Gallice [Gal02b, Gal02a].

Définition 12 (Solution d'équilibre)

*Nous appelons **solution d'équilibre** une séquence $(\mathbf{U}_i)_i$ qui vérifie à chaque interface*

$$\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^+ = \mathbf{U}_{i+1}, \quad \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^- = \mathbf{U}_{i+1}.$$

Définition 13 (Solution d'équilibre fort)

*Nous appelons **solution d'équilibre fort** une séquence $(\mathbf{U}_i)_i$ qui vérifie*

$$\begin{cases} \mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}) = \mathbf{U}_i & \text{si } x/t \leq 0, \\ \mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}) = \mathbf{U}_{i+1} & \text{si } x/t > 0. \end{cases}$$

Une solution d'équilibre fort est évidemment une solution d'équilibre. Nous avons la proposition suivante.

Proposition 7 (Relation de consistance d'une solution équilibre [Gal02a])

Une solution d'équilibre et d'équilibre fort vérifie la relation de consistance

$$\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}} \Delta \mathbf{B} = 0.$$

Démonstration. On rappelle que la relation de consistance (6.1.1.14) est donnée par

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1} \right) - \mathbf{U}_0 \right) dx + \Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}} \Delta \mathbf{B} = 0.$$

Si l'on considère une solution d'équilibre fort, l'intégrale disparaît, et le résultat est obtenu. \square

Ce résultat montre que les solutions d'équilibre vérifient un équilibre aux faces. Le fait d'avoir un schéma qui vérifie l'équilibre et/ou l'équilibre fort est bien plus puissant que de vérifier simplement un équilibre au niveau de la cellule. Il est facile de vérifier qu'un tel schéma préserve les états stationnaires

$$\forall i, \mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n.$$

Cette question a notamment été abordée dans [Bou04].

6.1.2 Schéma de type Godunov multidimensionnel

L'objectif de cette section est de généraliser les résultats précédents en dimension supérieure. On se contentera ici de la dimension 2. Considérons tout d'abord un domaine ouvert $\Omega \in \mathbb{R}^2$ discrétisé en N cellules Ω_c telles que $\mathcal{V}(c)$ est l'ensemble des cellules voisines de la cellule Ω_c par les faces. $|\Omega_c|$ est la surface de la cellule Ω_c . Le centre de masse \mathbf{x}_c de la cellule Ω_c est défini comme suit

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{|\Omega_c|} \int_{\Omega_c} \mathbf{x} dx.$$

On note $\mathcal{N}(c)$ l'ensemble des nœuds de la cellule Ω_c . La longueur de la face f commune aux cellules c et d est $|\Gamma_f| = |\Gamma_{cd}|$, et $|\Gamma_{ncf}| = |\Gamma_{cd}|/2$ est la demi-longueur attachée au nœud n , et $\mathbf{n}_f = \mathbf{n}_{cd}$ est le vecteur unitaire normal à Γ_{cd} tel que $\mathbf{n}_{cd} = -\mathbf{n}_{dc}$ (voir Fig. 6.2). Enfin, $\mathcal{SF}(nc)$ est l'ensemble des faces de Ω_c attachées au nœud n . En deux dimensions, il n'y en a toujours que deux. On utilisera parfois la notation $\mathcal{SF}(n)$ pour définir cette fois l'ensemble des faces attachées au nœud n . Dans le cas d'un maillage cartésien en deux dimensions, cette ensemble est composé de quatre faces. Enfin, on note \mathbf{x}_{n^+} et \mathbf{x}_{n^-} les nœuds qui constituent la face f .

Le temps est toujours discrétisé par $t^n = n\Delta t$ pour $n \in \mathbb{N}$, où $\Delta t > 0$ est le pas de temps. Dans l'approche des volumes finis centrés sur les cellules qui est utilisée, la notation ϕ_c^n est une approximation de

$$\frac{1}{|\Omega_c|} \int_{\Omega_c} \phi(\mathbf{x}, t^n) dx,$$

pour toute quantité $\phi(\mathbf{x}, t)$.

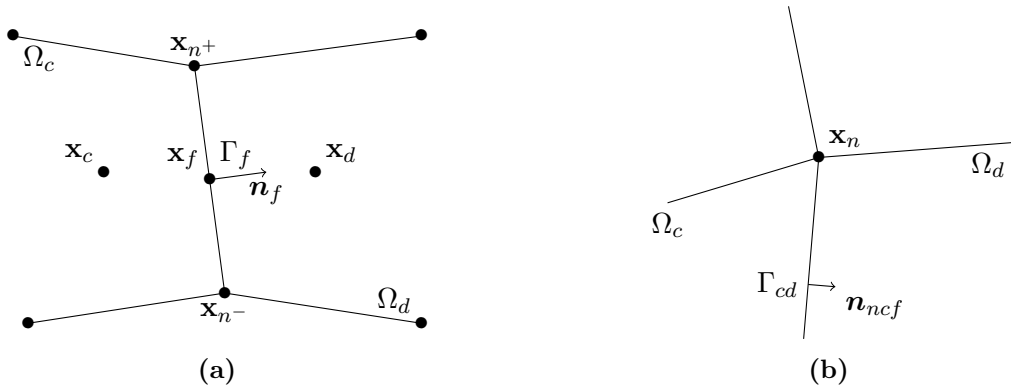


Fig. 6.2. Notations associées au maillage 2D concernant la face f (a) et le nœud n (b).

En dimension supérieure à un, le système (6.1.1.1) s'écrit

$$\partial_t \mathbf{U} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{P}(\mathbf{U}) \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{U}) = 0. \quad (6.1.2.1)$$

On le suppose toujours équipé d'un couple entropie-flux (η, \mathbf{q}) avec η une fonction strictement convexe vérifiant (2.5.0.3). On cherche encore la solution entropique satisfaisant l'inégalité d'entropie

$$\partial_t \eta(\mathbf{U}) + \nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\pi}(\mathbf{U}) \nabla \cdot \boldsymbol{\beta}(\mathbf{U}) \leq 0.$$

Une extension directe des schémas classiques de type Godunov au cas multidimensionnel consiste à considérer le solveur de Riemann \mathbf{W} dans la direction associée à la normale à la face. Ainsi $\mathbf{W}_{cf} = \mathbf{W}_{cf}(\xi; \mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r, \mathbf{n}_f)$ où $\xi = \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_f / t$ est une variable auto-similaire. \mathbf{W}_{cf} est la solution exacte ou approchée du problème de Riemann sur la face f de la cellule c

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{U} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{P}(\mathbf{U}) \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{U}) = 0, \\ \mathbf{U}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_f, 0) = \mathbf{U}_0(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_f) = \begin{cases} \mathbf{U}_c = \mathbf{U}_l & \text{si } \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_f < 0, \\ \mathbf{U}_d = \mathbf{U}_r & \text{si } 0 \leq \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_f. \end{cases} \end{cases}$$

Cependant, il est également possible d'associer au solveur de Riemann une dépendance nodale, à la manière des schémas lagrangiens GLACE [DM05] ou EUCCLHYD [MABO07]. Cette formulation a été nouvellement introduite dans [GCLM22]. Cela implique que le solveur de Riemann devient $\mathbf{W}_{ncf} = \mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f)$ où \mathcal{P}_n est un paramètre nodal associé à n . Dans [DM05, MABO07, GCLM22], \mathcal{P}_n correspond à la vitesse du nœud. Contrairement à un schéma lagrangien, il n'est pas évident de voir l'intérêt de déterminer une telle vitesse dans un cadre eulérien. Son utilité a été montré dans [GCLM22]. On peut cependant imaginer d'autres choix pour le paramètre nodal comme la pression au nœud. La fonction auto-similaire \mathbf{W}_{ncf} est toujours telle que

- $\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) = \mathbf{U}_c$ pour $-\xi$ suffisamment grand,
- $\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) = \mathbf{U}_d$ pour ξ suffisamment grand,
- $\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}, \mathbf{U}, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) = \mathbf{U}$.

De plus, on suppose que le solveur est symétrique dans le sens où

$$\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) = \mathbf{W}_{ndf}(-\xi; \mathbf{U}_d, \mathbf{U}_c, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f). \quad (6.1.2.2)$$

La normale \mathbf{n}_f agit de la manière suivante

$$\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, -\mathbf{n}_f) = -\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f). \quad (6.1.2.3)$$

Maintenant, par analogie avec le cas unidimensionnel, nous allons énoncer la définition d'un schéma de type Godunov multidimensionnel.

Définition 14 (Schéma de type Godunov multidimensionnel)

Soit $(\alpha_{ncf})_{ncf}$ une séquence de réels positifs associée à la cellule c telle que

$$\sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} \alpha_{ncf} = 1.$$

Le solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} induit un schéma de type Godunov multidimensionnel tel que

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} \alpha_{ncf} \mathbf{U}_{ncf}, \quad (6.1.2.4)$$

avec

$$\mathbf{U}_{ncf} = \mathbf{U}_c + \frac{|\Gamma_{ncf}| \Delta t}{\alpha_{ncf} |\Omega_c|} \int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_c) d\xi. \quad (6.1.2.5)$$

Généralement, on introduit le périmètre $|\partial\Gamma_c|$ de la cellule c et on définit la séquence $(\alpha_{ncf})_{ncf}$ telle que

$$\alpha_{ncf} = \frac{|\Gamma_{ncf}|}{|\partial\Gamma_c|}, \quad |\partial\Gamma_c| = \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}|.$$

Un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} nécessite l'introduction d'un flux numérique associé, afin d'écrire le schéma dans le formalisme des volumes finis.

Définition 15 (Flux associé au solveur de Riemann multidimensionnel)

Soit $\overline{\mathbf{F}}_{ncf} = \overline{\mathbf{F}}_{ncf}(\mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f)$ le flux numérique associé au solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} . Par intégration spatio-temporelle, ce flux est donné par

$$\overline{\mathbf{F}}_{ncf} = \mathbf{F}_c \cdot \mathbf{n}_f - \int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_c) d\xi - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

où $(\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f$ est une approximation du terme non-conservatif telle que

$$\Delta t \int_{-\infty}^0 \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_n \mathbf{B}(\mathbf{U}) d\xi \simeq (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f. \quad (6.1.2.6)$$

Un abus de notation est fait quand à l'intégration de (6.1.2.6). En effet, l'intégrale n'est pas réellement sur un domaine infini mais plutôt sur le support de $\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_c$. Par simplicité, on gardera cette notation. La définition des flux permet déduire le Lemme suivant, afin de construire un schéma volumes finis.

Lemme 3

La définition précédente équivaut à

$$\int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_c) d\xi = - \left(\overline{\mathbf{F}}_{ncf} - \mathbf{F}_c \cdot \mathbf{n}_f + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f \right).$$

En remarquant que

$$\sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \mathbf{n}_f = 0,$$

on peut écrire (6.1.2.4) sous la forme

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\overline{\mathbf{F}}_{ncf} + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f \right). \quad (6.1.2.7)$$

La définition du solveur de Riemann avec un paramètre nodal induit un schéma de type volumes finis *Cell-Centered* où les flux sont évalués autour des nœuds (voir Fig. 6.3). Ainsi, dans notre configuration 2D, sur une même face, il existe deux flux numériques de chaque côté de la face (voir Fig. 6.3.a). De plus, autour d'un nœud attaché à une cellule, il y a deux flux distincts (voir Fig. 6.3.b) pour une même face.

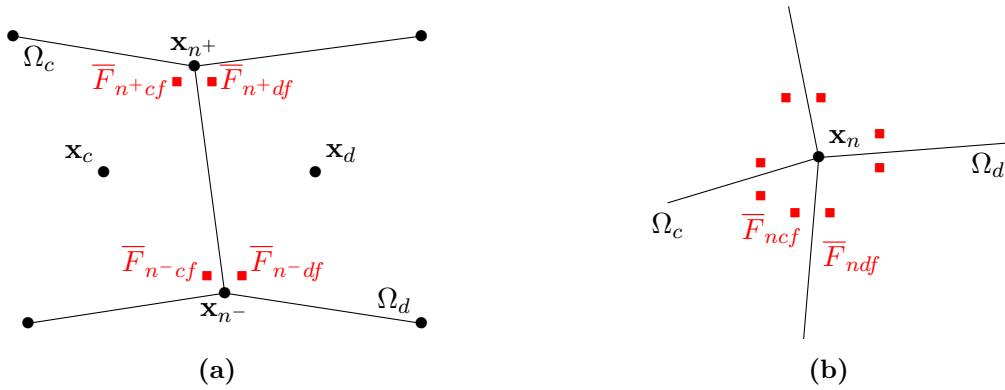


Fig. 6.3. Pour un maillage 2D, représentation schématique des flux évalués sur une face f (a) et des flux évalués autour d'un nœud (b).

Remarque 9

En ce qui concerne le produit non-conservatif, on appliquera les mêmes préceptes que dans le cas unidimensionnel. À l'ordre un en espace, on supposera l'existence d'une matrice $\overline{\mathbf{P}}$ consistante avec \mathbf{P} . Dans le contexte multidimensionnel, cette matrice $\overline{\mathbf{P}}$ peut être associée à une face, ou à un nœud. De plus, il n'y a pas de raison qu'elle ne dépende pas non plus du paramètre nodal \mathcal{P}_n . On discutera de l'influence de ce choix dans la section traitant des solutions équilibrées. Le cas de l'ordre deux sera abordé dans le prochain chapitre.

La proposition suivante permet de donner une écriture unifiée des flux numériques. Cette écriture permettra de mettre en évidence le caractère conservatif ou non-conservatif des flux.

Proposition 8

Soit $\overline{\mathbf{F}}_{nf}^\pm$ les flux tels que $\overline{\mathbf{F}}_{nf}^- = \overline{\mathbf{F}}_{ncf}$ et $\overline{\mathbf{F}}_{nf}^+ = -\overline{\mathbf{F}}_{ndf}$, alors $\overline{\mathbf{F}}_{nf}^\pm$ peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{F}}_{nf}^\pm = & \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \left(\int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi - \int_0^\infty (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right) \right] \\ & \pm \frac{1}{2} \left[(\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f + \int_{-\infty}^\infty (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right] + \frac{1}{2} \overline{\Delta(\mathbf{P}\Delta\mathbf{B})} \cdot \mathbf{n}_f, \end{aligned} \quad (6.1.2.8)$$

avec la notation $\mathbf{W}_{ncf}(\xi) = \mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f)$ ainsi que celles du terme non-conservatif

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} = (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ndf}. \quad (6.1.2.9)$$

et

$$\overline{\Delta(\mathbf{P}\Delta\mathbf{B})} = (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ndf} - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf}.$$

Démonstration. Le flux $\overline{\mathbf{F}}_{ndf} = \overline{\mathbf{F}}_{ndf}(\mathbf{U}_d, \mathbf{U}_c, \mathcal{P}_n, -\mathbf{n}_f)$, n'est autre que le flux de la cellule d attaché au nœud n sur la face f . On ne considère pas a priori l'égalité des flux dans le sens où $\overline{\mathbf{F}}_{ncf} + \overline{\mathbf{F}}_{ndf} \neq 0$. La conservation du schéma est traitée dans la suite. Le flux est donné par

$$\overline{\mathbf{F}}_{ndf} = \mathbf{F}_d \cdot (-\mathbf{n}_f) - \int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ndf}(\xi; \mathbf{U}_d, \mathbf{U}_c, \mathcal{P}_n, -\mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_d) d\xi + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ndf} \cdot (-\mathbf{n}_f), \quad (6.1.2.10)$$

où $(\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ndf} \cdot (-\mathbf{n}_f)$ est une approximation du terme non-conservatif tel que

$$\Delta t \int_{-\infty}^0 \mathbf{P}(\mathbf{U}) \partial_n \mathbf{B}(\mathbf{U}) d\xi \simeq (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ndf} \cdot (-\mathbf{n}_f).$$

De plus, en utilisant les hypothèses (6.1.2.2) et (6.1.2.3), l'intégrale du solveur de Riemann dans l'expression du flux (6.1.2.10) n'est autre que

$$\int_{-\infty}^0 \mathbf{W}_{ndf}(\xi; \mathbf{U}_d, \mathbf{U}_c, \mathcal{P}_n, -\mathbf{n}_f) d\xi = \int_0^{\infty} \mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) d\xi.$$

On a formellement les relations

$$\frac{\overline{\mathbf{F}}_{ncf} + \overline{\mathbf{F}}_{ndf}}{2} = -\frac{1}{2} \left[(\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f + \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right],$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\mathbf{F}}_{ncf} - \overline{\mathbf{F}}_{ndf}}{2} &= \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \left(\int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi - \int_0^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \overline{\Delta \mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} \cdot \mathbf{n}_f, \end{aligned}$$

En remarquant que

$$\overline{\mathbf{F}}_{nf}^{\pm} = \frac{\overline{\mathbf{F}}_{ncf} - \overline{\mathbf{F}}_{ndf}}{2} \mp \frac{\overline{\mathbf{F}}_{ncf} + \overline{\mathbf{F}}_{ndf}}{2},$$

on obtient l'expression du flux $\overline{\mathbf{F}}_{nf}^{\pm}$ donnée dans la proposition. \square

Il est alors possible, de la même manière que pour le cadre unidimensionnel, d'écrire (6.1.2.7) sous les formes intéressantes suivantes

- La première

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\overline{\mathbf{H}}_{ncf} + \frac{1}{2} \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} \cdot \mathbf{n}_f \right), \quad (6.1.2.11)$$

avec

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{H}}_{ncf} = & \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \left(\int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi - \int_0^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right) \right] \\ & - \frac{1}{2} \left[(\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P} \Delta \mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f + \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right]. \end{aligned}$$

et le terme non-conservatif défini par (6.1.2.9).

- La seconde

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| (\bar{\mathbf{H}}_{nf} - \bar{\mathbf{E}}_{nf}), \quad (6.1.2.12)$$

avec

$$\bar{\mathbf{H}}_{nf} = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \left(\int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi - \int_0^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right) \right],$$

et

$$\bar{\mathbf{E}}_{nf} = \frac{1}{2} \left[\Delta \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_f + \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi \right].$$

Les deux formes sont exactement les mêmes que celles données dans le cas unidimensionnel (6.1.1.12) et (6.1.1.13), sauf que le solveur de Riemann a maintenant une dépendance nodale. Dans le seconde, la contribution du terme non-conservatif n'est pas visible a priori, mais elle est néanmoins pris en compte dans le solveur de Riemann.

6.1.2.1 Stabilité

Nous allons maintenant énoncer la condition de stabilité du schéma défini par (6.1.2.4) et (6.1.2.5).

Proposition 9

Soit ξ_{ncf}^{\min} un réel positif tel que $\forall \xi \leq -\xi_{ncf}^{\min}, \mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_c = 0$. Le schéma défini par (6.1.2.4) et (6.1.2.5) est stable sous la condition suivante

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{1}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \xi_{ncf}^{\min} \right).$$

Démonstration. D'après (6.1.2.4) et (6.1.2.5), il vient que

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} \int_{-\infty}^0 |\Gamma_{ncf}| (\mathbf{W}_{ncf}(\xi) - \mathbf{U}_c) d\xi.$$

Cette définition de ξ_{ncf}^{\min} donne

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \xi_{ncf}^{\min} \right) \mathbf{U}_c + \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \int_{-\xi_{ncf}^{\min}}^0 \mathbf{W}_{ncf}(\xi) d\xi.$$

De cette dernière équation, on peut déduire que si \mathbf{U}_c et \mathbf{W}_{ncf} sont inclus dans l'ensemble des solutions admissibles, alors \mathbf{U}_c^{n+1} est également admissible et le schéma est stable, à condition que

$$\forall c, \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \xi_{ncf}^{\min} \leq 1.$$

□

6.1.2.2 Conservation

Il est nécessaire de définir le sens d'un schéma conservatif dans le contexte présent, où le système étudié n'est pas conservatif.

Définition 16 (Schéma conservatif)

Le schéma volumes finis (6.1.2.7) pour le système non-conservatif (6.1.2.1) est conservatif si et seulement si

$$\sum_c |\Omega_c| \mathbf{U}_c^{n+1} = \sum_c |\Omega_c| \mathbf{U}_c^{n+1} - \Delta t \sum_c \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

Cette définition est cohérente avec la définition de la conservation sans terme non-conservatif.

Le schéma de type Godunov multidimensionnel peut être conservatif dans un sens non-classique, c'est-à-dire $\overline{\mathbf{F}}_{ncf} + \overline{\mathbf{F}}_{ndf} \neq 0$. Cette idée a été utilisée pour construire des schémas pour l'hydrodynamique lagrangienne [DM05, MABO07], et formalisée comme définissant une nouvelle classe de schémas de type Godunov dans [GCLM22]. Nous allons d'abord énoncer la consistance non-classique du solveur de Riemann avec la forme intégrale, et montrer que le flux associé au solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} induit un schéma de type Godunov multidimensionnel où les flux sont **conservatifs non-classiques**.

Définition 17 (Consistance non-classique avec la forme intégrale)

Le solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} est consistant de manière non-classique avec la forme intégrale (6.1.2.1) si et seulement si il existe une approximation du terme non-conservatif $\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}$ telle que

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_0(\xi)) d\xi + (\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f \right] = 0, \quad (6.1.2.13)$$

Dans ce cas, (6.1.2.4) est appelé **schéma de type Godunov conservatif non-classique**.

Proposition 10 (Flux conservatif non-classique)

Si le solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} est consistant de manière non-classique avec la forme intégrale, alors le schéma de type Godunov (6.1.2.4) induit par le solveur de Riemann possède des **flux conservatifs non-classiques** associés à \mathbf{W}_{ncf} et $\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}$.

Démonstration. Ici, le flux est toujours non-conservatif au sens classique. D'après la définition d'un schéma conservatif (voir Def. 16), il suffit d'avoir l'égalité suivante

$$\sum_c \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \overline{\mathbf{F}}_{ncf} = 0,$$

qui s'écrit, en manipulant les sommes

$$\sum_n \sum_{c \in \mathcal{C}(n)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \bar{\mathbf{F}}_{ncf} = 0.$$

Ici, $\mathcal{C}(n)$ désigne l'ensemble des cellules attachées au nœud n . Une condition suffisante pour obtenir un schéma conservatif est que le flux vérifie la relation

$$\forall n \in \mathcal{N}(c), \sum_{c \in \mathcal{C}(n)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \bar{\mathbf{F}}_{ncf} = 0.$$

En utilisant les flux $\bar{\mathbf{F}}_{nf}^\pm$ introduit précédemment et défini par (6.1.2.8), et en remarquant que sommer sur les cellules $c \in \mathcal{C}(n)$ attachées au nœud n puis sommer sur les faces $f \in \mathcal{SF}(nc)$ de la cellule c attachées au nœud n est équivalent à sommer directement sur toutes sur les faces $f \in \mathcal{SF}(n)$ attachées au nœud, l'équation précédente devient

$$\forall n \in \mathcal{N}(c), \sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{ncf}| \left(\bar{\mathbf{F}}_{nf}^+ - \bar{\mathbf{F}}_{nf}^- \right) = 0. \quad (6.1.2.14)$$

Ici, $\bar{\mathbf{F}}_{nf}^-$ et $\bar{\mathbf{F}}_{nf}^+$ sont les flux de chaque côté de la face f attachée au nœud n , et défini par (6.1.2.8). Leur dépendance au paramètre nodal \mathcal{P}_n fait qu'a priori, ces flux ne sont pas égaux. La relation (6.1.2.14) exprime le fait que la conservation peut être obtenue si, autour de chaque nœud, la somme des flux sur les faces attachées à ce nœud est nulle. La différence des flux dans (6.1.2.14) permet d'aboutir à la relation de conservation non-classique (6.1.2.13). \square

La réciproque est probablement vraie dans notre configuration en dimension deux, mais difficile à justifier. On remarque facilement que la définition de la consistance avec la forme intégrale (voir Def. 9) comme défini par [HLvL83] implique la consistance non-classique avec la forme intégrale.

6.1.2.3 Entropie

L'extension de la conservation non-classique s'étend de manière naturelle à la définition d'un schéma entropique non-classique.

Définition 18 (Flux d'entropie associé au solveur de Riemann multidimensionnel)

Soit $\bar{\mathbf{q}}_{ncf} = \bar{\mathbf{q}}_{ncf}(\eta_c, \eta_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f)$ le flux d'entropie associé au solveur de Riemann. Par intégration spatio-temporelle, ce flux est donné par

$$\bar{\mathbf{q}}_{ncf} = \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{n}_f - \int_{-\infty}^0 (\eta(\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n})) - \eta_c) d\xi - (\overline{\pi \Delta \beta})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

où $(\overline{\pi \Delta \beta})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f$ est une approximation du terme non-conservatif telle que

$$\Delta t \int_{-\infty}^0 \pi(\mathbf{U}) \partial_n \beta(\mathbf{U}) d\xi \simeq (\overline{\pi \Delta \beta})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

On a ainsi le Lemme suivant.

Lemme 4

Cette définition équivaut à

$$\int_{-\infty}^0 (\eta(\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n})) - \eta_c) d\xi = - (\bar{\mathbf{q}}_{ncf} - \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{n}_f + \overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

On peut écrire (6.1.2.4) sous la forme

$$\eta_c^{n+1} \leq \eta_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\bar{\mathbf{q}}_{ncf} + (\overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f \right).$$

Le schéma de type Godunov multidimensionnel peut être entropique dans un sens non-classique, c'est-à-dire $\bar{\mathbf{q}}_{ncf} + \bar{\mathbf{q}}_{ndf} \geq 0$. Cependant, le résultat suivant propose d'obtenir un schéma globalement entropique.

Définition 19 (Consistance non-classique avec la forme intégrale de l'inégalité d'entropie)

Le solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} est consistant de manière non-classique avec la forme intégrale (6.1.2.1) si et seulement si il existe une approximation consistante du terme non-conservatif $\overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}}$ telle que

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\eta(\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n})) - \eta_0) d\xi + (\Delta \mathbf{q} + \overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}}) \cdot \mathbf{n}_f \right] \leq 0,$$

avec $\eta_0 = \eta(\mathbf{U}_0(\xi))$. Dans ce cas, (6.1.2.4) est appelé schéma de type Godunov entropique non-classique.

Proposition 11 (Flux entropique non-classique)

Le schéma de type Godunov (6.1.2.4) induit par le solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} associé à l'approximation du terme non-conservatif $\overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}}$ est consistant de manière non-classique avec la forme intégrale de l'inégalité d'entropie si

$$\bar{\mathbf{q}}_{ndf} + \bar{\mathbf{q}}_{ncf} \geq 0.$$

Démonstration. La démonstration se fait identiquement à celle de la conservation. \square

6.1.2.4 Solution équilibre

L'extension de la solution d'équilibre du cas unidimensionnel au cas multidimensionnel est la suivante.

Définition 20 (Solution d'équilibre)

Nous appelons *solution d'équilibre* une séquence $(\mathbf{U}_c)_i$ qui vérifie à chaque interface

$$\mathbf{U}_{ncf} = \mathbf{U}_c.$$

Définition 21 (Solution d'équilibre fort)

Nous appelons *solution d'équilibre fort* une séquence $(\mathbf{U}_c)_i$ qui vérifie

$$\begin{cases} \mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}) = \mathbf{U}_c & \text{si } \xi \leq 0, \\ \mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}) = \mathbf{U}_d & \text{si } \xi > 0. \end{cases}$$

Proposition 12

Dans le cas multidimensionnel, les solutions d'équilibre et d'équilibre fort vérifient la relation de consistance

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| (\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}} \Delta \mathbf{B}) \cdot \mathbf{n}_f = 0. \quad (6.1.2.15)$$

Démonstration. La démonstration de ce résultat se fait de manière identique à celle du cas unidimensionnel. \square

Avec le résultat précédent, on se rend compte de l'importance de la définition de l'approximation du terme non-conservatif $\overline{\mathbf{P}}$. Si $\overline{\mathbf{P}}$ est définie aux faces, alors l'équilibre est vérifié sur chaque face comme dans le cas unidimensionnel. La proposition précédente est triviale. Cependant, construire une matrice $\overline{\mathbf{P}}$ aux faces vérifiant l'équilibre aux nœuds (6.1.2.15) mais ne vérifiant pas l'équilibre sur les faces semble impossible. Il est aussi possible de définir $\overline{\mathbf{P}}$ au nœud. Un tel choix est possible puisque la matrice peut elle même dépendre du paramètre nodal \mathcal{P}_n . Elle dépend ainsi du paramètre nodal et de toutes les cellules attachées au nœud. De cette manière, l'équilibre est vraiment obtenu aux nœuds. On a alors

$$\overline{\mathbf{P}} = \overline{\mathbf{P}}_n (\dots, \mathbf{U}_c, \mathbf{U}_d, \dots; \mathcal{P}_n).$$

Un tel choix n'a pas de conséquence sur les définitions et résultats précédents, mais permettra de construire des schémas numériques différents.

6.1.3 Solveur de Riemann simple

Les définitions précédentes des schémas de type Godunov sont basées sur la notion de solveur de Riemann. A partir de là, tout type de solveur de Riemann exact ou approché peut être utilisé, comme le solveur HLL [HLvL83] ou HLLC [TSS94], le solveur de Roe [Roe81] ou le solveur d'Osher [EO81] (voir [Tor97]). Pour construire notre schéma numérique, nous utilisons un solveur de Riemann simple, appelé solveur simple. Cette notion a été introduite par Gallice [Gal00, Gal02b, Gal02a, Gal03]. Il s'agit de la forme la plus simple de solveur de Riemann approché. Des solveurs célèbres comme Roe [Roe81], HLL [HLvL83] ou HLLC [TSS94] sont des solveurs de Riemann simples.

Nous rappelons d'abord la définition d'un solveur simple, donnée dans [Gal00, Gal02b, Gal02a, Gal03], puis nous les utiliserons d'abord dans le cadre unidimensionnel et ensuite multidimensionnel.

Définition 22 (Solveur simple)

Un solveur simple est un solveur de Riemann défini simplement par $(m + 1)$ états constants $(\mathbf{U})_{k=1}^{m+1}$ séparés par des discontinuités de pente $(\lambda)_{k=1}^m$, c'est-à-dire

$$\mathbf{W}(x/t; \mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r) = \begin{cases} \mathbf{U}_l & \text{si } x/t \leq \lambda_1, \\ \mathbf{U}_k & \text{si } \lambda_{k-1} < x/t \leq \lambda_k, \quad k = 2, m, \\ \mathbf{U}_r & \text{si } \lambda_m < x/t. \end{cases}$$

6.1.3.1 Cadre unidimensionnel

Nous pouvons alors caractériser le schéma de type Godunov induit par un solveur simple.

Proposition 13 ([Gal02a])

Un solveur simple induit un schéma de type Godunov si et seulement si

$$\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}^- = \Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} - \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k. \quad (6.1.3.1)$$

Dans le cas où les flux sont conservatifs au sens classique, ils sont donnés par

$$\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \mathbf{U}_k - \frac{1}{4} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^+ - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^- \right).$$

Le schéma numérique induit s'écrit

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{\mathbf{F}}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^+ \right).$$

De plus, un solveur simple induit un schéma de type Godunov entropique si et seulement si

$$\overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}}^- \leq \Delta \mathbf{q} + \overline{\boldsymbol{\pi}\Delta\boldsymbol{\beta}} - \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \eta_k.$$

Dans le cas où les flux sont entropiques au sens classique, ils sont donnés par

$$\overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{q}_i + \mathbf{q}_{i+1}) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \eta_k - \frac{1}{4} \left((\overline{\boldsymbol{\pi}\Delta\boldsymbol{\beta}})_{i+\frac{1}{2}}^+ - (\overline{\boldsymbol{\pi}\Delta\boldsymbol{\beta}})_{i+\frac{1}{2}}^- \right).$$

Le schéma numérique induit s'écrit

$$\eta_i^{n+1} \leq \eta_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{q}}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{\mathbf{q}}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\boldsymbol{\pi}\Delta\boldsymbol{\beta}})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{\boldsymbol{\pi}\Delta\boldsymbol{\beta}})_{i-\frac{1}{2}}^+ \right).$$

Démonstration. D'après la définition d'un solveur simple, on a

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx &= - \sum_{k=1}^m \lambda_k^- \delta \mathbf{U}_k, \\ \int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+1}} (\mathbf{W}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{U}_0) dx &= - \sum_{k=1}^m \lambda_k^+ \delta \mathbf{U}_k. \end{aligned}$$

où $\lambda^+ = \max(\lambda, 0)$ et $\lambda^- = \min(\lambda, 0)$. En injectant ces relations dans la définition du flux numérique $\overline{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}}$ (6.1.1.9), la forme du flux est obtenu. Les mêmes calculs peuvent être fait pour le flux d'entropie. \square

Les deux formes intéressantes (6.1.1.12) et (6.1.1.13) sont données ci-dessous

- La première est

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{\mathbf{H}}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}} + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}} \right). \quad (6.1.3.2)$$

avec $\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}$ le flux donné par

$$\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \mathbf{U}_k.$$

Cette forme n'est pas nouvelle et a déjà été introduite dans [Gal02b, Gal02a]. Le flux est conservatif dans le sens où $\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}^\pm = \overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}$.

- La seconde est

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{\mathbf{H}}_{i-\frac{1}{2}} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{E}}_{i+\frac{1}{2}} + \overline{\mathbf{E}}_{i-\frac{1}{2}} \right).$$

avec $\overline{\mathbf{E}}_{i+\frac{1}{2}}$ le flux donné par

$$\overline{\mathbf{E}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\Delta \mathbf{F} - \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k \right).$$

L'utilisation d'un solveur simple a rendu cette forme très attrayante du point de vue de la mise en œuvre dans un code de calcul. En effet, il suffit de calculer les états intermédiaires et le schéma est simple. Le terme non-conservatif est toujours présent, mais il est contenu seulement dans les états intermédiaires. De plus, dans le cas sans produit non-conservatif, les flux $\overline{\mathbf{E}}_{i+\frac{1}{2}}$ s'annulent et le schéma a exactement une forme de type Godunov.

6.1.3.2 Cadre multidimensionnel

Dans le cas d'un schéma de type Godunov multidimensionnel, nous avons la proposition suivante.

Proposition 14

Un solveur simple induit un schéma type Godunov conservatif non-classique si et seulement si

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{nf}| \left[(\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k \right] = 0.$$

Dans le cas où les flux sont conservatifs au sens non-classique, le schéma de type Godunov induit est donné par

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\overline{\mathbf{F}}_{ncf} + \frac{1}{2} (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f \right),$$

avec

$$\overline{\mathbf{F}}_{ncf} = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \mathbf{U}_k - \overline{\Delta(\mathbf{P}\Delta\mathbf{B})} \right] - \frac{1}{2} \left[(\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k \right].$$

et

$$\overline{\Delta(\mathbf{P}\Delta\mathbf{B})} = \frac{1}{2} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})^- - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})^+ \right)_{nf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

En outre, un solveur simple induit un schéma type Godunov conservatif entropique non-classique si et seulement si

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{nf}| \left[(\Delta \mathbf{q} + \overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}}) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \eta_k \right] \leq 0.$$

Dans le cas où les flux sont conservatifs au sens non-classique, le schéma de type Godunov induit est donné par

$$\eta_c^{n+1} \leq \eta_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\bar{\mathbf{q}}_{ncf} + \frac{1}{2} (\overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f \right),$$

avec

$$\bar{\mathbf{q}}_{ncf} = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{q}_c + \mathbf{q}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \eta_k - \overline{\Delta(\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta})} \right] - \frac{1}{2} \left[- \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k + (\Delta \mathbf{F} + \overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}}) \cdot \mathbf{n}_f \right].$$

et

$$\overline{\Delta(\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta})} = \frac{1}{2} \left((\overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}})^- - (\overline{\boldsymbol{\pi} \Delta \boldsymbol{\beta}})^+ \right)_{nf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

Démonstration. La démonstration est analogue au cadre unidimensionnel. \square

Le schéma numérique précédent, écrit sous les deux formes (6.1.2.11) et (6.1.2.12), est donné par

- La première forme

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\overline{\mathbf{H}}_{ncf}^- + \frac{1}{2} \overline{\mathbf{P} \Delta \mathbf{B}} \cdot \mathbf{n}_f \right),$$

avec

$$\overline{\mathbf{H}}_{ncf}^- = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \mathbf{U}_k \right] - \frac{1}{2} \left[- \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k + (\Delta \mathbf{F} + \overline{\mathbf{P} \Delta \mathbf{B}}) \cdot \mathbf{n}_f \right]. \quad (6.1.3.3)$$

Le schéma type Godunov multidimensionnel est exactement de la même forme que dans le cas unidimensionnel, sauf que le flux a un second terme de diffusion provenant de la conservation dans le sens non-classique.

- La seconde forme

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| (\overline{\mathbf{H}}_{ncf} - \overline{\mathbf{E}}_{ncf}),$$

avec

$$\overline{\mathbf{H}}_{ncf} = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d) \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \mathbf{U}_k \right],$$

et

$$\overline{\mathbf{E}}_{ncf} = \frac{1}{2} \left[- \sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{U}_k + \Delta \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_f \right].$$

Cette dernière forme est très séduisante. Le flux est composé du flux unidimensionnel classique, plus une seconde partie provenant de la condition de conservation non-classique. Même sans terme non-conservatif, cette dernière partie ne s'annule pas. Comme dans le cas unidimensionnel, l'implémentation du schéma sous cette forme ne nécessite que le calcul des états intermédiaires.

Si la dépendance nodale du solveur de Riemann est abandonnée, le schéma précédent est exactement le schéma unidimensionnel, puisqu'il devient conservatif au sens classique.

6.1.4 Application aux systèmes généraux de la mécanique des fluides

Les systèmes généraux de mécanique des fluides sont très souvent décrits par un système hyperbolique de la forme (6.1.1.1) dans le cas unidimensionnel et (6.1.2.1) dans le cas multidimensionnel. Les équations de Saint-Venant avec fond, les équations d'Euler avec gravité ou les équations de la Magnétohydrodynamique sont des systèmes bien étudiés qui s'inscrivent dans ce cadre. Un certain nombre d'hypothèses sont formulées dans le contexte des systèmes généraux de dynamique des gaz. Ces hypothèses générales permettront de construire des schémas de type Godunov basés sur des solveurs de Riemann simples dans la forme lagrangienne des équations. De tels systèmes sont donnés par

$$\partial_\tau \mathbf{V} + \partial_M \mathbf{G}(\mathbf{V}) + \mathbf{P}(\mathbf{V}) \partial_M \mathbf{B}(\mathbf{V}) = 0, \quad (6.1.4.1)$$

où la première équation du système précédent n'est rien d'autre que la loi de conservation du volume $\vartheta = 1/\rho$

$$\partial_\tau \vartheta - \partial_M u_n = 0, \quad M = \int \rho dx \quad \text{et} \quad \tau = t, \quad (6.1.4.2)$$

avec ρ la densité. Supposons qu'un solveur simple puisse être défini en suivant la [Def. 22](#)

$$\begin{cases} \mathbf{V}_l & \text{si } M/\tau \leq \lambda_1, \\ \mathbf{V}_k & \text{si } \lambda_{k-1} < M/\tau \leq \lambda_k, \quad k = 2, m, \\ \mathbf{V}_r & \text{si } \lambda_m < M/\tau. \end{cases}$$

Ce solveur est supposé satisfaire les propriétés (H1) et (H2) suivantes [[Gal00](#), [Gal03](#)]

$$\delta u_{n,k} + \lambda_k \delta \vartheta_k = 0, \quad (H1). \quad (6.1.4.3)$$

L'hypothèse (H1) n'est rien d'autre que la forme discrète de (6.1.4.2). Elle est naturelle car l'équation de conservation du volume est linéaire et permet notamment de faire le lien entre les solveurs Eulérien et Lagrangien [[Gal00](#), [Gal03](#)]. De plus, (H2) est une hypothèse naturelle supposant que le volume de chaque état intermédiaire ne peut pas être négatif.

$$\vartheta_k \geq 0, \quad k = 1, m + 1, \quad (H2).$$

Le terme non-conservatif doit donc remplir la condition (H3) [[Gal02a](#)]

$$(\overline{\mathbf{P}} \Delta \mathbf{B})_\vartheta = 0, \quad (H3),$$

où $(\bullet)_\bullet$ indique l'équation de la quantité \bullet du système (6.1.4.1). Cela signifie que le terme non-conservatif n'agit pas sur l'équation du volume.

Ces propriétés étant supposées vraies, il sera alors possible de déterminer les états intermédiaires du solveur simple. Ensuite, des conditions explicites sur les pentes du solveur garantiront la positivité des états intermédiaires. Puisque, pour les schémas de type Godunov, la solution donnée après un pas de temps est une combinaison convexe des états intermédiaires, cette positivité permet de garantir que la solution reste dans l'ensemble des solutions admissibles, sous une condition explicite sur le pas de temps.

6.2 Application au système à cinq équations avec tension de surface

Maintenant que la théorie du schéma de type Godunov dans le contexte d'un système de loi de conservation avec un terme non-conservatif est présentée dans les cadres unidimensionnel et multidimensionnel, les résultats sont appliqués au système à cinq équations avec tension de surface en utilisant le modèle CSF. Cependant, ils peuvent être appliqués à divers systèmes hyperboliques avec un terme non-conservatif, tels que les équations de Saint-Venant avec fond, les équations d'Euler avec la gravité, le système de Kapila, le modèle à sept équations de Baer & Nunziato, ou encore la Magnétohydrodynamique [Gal00, Gal02b, Gal03, ACR12, Pel17, CGLM21, GCLM22, Cha22, Gal23, DGCC⁺23].

6.2.1 Rappel des équations

Le système à cinq équations avec la force de tension de surface sous la forme CSF s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho y) + \nabla \cdot (\rho y \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \sigma \kappa \nabla z, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) = \sigma \kappa \nabla z \cdot \mathbf{u}, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = 0. \end{array} \right.$$

Dans notre l'approche de décomposition Lagrange-Transport, le système étudié dans l'étape **Lagrange** est donné en variables lagrangiennes par

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \partial_t y = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p = \vartheta \sigma \kappa \nabla z, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p \mathbf{u}) = \vartheta \sigma \kappa \nabla z \cdot \mathbf{u}, \\ \partial_t z = 0. \end{array} \right. \quad (6.2.1.1)$$

Ici, nous allons construire un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann simple. Ce solveur sera dérivé à partir de la résolution d'un problème de Riemann approché dans le repère normal à une face du maillage. Le flux numérique ainsi construit sera consistant avec le système associé à la normale $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$

$$\rho \partial_t \mathbf{V} + \partial_n \mathbf{G}(\mathbf{V}) + \mathbf{P}(\mathbf{V}) \partial_n \mathbf{B}(\mathbf{V}) = 0,$$

avec $\mathbf{V}^T = (\vartheta, y, u, v, E, z)$, $\mathbf{G}(\mathbf{V})^T = (-u, 0, pn_x, pn_y, p\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 0)$, $\mathbf{B}^T = (0, 0, z, z, z, 0)$ et

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma\kappa n_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sigma\kappa n_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma\kappa \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On rappelle que, en supposant le terme lié aux effets de tension de surface du premier ordre, c'est-à-dire que la courbure est fixe et ne dépend plus de la fraction volumique, ce système est hyperbolique et possède comme valeurs propres $(-\rho c, 0, 0, 0, \rho c)$ avec c la vitesse du son. Nous souhaitons alors développer un schéma équilibre, qui permette de préserver les solutions stationnaires, en particulier la loi de Laplace.

6.2.2 Solveur de Riemann simple lagrangien : cas unidimensionnel

Un schéma est dit "équilibré" ou "bien équilibré" s'il préserve les états stationnaires. Dans notre cas, ces états sont donnés de manière continue par $\mathbf{u} = 0$ et $\nabla p = \sigma\kappa\nabla z$, ce qui correspond à la loi de Laplace. Une prise en compte naïve des termes non-conservatifs, c'est-à-dire, une simple discrétisation centrée de $\sigma\kappa\nabla z$, ne permet pas de vérifier de manière discrète la loi de Laplace donnée par $\mathbf{u} = 0$ et $\Delta p = \sigma\kappa\Delta z$. Une telle discrétisation génère alors des courants parasites, même si la courbure est exactement calculée. Nous allons donc construire un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann simple, en prenant soin de vérifier les conditions d'équilibre. Dans la suite, nous considérons $\sigma = 1$ par souci de clarté. De plus, les relations sur les équations sur la fraction massique et volumique y et z étant triviales, elles seront omises.

6.2.2.1 Construction du solveur de Riemann lagrangien

Soit $\mathbf{W}(x/t; \mathbf{V}_l, \mathbf{V}_r)$ une approximation du problème de Riemann défini par le système (6.2.1.1) à chaque interface entre les états gauche et droit $\mathbf{V}_l, \mathbf{V}_r$. La fonction autosimilaire \mathbf{W} consiste en quatre états intermédiaires séparés par des discontinuités se propageant à la vitesse $-\lambda^-\vartheta_l$, 0 et $\lambda^+\vartheta_r$ (voir Fig. 6.4). \mathbf{W} est défini par

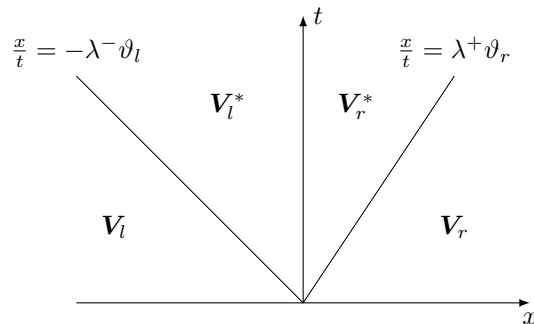


Fig. 6.4. Solveur de Riemann pour le système (6.2.1.1).

$$\mathbf{W}(x/t; \mathbf{V}_l, \mathbf{V}_r) = \begin{cases} \mathbf{V}_l & \text{si } x/t \leq -\lambda^- \vartheta_l, \\ \mathbf{V}_l^* & \text{si } -\lambda^- \vartheta_l < x/t \leq 0, \\ \mathbf{V}_r^* & \text{si } 0 < x/t \leq \lambda^+ \vartheta_r, \\ \mathbf{V}_r & \text{si } \lambda^+ \vartheta_r < x/t. \end{cases}$$

Dans la suite, on utilisera parfois la notation $\lambda^- = \lambda_l$ et $\lambda^+ = \lambda_r$. Tout d'abord, la propriété (H1) (6.1.4.3) étant supposée vraie, on a

$$\begin{aligned} u_l^* - \lambda^- \vartheta_l^* &= u_l - \lambda^- \vartheta_l, \\ u_r^* + \lambda^+ \vartheta_r^* &= u_r + \lambda^+ \vartheta_r, \\ u_l^* &= u_r^*. \end{aligned} \tag{6.2.2.1}$$

Les vitesses intermédiaires des états gauche et droit sont égales, ce qui nous permet d'écrire $u_l^* = u_r^* = u^*$. Maintenant, nous introduisons les flux $\overline{\mathbf{G}}_s = (-u^*, 0, \overline{p}_s, \overline{p}u_s, 0)^t$, $s = l, r$. Si le solveur de Riemann est de type Godunov pour le système (6.2.1.1) alors les relations (6.1.3.1) donnent

$$\begin{cases} -\lambda^-(\vartheta_l^* - \vartheta_l) + \lambda^+(\vartheta_r - \vartheta_r^*) = -\Delta u, \\ -\lambda^-(u_l^* - u_l) + \lambda^+(u_r - u_r^*) = \Delta p - \overline{\kappa \Delta z}, \\ -\lambda^-(E_l^* - E_l) + \lambda^+(E_r - E_r^*) = \Delta(pu) - \overline{\kappa u \Delta z}. \end{cases} \tag{6.2.2.2}$$

D'après (6.2.2.1) et (6.2.2.2) les expressions de u^* , ϑ_l^* et ϑ_r^* peuvent être déduites

$$\begin{aligned} u^* &= \frac{\lambda^+ u_r + \lambda^- u_l}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\Delta p - \overline{\kappa \Delta z}}{\lambda^+ + \lambda^-}, \\ \vartheta_l^* &= \vartheta_l - \frac{1}{\lambda^-(\lambda^- + \lambda^+)} (\Delta p - \overline{\kappa \Delta z} - \lambda^+ \Delta u), \\ \vartheta_r^* &= \vartheta_r + \frac{1}{\lambda^+(\lambda^- + \lambda^+)} (\Delta p - \overline{\kappa \Delta z} + \lambda^- \Delta u). \end{aligned}$$

A partir des équations de flux (6.1.1.6), nous avons les relations à gauche et à droite

$$\begin{cases} u^* = u_l + \lambda^-(\vartheta_l^* - \vartheta_l), \\ \overline{p}_l = p_l - \lambda^-(u^* - u_l) + (\overline{\kappa \Delta z})_l, \\ \overline{p}u_l = p_l u_l - \lambda^-(E_l^* - E_l) + (\overline{\kappa u \Delta z})_l, \end{cases} \quad \begin{cases} u^* = u_r - \lambda^+(\vartheta_r^* - \vartheta_r), \\ \overline{p}_r = p_r + \lambda^+(u^* - u_r) - (\overline{\kappa \Delta z})_r, \\ \overline{p}u_r = p_r u_r + \lambda^+(E_r^* - E_r) - (\overline{\kappa u \Delta z})_r, \end{cases}$$

En faisant l'hypothèse sur la discrétisation du flux d'énergie totale que $\overline{p}u_s = \overline{p}_s u^*$ et $\overline{\kappa u \Delta z}_s = \overline{\kappa \Delta z}_s u^*$, $s = l, r$, les états intermédiaires du solveur de Riemann sont alors entièrement caractérisés. On a alors la remarque suivante.

Remarque 10

Le solveur de Riemann obtenu pour le système à cinq équations avec tension de surface est exactement l'extension du solveur de Peluchon \mathcal{E} al. sans tension de surface [PGM17], et du solveur de

Gallice dans le contexte de la dynamique des gaz [Gal03]. On peut résumer \mathbf{W} à

$$\mathbf{W}(x/t; \mathbf{V}_l, \mathbf{V}_r) = \begin{cases} \mathbf{V}_l & \text{si } x/t \leq -\lambda^- \vartheta_l, \\ \mathbf{V}_l^* = \mathbf{V}_l + \phi_- R_- & \text{si } -\lambda^- \vartheta_l < x/t \leq 0, \\ \mathbf{V}_r^* = \mathbf{V}_r - \phi_+ R_+ & \text{si } 0 < x/t \leq \lambda^+ \vartheta_r, \\ \mathbf{V}_r & \text{si } \lambda^+ \vartheta_r < x/t, \end{cases} \quad (6.2.2.3)$$

où

$$R_{\pm} = (-1, 0, \pm \lambda_{\pm}, p_{1-\alpha} \pm \lambda_{\pm} u_{\alpha}, 0)^t, \\ \phi_{\pm} = \frac{\Delta p - \overline{\kappa \Delta z} \pm \lambda_{\mp} \Delta u}{\lambda_- \lambda_+ + \lambda_{\pm}^2}.$$

et

$$\overline{\kappa \Delta z} = (\overline{\kappa \Delta z})_l + (\overline{\kappa \Delta z})_r.$$

avec $\alpha = \lambda^- / (\lambda^+ + \lambda^-)$ et la notation $x_{\alpha} = (1 - \alpha)x_r + \alpha x_l$.

6.2.2.2 Schéma global

A partir du solveur de Riemann, nous pouvons calculer la solution donnée après un pas de temps

$$\mathbf{V}_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{V}_{i-1}, \mathbf{V}_i \right) dx + \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{V}_i, \mathbf{V}_{i+1} \right) dx \right),$$

c'est-à-dire, d'après (6.1.3.2)

$$\mathbf{V}_i^{n+1} = \mathbf{V}_i^n - \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}}^n - \overline{\mathbf{H}}_{i-\frac{1}{2}}^n \right) - \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}}^n + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \quad (6.2.2.4)$$

avec

$$\overline{\mathbf{H}}_{i+\frac{1}{2}} = (-\bar{u}, 0, \bar{p}, \bar{p}\bar{u}, 0)_{i+\frac{1}{2}}^t,$$

et

$$(\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_{i+\frac{1}{2}} = -\overline{\kappa \Delta z} (0, 0, 1, \bar{u}, 0)_{i+\frac{1}{2}}^t.$$

où les flux de vitesse et de pression $\bar{u} = u^*$ et \bar{p} s'écrivent

$$\bar{u} = \frac{\lambda^+ u_r + \lambda^- u_l}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\Delta p - \overline{\kappa \Delta z}}{\lambda^+ + \lambda^-}, \\ \bar{p} = \frac{\lambda^- p_r + \lambda^+ p_l}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\lambda^+ \lambda^- \Delta u}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\overline{\kappa \Delta z} \lambda^- - \lambda^+}{2 \lambda^+ + \lambda^-}.$$

Le schéma global est donc

$$\begin{cases} \vartheta_i^{n+1} = \vartheta_i^n + \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n - \bar{u}_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \\ y_i^{n+1} = y_i^n, \\ u_i^{n+1} = u_i^n - \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{p}_{i+\frac{1}{2}}^n - \bar{p}_{i-\frac{1}{2}}^n \right) + \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\overline{\kappa \Delta z}_{i+\frac{1}{2}}^n + \overline{\kappa \Delta z}_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \\ E_i^{n+1} = E_i^n - \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{p}_{i+\frac{1}{2}}^n \bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n - \bar{p}_{i-\frac{1}{2}}^n \bar{u}_{i-\frac{1}{2}}^n \right) + \vartheta_i^n \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\overline{\kappa \Delta z}_{i+\frac{1}{2}}^n \bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n + \overline{\kappa \Delta z}_{i-\frac{1}{2}}^n \bar{u}_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \\ z_i^{n+1} = z_i^n. \end{cases}$$

Nous avons donc construit un schéma numérique basé sur un solveur de Riemann à quatre états, prenant en compte les termes non-conservatifs liés aux effets de tension de surface. Il nous reste à discrétiser le terme non-conservatif, afin de préserver les états stationnaires, ainsi qu'à déterminer des conditions sur les pentes du solveur de Riemann pour garantir la positivité des états intermédiaires.

6.2.2.3 Solutions équilibre

Jusqu'à présent, aucun choix n'a été fait quant à la discrétisation des termes non-conservatifs $\overline{P\Delta B}$. Dans notre cas, le choix naturel est de considérer $\overline{P\Delta B} = \overline{P}\Delta B$ où \overline{P} est la moyenne arithmétique

$$\overline{P}(U_i, U_{i+1}) = \frac{1}{2} (P(U_i) + P(U_{i+1})).$$

Cette approximation est consistante dans le sens où $\overline{P}(U, U) = P(U)$. On peut en déduire que

$$(\overline{\kappa\Delta z})_{i+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\kappa_i + \kappa_{i+1}}{2} \right) (z_{i+1} - z_i).$$

Proposition 15

Les solutions discrètes satisfaisant la loi de Laplace ($u = 0$, $\Delta p = \bar{\kappa}\Delta z$) sont solutions d'équilibre. De plus, le choix précédent permet de préserver les solutions d'équilibre $u = 0$, $\Delta\kappa = 0$ et $\Delta p = \kappa\Delta z$.

Démonstration. En utilisant la [Rem. 10](#), il est facile de démontrer que la loi de Laplace est une solution d'équilibre fort. Si la courbure est constante, on a $\bar{\kappa} = \kappa$. La relation $\Delta p = \kappa\Delta z$ est l'application de la [Prop. 7](#). \square

6.2.2.4 Conditions de positivité

Il existe différentes façons d'exhiber des conditions sur les pentes qui garantissent la positivité des états intermédiaires [[CGLM21](#)]. Pour garantir la positivité de la densité, on peut utiliser le fait que

$$\begin{aligned} \vartheta_l^* &= \frac{\lambda^-}{\lambda^- + \lambda^+} \left(\vartheta_l - \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z}{\lambda^{-2}} \right) + \frac{\lambda^+}{\lambda^- + \lambda^+} \left(\vartheta_l + \frac{\Delta u}{\lambda^-} \right), \\ \vartheta_r^* &= \frac{\lambda^-}{\lambda^- + \lambda^+} \left(\vartheta_r + \frac{\Delta u}{\lambda^+} \right) + \frac{\lambda^+}{\lambda^- + \lambda^+} \left(\vartheta_r + \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z}{\lambda^{+2}} \right). \end{aligned}$$

Ainsi, en s'assurant que les termes entre parenthèses sont positifs, les états intermédiaires de la fraction volumique sont positifs. Puisqu'un schéma de type Godunov est composé de combinaison convexe de d'états positifs, alors la solution est positive.

On peut aussi exhiber une condition sur l'énergie interne. En multipliant le flux de pression \bar{p}_s par $\frac{1}{2}(u^* + u_s)$, $s = l, r$, en le substituant au flux d'énergie totale $\bar{p}_s u^*$, $s = l, r$, et en utilisant la relation sur les états intermédiaires de la vitesse et du volume, on obtient

$$\varepsilon_s^* = \varepsilon_s - p_s(\vartheta_s^* - \vartheta_s) + \frac{\lambda_s^2}{2}(\vartheta_s^* - \vartheta_s)^2, \quad s = l, r. \quad (6.2.2.5)$$

Cette équation du second degré en $(\vartheta_s^* - \vartheta_s)$ permet de déduire que si le discriminant est négatif, alors $\varepsilon_s^* > 0$. Ainsi,

$$\varepsilon_s^* > 0 \text{ si } \lambda_s \geq \frac{p_s}{\sqrt{2\varepsilon_s}}, \quad s = l, r.$$

6.2. Application au système à cinq équations avec tension de surface

Dans le cas d'une équation de type gaz raide, l'équation précédente devient

$$\varepsilon_s^* > 0 \text{ si } \lambda_s \geq \sqrt{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \rho_s c_s \left(c_s - \frac{\gamma_s \pi_s}{\rho_s c_s} \right) \sqrt{\frac{\rho_s}{\rho_s c_s^2 + \gamma_s(\gamma_s - 1)\pi_s}}, \quad s = l, r.$$

Cependant, pour le système à cinq équations, l'hyperbolicité est assurée si $p + \pi > 0$ dans le cas de deux gaz raides. Puisque $p = \rho\varepsilon(\gamma - 1) - \gamma\pi$, on a

$$p + \pi > 0 \text{ si et seulement si } \varepsilon - \vartheta\pi > 0.$$

Puisque la fraction volumique ne varie pas lors de l'**étape Lagrange**, on a $\pi_s^* = \pi_s$. En utilisant (6.2.2.5), on a

$$\varepsilon_s^* - \vartheta_s^* \pi_s = \varepsilon_s - \vartheta_s \pi_s - (p_s + \pi_s)(\vartheta_s^* - \vartheta_s) + \frac{\lambda_s^2}{2} (\vartheta_s^* - \vartheta_s)^2, \quad s = l, r.$$

Cette fois, la vitesse du son est positive si

$$p_s^* + \pi_s > 0 \text{ si } \lambda_s \geq \frac{p_s + \pi_s}{\sqrt{2(\varepsilon_s - \vartheta_s \pi_s)}}, \quad s = l, r.$$

En utilisant l'équation d'état, on obtient

$$p_s^* + \pi_s > 0 \text{ si } \lambda_s \geq \sqrt{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \rho_s c_s, \quad s = l, r.$$

En regroupant les conditions de positivité du volume ϑ et de $p + \pi$, on en déduit que le choix des pentes λ_l et λ_r telles que

$$\lambda_l = \max \left(\rho_l c_l, \sqrt{\frac{|\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z|}{\vartheta_l}}, -\frac{\Delta u}{\vartheta_l} \right), \text{ et } \lambda_r = \max \left(\rho_r c_r, \sqrt{\frac{|-\Delta p + \bar{\kappa} \Delta z|}{\vartheta_r}}, -\frac{\Delta u}{\vartheta_r} \right),$$

permet de garantir que les états intermédiaires des volumes ainsi que la vitesse du son sont positifs.

Une autre méthode permettant de garantir la positivité des états intermédiaires, introduite par Gallice [Gal03] pour la dynamique des gaz et étendue dans [PGM17] pour le système à cinq équations sans tension de surface, est énoncée. Elle consiste à introduire le ratio des pentes $r = \lambda^+ / \lambda^-$ et se ramener à la résolution d'équations du second degré.

Proposition 16

Pour un $r = \lambda^+ / \lambda^-$ donné, nous avons les conditions de positivité exactes suivantes

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vartheta_l^* \geq 0 & \text{si } d_l \leq 0, \text{ ou si } d_l \geq 0 \text{ et } \lambda^- \geq \frac{-r\Delta u + \sqrt{d_l}}{2(1+r)\vartheta_l}, \\ \vartheta_r^* \geq 0 & \text{si } d_r \leq 0, \text{ ou si } d_r \geq 0 \text{ et } \lambda^+ \geq \frac{-\Delta u + \sqrt{d_r}}{2(1+r)\vartheta_r}, \\ (p + \pi)_l^* \geq 0 & \text{si } D_l \leq 0, \text{ ou si } D_l \geq 0 \text{ et } \lambda^- \geq \frac{r\Delta u (\Delta \bar{p} + \Pi_l + 2(1+r)\pi_l) + \sqrt{D_l}}{4(1+r)^2 \hat{\varepsilon}_l + 2r^2 (\Delta u)^2}, \\ (p + \pi)_r^* \geq 0 & \text{si } D_r \leq 0, \text{ ou si } D_r \geq 0 \text{ et } \lambda^+ \geq \frac{\Delta u (\Pi_r - r\Delta \bar{p} + 2(1+r)\pi_r) + \sqrt{D_r}}{4(1+r)^2 \hat{\varepsilon}_r + 2(\Delta u)^2}, \end{array} \right.$$

avec

$$\begin{aligned}
 \Delta\bar{p} &= \Delta p - \bar{\kappa}\Delta z, \\
 d_l &= r^2(\Delta u)^2 + 4(1+r)\vartheta_l(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z), \\
 d_r &= (\Delta u)^2 - 4r(1+r)\vartheta_r(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z), \\
 \Pi_l &= 2(p_r + rp_l) - (\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z), \\
 \Pi_r &= 2(p_r + rp_l) + r(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z), \\
 \hat{\varepsilon}_l &= \varepsilon_l - \vartheta_l\pi_l, \\
 \hat{\varepsilon}_r &= \varepsilon_r - \vartheta_r\pi_r, \\
 D_l &= r^2(\Delta u)^2(\Delta\bar{p} + \Pi_l + 2(1+r)\pi_l)^2 - 4\Delta\bar{p}(2(1+r)^2\hat{\varepsilon}_l + r^2(\Delta u)^2)(\Pi_l + 2(1+r)\pi_l), \\
 D_r &= (\Delta u)^2(\Pi_r - r\Delta\bar{p} + 2(1+r)\pi_r)^2 + 4r\Delta\bar{p}(2(1+r)^2\hat{\varepsilon}_r + (\Delta u)^2)(\Pi_r + 2(1+r)\pi_r).
 \end{aligned}$$

Démonstration. La preuve des conditions de positivité est donnée en annexe [Annexe C](#). \square

En pratique, les conditions précédentes sont utilisées pour calculer $\lambda^-(r)$, en supposant $r = 1$ ou $r = \frac{\rho_r c_r}{\rho_l c_l}$, alors

$$\lambda^- = K \max(\lambda^-(r), \rho_l c_l),$$

avec K une constante positive supérieure à 1. Enfin, la dernière pente est calculée par

$$\lambda^+ = K \max(r\lambda^-(r), \rho_r c_r).$$

Remarque 11

Dans le cas où les effets de tension de surface sont absents, c'est-à-dire $\bar{\kappa} = 0$, les conditions de positivité énoncées dans [\[PGM17\]](#) sont retrouvées.

Remarque 12

Les conditions de positivité présentées précédemment ont été obtenues en faisant l'hypothèse d'une discrétisation temporelle explicite. De manière générale, il n'est pas possible de dériver de telles conditions sur les pentes avec un schéma temporel implicite. De récents travaux ont cependant introduit une classe de schémas implicites inconditionnellement stables pour résoudre les équations de la dynamique des gaz [\[PdPD23\]](#).

Nous avons donc construit un schéma de type-Godunov basé sur un solveur simple pour résoudre le système à cinq équations avec tension de surface. Le schéma est positif, préserve les états stationnaires et est stable sous condition sur le pas de temps. Maintenant, nous allons étendre ce schéma au cadre multidimensionnel.

6.2.3 Solveur de Riemann simple lagrangien : cas multidimensionnel

Cette fois, nous sommes dans une configuration bidimensionnelle. La vitesse devient $\mathbf{u} = (u, v)^t$. Nous voulons construire un schéma pour le système [\(6.2.1.1\)](#).

6.2.3.1 Construction du solveur de Riemann lagrangien

Tout d'abord, la propriété (H1) (6.1.4.3) est à nouveau considérée comme vraie

$$\begin{aligned} u_{n,l}^* - \lambda^- \vartheta_l^* &= u_{n,l} - \lambda^- \vartheta_l, \\ u_{n,r}^* + \lambda^+ \vartheta_r^* &= u_{n,r} + \lambda^+ \vartheta_r, \\ u_{n,l}^* &= u_{n,r}^*, \end{aligned} \quad (6.2.3.1)$$

avec $u_{n,s} = \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}$, $s = l, r$ où $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{cd}$ est la normale sortante de la cellule c . Cela permet de définir $u_{n,l}^* = u_n^* = u_{n,r}^*$. Deuxièmement, en supposant que la vitesse tangentielle ne change que de part et d'autre de la discontinuité de contact, on obtient

$$u_{t,l}^* = u_{t,l}, \quad u_{t,r}^* = u_{t,r}.$$

avec $u_{t,s} = \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{t}$, $s = l, r$ où \mathbf{t} est le vecteur orthogonale à \mathbf{n} . Nous introduisons les flux gauche et droit

$$\overline{\mathbf{G}}_{nsf} = (-u_n^*, 0, \overline{p}_s n_x, \overline{p}_s n_y, \overline{p}_s u_n^*, 0)^t, \quad s = l, r,$$

où l'hypothèse sur la discrétisation du flux d'énergie $\overline{p}u_s = \overline{p}_s u_n^*$ est faite. Ces flux satisfont les relations suivantes

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{G}}_{nf}^- - \mathbf{G}_l \cdot \mathbf{n} &= -\lambda^- (\mathbf{V}_l^* - \mathbf{V}_l) - (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_l \cdot \mathbf{n}, \\ \overline{\mathbf{G}}_{nf}^+ - \mathbf{G}_r \cdot \mathbf{n} &= -\lambda^+ (\mathbf{V}_r - \mathbf{V}_r^*) + (\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}})_r \cdot \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (6.2.3.2)$$

où on rappelle que $\overline{\mathbf{G}}_{ncf} = \overline{\mathbf{G}}_{nf}^-$ et $\overline{\mathbf{G}}_{ndf} = -\overline{\mathbf{G}}_{nf}^+$. Les équations (6.2.3.2) représentent en fait un système de 8 équations à 9 inconnues. En introduisant u_n^* le paramètre nodal tel que $u_n^* = \mathbf{u}_n^* \cdot \mathbf{n}$, $u_t^* = \mathbf{u}_n^* \cdot \mathbf{t}$ on obtient

$$\begin{cases} u_n^* = u_{n,l} + \lambda^- (\vartheta_l^* - \vartheta_l), \\ \overline{p}_l \mathbf{n} = p_l \mathbf{n} - \lambda^- (\mathbf{u}_n^* - \mathbf{u}_l) + (\overline{\kappa\Delta z})_l \mathbf{n}, \\ \overline{p}_l u_n^* = p_l u_l - \lambda^- (E_l^* - E_l) + (\overline{\kappa u \Delta z})_l, \end{cases} \quad \begin{cases} u_n^* = u_{n,r} - \lambda^+ (\vartheta_r^* - \vartheta_r), \\ \overline{p}_r \mathbf{n} = p_r \mathbf{n} + \lambda^+ (\mathbf{u}_n^* - \mathbf{u}_r) - (\overline{\kappa\Delta z})_r \mathbf{n}, \\ \overline{p}_r u_n^* = p_r u_r + \lambda^+ (E_r^* - E_r) - (\overline{\kappa u \Delta z})_r, \end{cases} \quad (6.2.3.3)$$

en omettant les relations triviales sur la fraction volumique et la fraction massique. De plus, l'une des deux équations sur le flux de pression est redondante car les états $u_{t,l}^*$ et $u_{t,r}^*$ sont déjà connus. Nous avons encore un système de 6 équations et 7 inconnues $u_n^*, \vartheta_l^*, \vartheta_r^*, \overline{p}_l, \overline{p}_r, E_l^*, E_r^*$. En faisant toujours l'hypothèse de discrétisation $\overline{\kappa u \Delta z} = u_n^* \overline{\kappa \Delta z}$, on remarque que la matrice $\overline{\mathbf{P}}$ dépend bien du paramètre nodal. On peut écrire la différence des deux flux sous la forme plus compacte

$$\overline{\mathbf{G}}_{nf}^+ - \overline{\mathbf{G}}_{nf}^- = (\overline{p}_r - \overline{p}_l) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{n} \\ u_n^* \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En utilisant les flux de pression gauche et droite donnés par les relations (6.2.3.3), et après avoir développé les calculs, on déduit

$$\overline{p}_r - \overline{p}_l = (\lambda^+ + \lambda^-) \left(u_n^* - \left(\frac{\lambda^+ u_{n,r} + \lambda^- u_{n,l} - \Delta p + \overline{\kappa \Delta z}}{\lambda^+ + \lambda^-} \right) \right),$$

avec

$$\overline{\kappa\Delta z} = (\overline{\kappa\Delta z})_l + (\overline{\kappa\Delta z})_r.$$

De la même manière que dans [GCLM22], nous introduisons la vitesse normale à une face

$$\bar{u}_n = \frac{\lambda^+ u_{n,r} + \lambda^- u_{n,l} - \Delta p + \overline{\kappa\Delta z}}{\lambda^+ + \lambda^-},$$

qui correspond à la vitesse normale du solveur acoustique unidimensionnel avec effets de tension de surface. La valeur donnée à u_n^* définit en fait le type de schéma

- Si $u_n^* = \bar{u}_n$, nous retrouvons le schéma unidimensionnel de type Godunov de la partie précédente, à condition de définir $\overline{\kappa\Delta z}$ sur les faces. Les flux de pression sont donc conservatifs dans le sens classique.
- Si $u_n^* \neq \bar{u}_n$, on trouve un schéma de type Godunov multidimensionnel ou nodal de type [GCLM22]. Ce schéma n'est donc pas conservatif au sens classique du terme. On peut choisir de définir $\overline{\kappa\Delta z}$ sur les faces ou sur les nœuds.

6.2.3.2 Conservation

Pour un schéma type Godunov multidimensionnel, la condition de conservation est obtenue en sommant les contributions des flux autour d'un nœud. Selon (6.1.2.13), nous avons

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| (\overline{\mathbf{G}}_{nf}^+ - \overline{\mathbf{G}}_{nf}^-) = 0,$$

donc

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| \left(-\sum_{k=1}^m \lambda_k \delta \mathbf{V}_k + (\Delta \mathbf{G}_{nf} + (\overline{\mathbf{P}\Delta \mathbf{B}})_{nf}) \cdot \mathbf{n}_f \right) = 0.$$

Les calculs précédents conduisent à

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| (\bar{p}_{df} - \bar{p}_{cf}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{n}_f \\ u_n^* \\ 0 \end{pmatrix} = 0.$$

En ne retenant que l'équation de la vitesse, on obtient

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| (\bar{p}_{df} - \bar{p}_{cf}) \mathbf{n}_f = 0.$$

Ici, u_n^* est toujours une inconnue du problème, attachée à chaque face des cellules connectées au nœud n . Nous avons précédemment supposé l'existence d'une vitesse nodale \mathbf{u}_n^* telle que

$$u_n^* = \mathbf{u}_n^* \cdot \mathbf{n}.$$

Cette fermeture est identique à celle réalisée dans la construction des schémas multidimensionnel GLACE [DM05], EUCCLHYD [MAB007], et plus récemment dans [GCLM22]. On omettra dans

la suite l'exposant $*$ sur la vitesse nodale \mathbf{u}_n^* . La différence de flux de pression est maintenant transformée en une condition de conservation nodale

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| (\lambda_r + \lambda_l) (\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_f - \bar{u}_f) \mathbf{n}_f = 0,$$

avec

$$\bar{u}_f = \frac{\lambda_r u_{n,r} + \lambda_l u_{n,l} - \Delta p + \bar{\kappa} \Delta z}{\lambda_r + \lambda_l},$$

où on a encore utilisé la notation $\lambda^- = \lambda_l$ et $\lambda^+ = \lambda_r$ sur la face f . L'équation (6.1.2.13) n'est rien d'autre qu'un système 2×2 ayant pour inconnue la vitesse nodale \mathbf{u}_n

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| (\lambda_r + \lambda_l) (\mathbf{n}_f \otimes \mathbf{n}_f) \mathbf{u}_n = \sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| (\lambda_r + \lambda_l) \bar{u}_f \mathbf{n}_f.$$

Ce système est inversible et admet donc une solution unique [MABO07]. La vitesse nodale déterminée dépend des quantités de toutes les cellules attachées au même nœud. Le schéma numérique est donc véritablement multidimensionnel. La vitesse nodale est donnée par

$$\mathbf{u}_n = \mathbf{M}_n^{-1} \sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} \left(\mathbf{M}_{nf} \left(\frac{\lambda_r \mathbf{u}_r + \lambda_l \mathbf{u}_l}{\lambda_r + \lambda_l} \right) - \frac{\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z}{\lambda_r + \lambda_l} \mathbf{n}_{nf} \right),$$

avec \mathbf{M}_n la matrice de taille 2×2

$$\mathbf{M}_n = \sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} \mathbf{M}_{nf}, \quad \mathbf{M}_{nf} = |\Gamma_{nf}| (\lambda_r + \lambda_l) \mathbf{n}_f \otimes \mathbf{n}_f.$$

Remarque 13

Le solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} se résume à

$$\mathbf{W}(\xi; \mathbf{V}_c, \mathbf{V}_d, \mathbf{u}_n, \mathbf{n}_f) = \begin{cases} \mathbf{V}_c & \text{si } \xi \leq -\lambda_l \vartheta_c, \\ \mathbf{V}_c^* = \mathbf{V}_c + \phi_c \mathbf{R}_c^- & \text{si } -\lambda_l \vartheta_c < \xi \leq 0, \\ \mathbf{V}_d^* = \mathbf{V}_d - \phi_d \mathbf{R}_d^+ & \text{si } 0 < \xi \leq \lambda_r \vartheta_d, \\ \mathbf{V}_d & \text{si } \lambda_r \vartheta_d < \xi, \end{cases}$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{c,d}^\pm &= (-1, 0, \pm \lambda_{l,r} \mathbf{n}_f, p_{c,d} \pm \lambda_{l,r} \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_f, 0)^t, \\ \phi_{c,d} &= -(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{c,d}) \cdot \mathbf{n}_f / \lambda_{l,r}. \end{aligned}$$

Le vecteur \mathbf{R} a la même structure que celui obtenu dans le cas unidimensionnel dans la Rem. 10.

6.2.3.3 Schéma global

Une fois la vitesse nodale déterminée, nous pouvons facilement obtenir les flux du schéma multidimensionnel. Il s'écrit alors sous sa seconde forme (6.1.2.11)

$$\mathbf{V}_c^{n+1} = \mathbf{V}_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\bar{\mathbf{H}}_{nf}^- + \frac{1}{2} \overline{\mathbf{P} \Delta \mathbf{B}} \cdot \mathbf{n}_f \right) = 0,$$

avec, d'après (6.1.3.3)

$$\overline{\mathbf{H}}_{nf}^- = \frac{1}{2} \left(\mathbf{G}_l + \mathbf{G}_r - \sum_{k=1}^m |\lambda_k| \delta \mathbf{V}_k \right) - \frac{1}{2} ((\lambda_r + \lambda_l) (\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_{nf} - \bar{u}_{n_{nf}})) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{n}_{nf} \\ \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_{nf} \\ 0 \end{pmatrix},$$

et

$$\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} \cdot \mathbf{n}_f = -\overline{\kappa\Delta z} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{n}_{nf} \\ \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_{nf} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

De manière concrète, le schéma global s'écrit simplement

$$\left\{ \begin{array}{l} \vartheta_c^{n+1} = \vartheta_c^n + \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_f, \\ y_c^{n+1} = y_c^{n+1}, \\ \mathbf{u}_c^{n+1} = \mathbf{u}_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| (p_c \cdot \mathbf{n}_f - \lambda_l (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_c) \mathbf{n}_f), \\ E_c^{n+1} = E_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| (p_c \cdot \mathbf{n}_f - \lambda_l (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_c) \mathbf{n}_f) \mathbf{u}_n, \\ z_c^{n+1} = z_c^{n+1}. \end{array} \right.$$

Sous cette forme, on constate que le calcul des flux nécessite seulement de déterminer le paramètre nodal \mathbf{u}_n , les effets de tension de surface étant entièrement inclus dans ce paramètre.

Nous avons donc construit un schéma multidimensionnel, permettant de résoudre le système à cinq équations avec effets de tension de surface, sous sa forme lagrangienne. Contrairement au schéma unidimensionnel construit dans la sous-section précédente, ce schéma dépend d'un stencil non seulement sur les voisins des faces, mais aussi sur les voisins des nœuds. La forme finale du schéma est exactement celle obtenue dans [GCLM22] pour la dynamique lagrangienne des gaz. Cependant, les effets de tension de surface sont pris en compte dans les états intermédiaires et la vitesse nodale. Enfin, si l'on considère les flux conservatifs classiques, c'est-à-dire $\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{n}_f = \bar{u}_f$, le schéma est strictement équivalent à (6.2.2.4).

6.2.3.4 Solutions équilibre

Pour traiter les solutions équilibre, on considère toujours que la discrétisation du produit non-conservatif $\overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}} = \overline{\mathbf{P}\Delta\mathbf{B}}$. Il est nécessaire de définir le paramètre $\bar{\kappa}$. Comme vu dans la première partie du chapitre, il peut être défini aux faces, comme dans le cas unidimensionnel, ou aux nœuds. Si on le définit aux faces, on a

$$\bar{\kappa}_f = \frac{\kappa_c + \kappa_d}{2}.$$

Cela permet de vérifier l'équilibre sur chaque face. Ainsi, lorsque $\mathbf{u} = 0$ et $\kappa = cste$, le schéma préserve la loi de Laplace. Si on définit l'approximation de la courbure au nœud, on a alors $\bar{\kappa}_n$ tel

que

$$\bar{\kappa}_n = \frac{1}{\text{card}\{\mathcal{C}(n)\}} \sum_{c \in \mathcal{C}(n)} \kappa_c. \quad (6.2.3.4)$$

L'approximation de la courbure à un nœud est la moyenne des courbures des cellules attachées à ce nœuds. Nous avons enfin la proposition suivante.

Proposition 17

Les solutions discrètes satisfaisant la loi de Laplace ($u = 0$, $\Delta p = \bar{\kappa}\Delta z$) sont solutions d'équilibre. De plus, les deux choix d'approximation de $\bar{\kappa}$, aux faces ou aux nœuds, permettent de préserver les solutions d'équilibre $u = 0$, $\Delta \kappa = 0$ et $\Delta p = \kappa\Delta z$.

Démonstration. La démonstration est analogue au cas unidimensionnel. □

6.2.3.5 Conditions de positivité

Les conditions de positivité des états intermédiaires du schéma multidimensionnel sont plus compliquées à dériver explicitement. En effet, on a par exemple pour le volume spécifique, en reprenant (6.2.3.1)

$$\vartheta_l^* = \vartheta_l + \frac{u_{n,l}^* - u_{n,l}}{\lambda^-} \quad \text{et} \quad \vartheta_r^* = \vartheta_r - \frac{u_{n,r}^* - u_{n,r}}{\lambda^+}.$$

La positivité des états intermédiaires du volume spécifique est assurée en prenant

$$\lambda^- \geq -\frac{u_n^* - u_{n,l}}{\vartheta_l} \quad \text{et} \quad \lambda^+ \geq \frac{u_n^* - u_{n,r}}{\vartheta_r}.$$

Le calcul de la vitesse nodale u_n^* rend l'état de vitesse intermédiaire non linéaire en ce qui concerne les pentes. Dans le cadre de la dynamique des gaz, Chan a utilisé dans sa thèse une méthode de point fixe [Cha22] pour assurer la positivité du volume spécifique. Dans notre cas, les pentes sont calculées comme dans le cas unidimensionnel. De plus, l'objectif étant d'utiliser un schéma temporel implicite pour lequel aucune condition ne peut être donnée, cette stratégie est jugée suffisante.

6.2.4 Stabilité

Les conditions de stabilité, aussi bien pour l'approche unidimensionnelle (Prop. 4) que pour l'approche multidimensionnelle (Prop. 9), peuvent être simplifiées comme suit

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \left(\frac{\vartheta_c}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{cf}| \lambda^- \right). \quad (6.2.4.1)$$

Les termes liés à la tension de surface étant directement pris en compte dans le solveur, ils le sont aussi dans les pentes et donc dans la condition de stabilité. Tout cela a été possible parce que la courbure a été considérée comme un terme du premier ordre. Cependant, on peut aussi ajouter en pratique la condition de stabilité de la tension de surface donnée par Brackbill [BKZ92] et détaillée dans le Chapitre 2

$$\frac{1}{\Delta t} > \max_c \sqrt{2\pi\sigma\vartheta_c \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \left(\frac{|\Gamma_{cd}|}{|\Omega_c|} \right)^3}. \quad (6.2.4.2)$$

6.3 Régime bas-Mach

Le régime bas-Mach correspond à la limite incompressible des équations. Il est connu dans la littérature que les schémas de type Godunov ne convergent pas asymptotiquement vers cette limite [GV99, GM04, Rie11, Del10, DJOR16]. Il est alors nécessaire, à défaut de pouvoir suffisamment raffiner le maillage, d'utiliser une correction bas-Mach. Celle-ci doit être capable de rendre le schéma *all-Mach*, c'est-à-dire, capable de traiter précisément aussi bien les zones à faible nombre de Mach, quasi incompressible, que les zones à grand nombre de Mach, supersonique ou hypersonique.

La stratégie employée pour résoudre le système diphasique est basée sur la décomposition d'opérateur Lagrange-Transport de Chalons & al. [CGK16, CGK17]. La résolution de cette décomposition est constituée de deux étapes successives, **l'étape Lagrange** et **l'étape de Transport**. Le comportement de cette stratégie dans le cadre des équations d'Euler au regard du régime bas-Mach a déjà été étudié dans [CGK16, CGK17]. Une dissipation trop importante du flux de pression dans **l'étape Lagrange** est identifiée comme étant la cause de la mauvaise convergence de la méthode. Une étude asymptotique du schéma numérique montre qu'il n'est pas possible de converger vers la limite incompressible des équations, à savoir une densité constante, un champ de vitesse à divergence nulle et une équation d'évolution en temps de la vitesse. Pour remédier à ce défaut, une correction bas-Mach est généralement utilisée, consistant à centrer le flux de pression en fonction d'un nombre de Mach local [GM04, Rie11, Del10, DJOR16, CGK16, CGK17, PGM17, PGM21, ZAGT20, ZGK+21]. Une autre idée consiste à construire un schéma numérique pour un système préconditionné par une matrice astucieusement choisie. Cette méthode, introduite par Turkel [Tur87, Tur93], lorsqu'elle est appliquée à un schéma de type Godunov, revient à modifier les pentes du solveur de Riemann en fonction du nombre de Mach. Elle présente l'inconvénient de nécessiter la définition d'un seuil limite sur ce nombre de Mach pour ne pas trop impacter le pas de temps lors d'une approche explicite.

Dans cette section, nous allons d'abord analyser le comportement asymptotique du système de l'étape Lagrange. Une fois le problème identifié, nous allons proposer une correction adaptée aux schémas unidimensionnel et multidimensionnel, tout en prenant soin de vérifier que le schéma bas-Mach préserve les états stationnaires.

6.3.1 Analyse asymptotique du modèle diphasique en régime bas-Mach

Tout d'abord, nous allons réécrire le système à cinq équations en variables adimensionnées. L'adimensionnement des équations du domaine fluide a déjà été fait dans le [Chapitre 3](#). Nous introduisons les paramètres

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{l_0}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{u_0}, \quad \tilde{p} = \frac{p}{\rho_0 c_0^2}, \quad \tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{c_0^2}, \quad \tilde{E} = \tilde{\varepsilon} + \frac{M^2}{2} \tilde{\mathbf{u}}^2 \quad \text{et} \quad M = \frac{u_0}{c_0},$$

où t_0 , l_0 , ρ_0 , u_0 , c_0 et M sont le temps, la longueur, la densité, la vitesse, la vitesse du son et le nombre de Mach caractéristique de l'écoulement. Les effets de tension de surface sont liés aux variables adimensionnées

$$\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{l_0}, \quad \tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{\sigma_0}, \quad \text{et} \quad We = \frac{\rho_0 u_0^2 l_0}{\sigma_0},$$

où κ_0 , σ_0 et We sont la courbure, le coefficient de tension de surface et le nombre de Weber caractéristique. La fraction massique et volumique y et z sont sans dimension. Le système à cinq

équations avec tension de surface dans sa forme en variables lagrangiennes adimensionnées s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\vartheta} - \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0, \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} y = 0, \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{M^2} \tilde{\nabla} \tilde{p} = \frac{1}{We} \tilde{\sigma} \tilde{\kappa} \tilde{\nabla} z, \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{E} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{p} \tilde{\mathbf{u}}) = \frac{1}{We} \tilde{\sigma} \tilde{\kappa} \tilde{\nabla} z \cdot \tilde{\mathbf{u}}, \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} z = 0. \end{array} \right. \quad (6.3.1.1)$$

On voit ainsi apparaître sur l'équation de la vitesse le nombre de Mach M devant le gradient de pression. La variation du gradient de pression au regard du nombre de Mach permet de distinguer deux régimes différents

- Si le gradient de pression adimensionné $\tilde{\nabla} \tilde{p}$ ne varie pas d'une amplitude en $\mathcal{O}(M^2)$ mais en $\mathcal{O}(M)$ ou $\mathcal{O}(1)$, alors la vitesse varie en $\mathcal{O}(1/M)$ ou $\mathcal{O}(1/M^2)$. En conséquence, ces grandes variations de vitesse induisent un régime haut-Mach. Quand le nombre de Mach est grand devant l'unité, on parle d'écoulement supersonique voir hypersonique.
- Si le gradient de pression adimensionné $\tilde{\nabla} \tilde{p}$ varie de l'ordre $\mathcal{O}(M^2)$, alors la vitesse varie en $\mathcal{O}(1)$ au regard du nombre de Mach. Ces faibles variations induisent un régime bas-Mach. Lorsque le nombre de Mach est petit devant l'unité, on parle d'écoulement subsonique.

Nous allons maintenant étudier la limite asymptotique du système (6.3.1.1) lorsque le nombre de Mach tend vers 0. Tout d'abord, on introduit le développement asymptotique en nombre de Mach de la quantité $\tilde{\bullet}$ tel que

$$\tilde{\bullet} = \tilde{\bullet}^{(0)} + M \tilde{\bullet}^{(1)} + M^2 \tilde{\bullet}^{(2)} + \mathcal{O}(M^3).$$

En injectant ce développement asymptotique pour toutes les variables dans (6.3.1.1) et en regroupant chaque terme en fonction de sa fluctuation en nombre de Mach, nous trouvons

- à l'ordre M^{-2}

$$\tilde{\nabla} \tilde{p}^{(0)} = 0,$$

- à l'ordre M^{-1}

$$\tilde{\nabla} \tilde{p}^{(1)} = 0,$$

- à l'ordre M^0

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\rho}^{(0)} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\vartheta}^{(0)} - \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(0)} = 0, \\ \tilde{\rho}^{(0)} \partial_{\tilde{t}} y^{(0)} = 0, \\ \tilde{\rho}^{(0)} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\mathbf{u}}^{(0)} + \tilde{\nabla} \tilde{p}^{(2)} = \frac{1}{We} \tilde{\sigma}^{(0)} \tilde{\kappa}^{(0)} \tilde{\nabla} z^{(0)}, \\ \tilde{\rho}^{(0)} \partial_{\tilde{t}} \tilde{E}^{(0)} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{p}^{(0)} \tilde{\mathbf{u}}^{(0)}) = \frac{1}{We} \tilde{\sigma}^{(0)} \tilde{\kappa}^{(0)} \tilde{\nabla} z^{(0)} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(0)}, \\ \tilde{\rho}^{(0)} \partial_{\tilde{t}} z^{(0)} = 0. \end{array} \right.$$

Les deux premières équations du développement asymptotique précédent implique que la pression est constante en espace jusqu'à une variation en M^2 . Ainsi

$$\tilde{p}(\mathbf{x}, t) = \tilde{p}^{(0)}(t) + M^2 \tilde{p}^{(2)}(\mathbf{x}, t).$$

Un champ de pression de cette forme est caractéristique d'un écoulement incompressible. L'équation adimensionnée de la pression sous forme lagrangienne est la suivante

$$\tilde{\rho}^{(0)} \partial_{\tilde{t}} \tilde{p}^{(0)} + \tilde{a}^{(0)} \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(0)} = 0, \quad (6.3.1.2)$$

où \tilde{a} correspond à la vitesse du son lagrangienne adimensionnée. En considérant un domaine ouvert où la pression $\tilde{p}^{(0)}$ est égale à la pression extérieure ne dépendant pas du temps, l'équation d'évolution de la pression (6.3.1.2) devient simplement

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(0)} = 0.$$

Là encore, un champ de vitesse à divergence nulle est caractéristique d'un écoulement incompressible. La limite asymptotique quand le nombre de Mach tend vers 0 du système à cinq équations avec tension de surface sous sa forme lagrangienne s'écrit donc

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = \text{constante}, \\ \rho_2 = \text{constante}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \rho (\partial_t \mathbf{u}) + \nabla p = \sigma \kappa \nabla z, \\ \partial_t z = 0. \end{array} \right. \quad (6.3.1.3)$$

Le système obtenu est quasiment identique aux équations d'Euler incompressible monophasique en formulation lagrangienne avec tension de surface. Le schéma numérique utilisé est basé sur la décomposition Lagrange-Transport de Chalons & *al.* [CGK16, CGK17]. On montre aisément par un développement asymptotique que l'équation de transport adimensionnée, résolue dans cette étape, n'est pas impactée par le nombre de Mach. Ainsi, le schéma global tend vers la limite des équations d'Euler incompressible monophasique avec tension de surface

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = \text{constante}, \\ \rho_2 = \text{constante}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \rho (\partial_t \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})) + \nabla p = \sigma \kappa \nabla z, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = 0. \end{array} \right. \quad (6.3.1.4)$$

Maintenant que l'analyse asymptotique du modèle diphasique en régime bas-Mach a été réalisée, nous allons présenter une modification pour les schémas numériques unidimensionnel et multidimensionnel. Nous verrons que cette modification permet en outre d'assurer que la limite asymptotique du schéma dans le régime bas-Mach est une discrétisation du système (6.3.1.3). En effet, les schémas de type-Godunov utilisés ont l'inconvénient de ne pas converger asymptotiquement vers cette limite. Nous prendrons soin entre autre de vérifier que ces corrections préservent les états équilibres, et permettent de converger asymptotiquement vers (6.3.1.3). On se limitera donc à l'**étape Lagrange** de la stratégie de décomposition employée, sachant que l'étape de Transport n'a besoin d'aucune correction [CGK16, CGK17] pour tendre asymptotiquement vers (6.3.1.4).

6.3.2 Correction bas-Mach : schéma unidimensionnel

La correction bas-Mach utilisée pour le schéma unidimensionnel est inspirée de celle utilisée par Chalons & *al.* [CGK16, CGK17]. Le schéma numérique utilisé pour résoudre le système diphasique sous sa forme lagrangienne avec les effets capillaires est un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann à quatre états. La correction utilisée consiste à légèrement modifier le solveur de Riemann (6.2.2.3)

$$\mathbf{W}(x/t; \mathbf{V}_l, \mathbf{V}_r) = \begin{cases} \mathbf{V}_l & \text{si } x/t \leq -\lambda^- \vartheta_l, \\ \mathbf{V}_l^* = \mathbf{V}_l + \phi_- R_- + LM_- & \text{si } -\lambda^- \vartheta_l < x/t \leq 0, \\ \mathbf{V}_r^* = \mathbf{V}_r - \phi_+ R_+ - LM_+ & \text{si } 0 < x/t \leq \lambda^+ \vartheta_r, \\ \mathbf{V}_r & \text{si } \lambda^+ \vartheta_r < x/t, \end{cases} \quad (6.3.2.1)$$

où

$$\begin{aligned} R_{\pm} &= (-1, 0, \pm\lambda_{\pm}, p_{1-\alpha} \pm \lambda_{\pm} u_{\alpha}, 0), \\ LM_{\pm} &= \frac{\lambda_{\mp}(\theta - 1)\Delta u}{\lambda_- + \lambda_+} (0, 0, 1, \bar{u}, 0), \\ \phi_{\pm} &= \frac{\Delta p - \tilde{\kappa}\Delta z \pm \lambda_{\mp}\Delta u}{\lambda_- \lambda_+ + \lambda_{\pm}^2}, \end{aligned}$$

avec

$$\theta = \min\left(1, \frac{|\bar{u}|}{\max(c_l, c_r)}\right).$$

Nous avons repris les notations introduite dans la construction du schéma unidimensionnel en ce qui concerne α , $p_{1-\alpha}$, u_{α} et \bar{u} . Cela revient à modifier le flux de pression \bar{p} simplement par

$$\bar{p}^{\theta} = \frac{\lambda^- p_r + \lambda^+ p_l}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\theta \lambda^+ \lambda^- \Delta u}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\bar{\kappa} \Delta z}{2} \frac{\lambda^- - \lambda^+}{\lambda^+ + \lambda^-}. \quad (6.3.2.2)$$

On constate que la correction bas-Mach ne joue que dans le régime subsonique, lorsque $M < 1$. Il est maintenant nécessaire de regarder le comportement de ce schéma vis-à-vis des solutions équilibres.

Proposition 18

La loi de Laplace est une solution d'équilibre fort du solveur de Riemann (6.3.2.1).

Démonstration. On voit immédiatement que le terme LM_{\pm} lié à la correction bas-Mach s'annule lorsque u est constant. De plus, si $p - \sigma\kappa z = cste$, alors $\phi_{\pm} = 0$. Ce qui revient à $\mathbf{V}_l^* = \mathbf{V}_l$ et $\mathbf{V}_r^* = \mathbf{V}_r$, qui est la définition d'un équilibre fort. \square

Le comportement asymptotique du schéma unidimensionnel en régime bas Mach a été étudié dans [CGK16] pour la dynamique des gaz. Nous rappelons le résultat suivant, en omettant les termes liés à la tension de surface.

Proposition 19 ([CGK16])

Dans le régime bas Mach, la discrétisation adimensionnée de l'étape Lagrange est consistante avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\vartheta} - \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{u}} = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x}), \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} y = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}), \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\nabla} \tilde{p} = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}\left(\frac{\theta \Delta \tilde{x}}{M}\right), \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} \tilde{E} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{p} \tilde{\mathbf{u}}) = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(\theta M \Delta \tilde{x}), \\ \tilde{\rho} \partial_{\tilde{t}} z = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}). \end{array} \right. \quad (6.3.2.3)$$

La discrétisation adimensionnée de l'étape de Transport est consistante avec

$$\partial_{\tilde{t}} \tilde{\phi} + \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\nabla} \tilde{\phi} = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x})$$

pour $\tilde{\phi} \in \{\tilde{\rho}, \tilde{\rho} y, \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\rho} \tilde{E}, \tilde{z}\}$, et le système complet résolu par le schéma de décomposition Lagrange-Transport adimensionné est donné par

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\rho} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x}), \\ \partial_{\tilde{t}} (\tilde{\rho} y) + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} y \tilde{\mathbf{u}}) = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x}), \\ \partial_{\tilde{t}} (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}) + \frac{1}{M^2} \tilde{\nabla} \tilde{p} = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}\left(\frac{\theta \Delta \tilde{x}}{M}\right), \\ \partial_{\tilde{t}} (\tilde{\rho} \tilde{E}) + \tilde{\nabla} \cdot ((\tilde{\rho} \tilde{E} + \tilde{p}) \tilde{\mathbf{u}}) = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(\theta M \Delta \tilde{x}), \\ \partial_{\tilde{t}} z + \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\nabla} z = \mathcal{O}(\Delta \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta \tilde{x}) + \mathcal{O}(M \Delta \tilde{x}). \end{array} \right.$$

Le choix $\theta = \mathcal{O}(M)$ permet alors d'obtenir une erreur de troncature uniforme par rapport au nombre de Mach M .

Une analyse asymptotique du schéma numérique permet de montrer qu'il est consistant avec la limite incompressible des équations.

6.3.3 Correction bas-Mach : schéma multidimensionnel

Le schéma multidimensionnel peut être corrigé de différentes manières. Une première idée consiste à remplacer le flux de pression multidimensionnel par une combinaison convexe entre le flux multidimensionnel et le flux unidimensionnel corrigé (6.3.2.2) en fonction du Mach local. Cette correction permet toujours de conserver un schéma bien équilibré. Cependant, le flux de pression devient unidimensionnel, le caractère multidimensionnel du schéma est perdu. Ainsi, il est plus intéressant d'explorer une correction permettant d'avoir un schéma bas-Mach multidimensionnel. Nous pouvons nous inspirer de la correction proposée par [Lab19] et utilisée dans [CHL20].

Tout d'abord, on définit par q_n une quantité au nœud n telle que

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| \left(\frac{1}{\lambda_l} + \frac{1}{\lambda_r} \right) q_n = \sum_{c \in \mathcal{C}(n)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{nf}| \left(\frac{p_c - \sigma \kappa_c z_c}{\lambda^-} + \mathbf{u}_c \cdot \mathbf{n}_f \right). \quad (6.3.3.1)$$

On rappelle que la notation λ^- correspond à la valeur de la pente associée à l'état gauche de la face f , orientée par la normale \mathbf{n}_f sortante de c vers d . Cette définition est basée sur la construction de

la vitesse nodale \mathbf{u}_n . En effet, nous avons vu dans la section précédente que la vitesse nodale est une combinaison des flux de vitesse unidimensionnels sur les faces attachées au nœud. Ainsi, le second membre de (6.3.3.1) correspond à un flux de pression unidimensionnel. A partir de là, on définit le nouveau flux de pression comme

$$\bar{p}_l = \theta_n (p_l - \lambda^- (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_l) \cdot \mathbf{n}) + (1 - \theta_n) (q_n + \sigma \kappa_n z_c) + (\overline{\kappa \Delta z})_l. \quad (6.3.3.2)$$

où

$$\theta_n = \min \left(1, \frac{\|\mathbf{u}_n\|}{\max_c c} \right).$$

Le flux de pression ainsi défini est une combinaison convexe du flux de pression multidimensionnel originel et d'un flux multidimensionnel permettant de résoudre les écoulements bas Mach avec tension de surface. Le paramètre κ_n correspond à une courbure nodale. Si la courbure $\bar{\kappa}$ est défini aux nœuds, alors $\bar{\kappa} = \kappa_n$. Dans le cas contraire, où la courbure $\bar{\kappa}$ a été définie aux faces, la courbure nodale κ_n est donnée par (6.2.3.4). La quantité nodale q_n est donc composée d'un terme centré en $q = p - \sigma \kappa z$ et d'un terme de diffusion en vitesse. Ce terme de diffusion \mathcal{D} de la pression nodale est donné par

$$\mathcal{D} = \frac{1}{\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| \left(\frac{1}{\lambda_l} + \frac{1}{\lambda_r} \right)} \sum_{c \in \mathcal{C}(n)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{nf}| \mathbf{u}_c \cdot \mathbf{n}_f.$$

Il est aisé de voir que le terme de diffusion \mathcal{D} est en fait une discrétisation de la divergence discrète de la vitesse au nœud n . Nous avons vu que dans le régime bas-Mach, la limite asymptotique du système lorsque le nombre de Mach tend vers 0 donne un champ de vitesse à divergence nulle. Ainsi, le terme de diffusion s'annule lui aussi, et le schéma adimensionnée de l'étape **Lagrange** est consistant avec (6.3.2.3). La preuve théorique de ce résultat ne sera pas donnée ici. Pour démontrer que \mathcal{D} est une approximation d'ordre un de la divergence au nœud, on peut utiliser les mêmes outils que dans [Des10b, Lab19]. Il est aussi possible de construire la quantité nodale q_n sans les termes de vitesse. On a alors

$$\sum_{f \in \mathcal{SF}(n)} |\Gamma_{nf}| \left(\frac{1}{\lambda_l} + \frac{1}{\lambda_r} \right) q_n = \sum_{c \in \mathcal{C}(n)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{nf}| \left(\frac{p_c - \sigma \kappa_c z_c}{\lambda^-} \right). \quad (6.3.3.3)$$

On peut alors montrer que le schéma adimensionné (6.3.3.2) avec la pression nodale (6.3.3.1) ou (6.3.3.3) est consistant avec (6.3.2.3). Nous allons maintenant étudier la correction proposée vis-à-vis des solutions équilibres.

Proposition 20

La loi de Laplace est une solution d'équilibre fort du schéma (6.3.3.2), (6.3.3.1) et (??).

Démonstration. Lorsque la vitesse \mathbf{u} , la courbure κ et la quantité $q = p - \sigma \kappa z$ sont constantes, on a $\mathbf{u}_n = \mathbf{u}$. De plus, $q_n = q$ donc $q_n + \sigma \kappa_n z_c = p_c$. Ainsi, $\bar{p}_l = p_l$ et $\bar{p}_r = p_r$. En injectant ces relations dans les définitions des flux (6.2.3.3), on a de suite $\vartheta_s^* = \vartheta_s$ et $E_s^* = E_s$, $s = l, r$. \square

Ce schéma conserve la propriété d'être multidimensionnel, consistant avec la limite asymptotique du régime bas-Mach, et préserve les solutions stationnaires. En définissant les quantités nodales avec les mêmes pentes, c'est-à-dire $\forall f \in \mathcal{SF}(nc)$, $\lambda^- = \lambda^+$, on retrouve alors la correction bas-Mach de Labourasse [Lab19], utilisée notamment dans [CHL20].

Remarque 14

Ces dernières années, de nombreux auteurs ont proposé des corrections bas-Mach pour les modèles compressibles. À notre connaissance, le travail de Labourasse [Lab19] est le seul à traiter le cas des schémas lagrangiens. Cette correction a été appliquée dans le contexte de l'hydrodynamique lagrangienne avec tension de surface dans [CHL20]. Cependant, une classe de schémas multidimensionnels semble capable de traiter directement les écoulements à faible nombre de Mach. C'est le cas du schéma lagrangien récemment mis au point par Corot [CM18], pour lequel les flux de pression sont basés sur une pression nodale. Le bon comportement du schéma de Corot dans le régime bas-Mach avait déjà été remarqué dans [Lab19]. Curieusement, la dissipation de cette pression nodale a la forme d'une divergence nodale discrète, qui s'annule dans le régime de bas-Mach. Cette idée a été utilisée par Barsukow [Bar21] pour construire un solveur multidimensionnel dans le cas cartésien, et employée dans [CM18] pour réduire la dissipation des schémas GLACE [DM05] et EUCCLHYD [MABO07]. Une des corrections proposées ici s'appuie aussi sur cette observation. D'ailleurs, on affirme que dans le cas cartésien sans tension de surface, lorsque $\theta_n = 0$, le schéma (6.3.3.1), (6.3.3.2) devient exactement le schéma multidimensionnel bas-Mach de Barsukow [Bar21].

6.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étendu la notion de schéma de type Godunov au cadre non-conservatif. Notre utilisation du schéma multidimensionnel EUCCLHYD [MABO07] dans le cas conservatif du Chapitre 5 nous a poussé à utiliser la notion de schéma de type Godunov multidimensionnel de Gallice & al. [GCLM22] pour construire un schéma de type Godunov multidimensionnel non-conservatif. Les schémas unidimensionnel et multidimensionnel basés sur un solveur de Riemann simple [Gal00, Gal02b, Gal02a, Gal03] sont positifs, entropiques et stables sous condition sur le pas de temps. Ils ont été utilisés pour construire un schéma numérique unidimensionnel et son extension multidimensionnelle pour le système à cinq équations réduit avec tension de surface sous la forme CSF en variables lagrangiennes. On parle de schéma multidimensionnel car le stencil de construction des flux est basé sur un voisinage nodal, contrairement au schéma unidimensionnel où le stencil du flux numérique est constitué des voisins aux faces. Ils sont équilibrés, c'est-à-dire qu'ils préservent les solutions stationnaires liées à la tension de surface dans le cas de la modélisation CSF. L'utilisation de la méthode de décomposition Lagrange-Transport présentée au Chapitre 5 permet de se ramener au cadre eulérien. Les effets dissipatifs liés à la viscosité et la diffusion thermique peuvent être pris en compte de la même manière, tout comme la résolution implicite de l'**étape Lagrange**. Les schémas de type Godunov nécessitant une correction bas-Mach, nous avons présenté les choix utilisés en prenant soin de vérifier qu'ils permettent de préserver les solutions équilibres.

Le schéma numérique global est seulement d'ordre un en temps et en espace. Pour avoir des résultats plus précis, il est nécessaire de monter en ordre. De plus, la diffusion liée à l'**étape de Transport** va induire un étalement numérique de l'interface liquide-gaz, considérée ici comme non physique. Dans le chapitre suivant, nous allons voir comment améliorer la précision du schéma et réduire la diffusion de la fraction volumique.

Chapitre 7

Extension à l'ordre deux

Sommaire

7.1 Schéma MUSCL : cadre unidimensionnel	138
7.1.1 Reconstruction de la solution	139
7.1.2 Limitation des reconstructions	140
7.2 Schéma MUSCL : cadre multidimensionnel	143
7.2.1 Reconstruction de la solution	143
7.2.2 Limitation des reconstructions	146
7.3 Schéma en temps	155
7.3.1 Schéma explicite pour la décomposition Lagrange-Transport	155
7.3.2 Schéma implicite pour l'étape Lagrange	156
7.4 Schéma de type Godunov non-conservatif : extension au second ordre	158
7.4.1 Extension au second ordre : cadre unidimensionnel	158
7.4.2 Extension au second ordre : cadre multidimensionnel	160
7.5 Conclusion	161

Les schémas construits précédemment ne sont que d'ordre un en espace et en temps. Bien que rapides et robustes, ils manquent de précision, du fait de leur diffusion numérique trop importante. De plus, dans le cadre de l'utilisation des méthodes à interfaces diffuses, la fraction volumique va naturellement être diffusée à l'interface entre les deux fluides considérés. Le simple schéma décentré utilisé lors de l'étape de transport va produire un étalement numérique de la solution bien trop important pour suivre avec précision l'interface entre le liquide et le gaz. Plusieurs méthodes ont été développées afin de limiter la diffusion numérique de l'interface. Kokh et Lagoutière ont utilisé le schéma antidiffusif [KL10] développé dans [DL02], qui consiste à utiliser un flux décentré aval le plus possible, tout en garantissant la stabilité et la consistance du schéma. Cette méthode limite la diffusion de l'interface à 2 cellules de mélange. Helluy et Jung [HJ14] ont combiné la méthode de projection aléatoire de Glimm près de l'interface avec le schéma *upwind* pour simuler un écoulement diphasique sans aucune cellule de diffusion. Par contre, les propriétés de consistance, conservation et ordre du schéma sont vraies en moyenne. Ils ont étendu cette méthode à l'ordre deux en espace et en temps. L'extension en dimension supérieure est réalisée avec un splitting directionnel. Shyue et Xiao [SX14] ont adapté la méthode THINC de [XHK05] pour simuler les écoulements diphasiques. L'idée principale est de reconstruire la fraction volumique avec la fonction tangente hyperbolique, en contrôlant le caractère compressif de la reconstruction avec un paramètre β . Cette technique est largement combinée avec l'algorithme BVD (*Boundary Variation*

Diminishing) [SIX16, DIX⁺18, CDX⁺20] pour simuler des écoulements diphasiques sur des grilles structurées et non structurées. Dans le contexte des schémas de type MUSCL [vL79], où les flux sont calculés avec une reconstruction linéaire par morceaux avec limitation de pente, ces derniers peuvent être conçus pour avoir des propriétés compressives et donner une interface raide lorsqu'ils sont appliqués à l'équation de transport de la fraction volumique. Cette approche a été largement utilisée dans la littérature, par exemple dans Qian et al. [QCM106], Blanchard [Bla15], Chiapolino et al. [CSN17] et De Vuyst et al. [DFM⁺21].

L'approche retenue ici sera d'utiliser un schéma de type MUSCL avec un choix de limiteur différent selon qu'il s'agit de la fraction volumique ou des autres variables. Il permettra à la fois d'augmenter la précision du schéma global à l'ordre deux pour être plus précis et calculer correctement le flux à la paroi, tout en diminuant considérablement la diffusion numérique de la fraction volumique. La méthode MUSCL est relativement simple et facile à utiliser et peu coûteuse en temps CPU sur un maillage curviligne structuré qui se déforme au cours du temps, contrairement à des méthodes de type ENO [HEOC87, SO88, Abg94] ou WENO [LOC94] qui sont plus complexes et plus coûteuses en temps CPU.

Ce chapitre est divisé en cinq parties. Tout d'abord, nous allons rappeler le principe de la méthode MUSCL dans le cadre unidimensionnel. Cela nous permettra d'introduire la notion de limiteur compressif, permettant de raidir la fraction volumique. Ensuite, nous allons tenter d'entendre la méthode MUSCL dans le cadre multidimensionnel. Nous présenterons alors un certain nombre de propriétés intéressantes vérifiées par la méthode. Puis, l'amélioration de l'ordre en temps sera discuté. Nous terminerons enfin par étendre la notion de schéma de type Godunov non-conservatif au second ordre en espace.

7.1 Schéma MUSCL : cadre unidimensionnel

On reprend les notations introduites aux chapitres précédents pour la discrétisation spatiale et temporelle. Dans un premier temps, on considère l'équation scalaire hyperbolique

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R} \text{ et } \forall t \in \mathbb{R}^+. \quad (7.1.0.1)$$

La variable $u \in \mathbb{R}$ est la quantité conservée et f est un flux quelconque. Dans tout le chapitre, nous allons uniquement nous intéresser à la discrétisation volumes finis *Cell-Centered*. Le schéma numérique induit par une telle discrétisation est de la forme

$$\Delta x \partial_t u_i = - (\bar{f}(u_i, u_{i+1}) - \bar{f}(u_{i-1}, u_i)), \quad (7.1.0.2)$$

où $\bar{f}(\bullet, \bullet)$ est un flux numérique consistant avec la loi de conservation (7.1.0.1). Il existe une grande variété de choix concernant le flux \bar{f} . On peut citer entre autres les flux de Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, Beam-Warming, ou encore Fromm (voir [Tor97] par exemple). Les flux numériques peuvent être d'ordre quelconque, généralement d'ordre un. Cela implique dans ce dernier cas que le schéma numérique associé génère trop de diffusion numérique. Puisque les schémas convergent, il existe un maillage assez fin pour capturer précisément tous les phénomènes physiques. Cependant, un tel maillage est en pratique inutilisable du point de vue du temps de calcul.

Un flux numérique linéaire d'ordre deux possède l'inconvénient de produire de nouveaux extrema, et ainsi perdre la monotonie du schéma, notamment autour de fortes discontinuités. Dans la littérature, on appelle cela le phénomène de Gibbs [Tor97]. Un résultat dû à Godunov [God59] nous

dit qu'un schéma linéaire permettant de ne pas générer de nouveaux extrema est au plus d'ordre un. Pour traiter ce résultat, Kolgan [Kol72, Koll11] et van Leer [vL73] proposent indépendamment une nouvelle technique permettant d'améliorer la précision du schéma de Godunov. Dans une série de cinq articles [vL73, vL74, vL77a, vL77b, vL79], van Leer développe un schéma appelé MUSCL (*Monotone Upstream-centered Scheme for Conservation Laws*) permettant de résoudre des équations scalaires en dimension un à l'ordre deux et trois sans perdre la monotonie. Il étend cette méthode avec succès à la dynamique des gaz. Nous allons en présenter les idées générales.

7.1.1 Reconstruction de la solution

Le principe du schéma MUSCL est de remplacer les valeurs moyennes des cellules dans l'évaluation des flux numériques par une extrapolation de la solution sur les faces. Soit u_i une approximation de

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x, t^n) dx,$$

pour toute quantité $u(x, t)$. On définit la reconstruction $\hat{u}_i(x)$ de u_i comme l'approximation quadratique de u dans la cellule i telle que

$$\hat{u}_i(x) = u_i + (\partial_x u)_i (x - x_i) + \frac{3\kappa}{2} (\partial_x^2 u)_i \left((x - x_i)^2 - \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (x - x_i)^2 dx \right), \quad (7.1.1.1)$$

où $(\partial_x u)_i$ et $(\partial_x^2 u)_i$ sont des approximations centrées des dérivées première et seconde de u_i . Cette reconstruction a la propriété d'être conservative dans le sens où

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \hat{u}_i(x) dx = u_i.$$

Le paramètre κ introduit dans (7.1.1.1) permet de définir une famille de reconstructions appelée κ -schéma. Généralement, κ est choisi dans l'intervalle $[-1, 1]$, où $\kappa = 0$ correspond au schéma de Fromm, $\kappa = 1$ au schéma centré, $\kappa = 1/2$ donne le schéma QUICK [Tor97, Hir07]. Le choix particulier $\kappa = 1/3$ permet d'avoir une reconstruction d'ordre trois de la solution au point x à partir de la moyenne de u dans la cellule i et de ses dérivées première et seconde. Le schéma volumes finis *Cell-Centered* défini par (7.1.0.2) est alors d'ordre trois avec $\kappa = 1/3$ et d'ordre deux pour les autres choix [BHO17]. En introduisant u_i^R et u_{i+1}^L respectivement les reconstructions à gauche et à droite de la face $i + \frac{1}{2}$, on a exactement

$$\begin{aligned} u_i^R &= u_i + (\partial_x u)_i \frac{\Delta x}{2} + \frac{3\kappa}{2} (\partial_x^2 u)_i \left[\left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 - \frac{\Delta x^2}{12} \right], \\ u_{i+1}^L &= u_{i+1} - (\partial_x u)_{i+1} \frac{\Delta x}{2} + \frac{3\kappa}{2} (\partial_x^2 u)_{i+1} \left[\left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 - \frac{\Delta x^2}{12} \right]. \end{aligned}$$

En remplaçant les dérivées première et seconde par leur approximation centrée, on obtient

$$\begin{aligned} u_i^R &= u_i + \frac{1}{4} \left((1 - \kappa) \Delta_i^- + (1 + \kappa) \Delta_i^+ \right), \\ u_{i+1}^L &= u_{i+1} - \frac{1}{4} \left((1 - \kappa) \Delta_{i+1}^+ + (1 + \kappa) \Delta_{i+1}^- \right), \end{aligned} \quad (7.1.1.2)$$

avec $\Delta_i^- = u_i - u_{i-1}$, $\Delta_i^+ = u_{i+1} - u_i$. Le schéma (7.1.0.2) devient alors

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\bar{f}(u_{i+1}^L, u_i^R) - \bar{f}(u_i^L, u_{i-1}^R)). \quad (7.1.1.3)$$

Afin de résoudre le problème lié au théorème de Godunov [God59], van Leer introduit maintenant le concept de limiteur de pente.

7.1.2 Limitation des reconstructions

Le schéma (7.1.1.3) étant linéaire et d'ordre au moins deux, il ne préserve pas la monotonie de la solution. On peut définir la monotonie d'un schéma à partir de son flux numérique.

Définition 23 (Schéma monotone)

Considérons le schéma volumes finis unidimensionnel avec une discrétisation temporelle explicite

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} - \bar{f}_{i-\frac{1}{2}}), \quad (7.1.2.1)$$

où le flux numérique consistant $\bar{f}_{i+\frac{1}{2}}(u_{i-k+1}, \dots, u_i, u_{i+1}, \dots, u_{i+k})$ dépend de $2k + 1$ cellules. Si la fonction flux \bar{f} est monotone et k -lipschitzienne telle que

$$\frac{\partial \bar{f}_{i+\frac{1}{2}}}{\partial u_j} \geq 0 \text{ si } j = i, \quad \text{et} \quad \frac{\partial \bar{f}_{i+\frac{1}{2}}}{\partial u_j} \leq 0 \text{ si } j \neq i,$$

alors le schéma est monotone.

Un schéma monotone ne génère pas de nouveaux extremum autres que ceux déjà présents dans la solution initiale. Il préserve la monotonie de la solution. On a la définition suivante.

Définition 24 (Schéma préservant la monotonie)

Le schéma (7.1.2.1) préserve la monotonie de la solution si pour toute solution $(u^n)_i$ monotone alors $(u^{n+1})_i$ est monotone dans le même sens i.e. croissante ou décroissante.

Pour rendre le schéma de Godunov monotone, l'idée de Kolgan et van Leer est d'y incorporer des non-linéarités astucieusement choisies, appelées limiteurs, pour localement décroître l'ordre du schéma là où des oscillations peuvent se produire. Van Leer construit dans ses articles un schéma d'ordre élevé à Variation Totale Décroissante (TVD). Cette notion, moins contraignante que la monotonie, a été introduite plus tard par Harten [Har83], en définissant la variation totale de la solution discrète d'une équation de loi de conservation par

$$TV(u) = \sum_i |u_{i+1} - u_i|.$$

On a la définition d'un schéma TVD.

Définition 25 (Schéma TVD)

Le schéma (7.1.2.1) est TVD si $TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$.

Harten montre en particulier qu'un schéma TVD préserve la monotonie. On a en outre les relations suivantes

Schéma monotone \Rightarrow Schéma TVD \Rightarrow Schéma préservant la monotonie.

On peut alors choisir de limiter les flux ou les reconstructions. La deuxième option, probablement la plus populaire aujourd'hui, est détaillée dans la suite. Soit $r_i = \Delta_i^- / \Delta_i^+$ le ratio des pentes de la solution. Sur un maillage cartésien uniforme, r_i est exactement le ratio des gradients décentrés. Les reconstructions (7.1.1.2) se réécrivent alors

$$\begin{aligned} u_i^R &= u_i + \frac{1}{4} \left((1 - \kappa) r_i \Delta_i^+ + (1 + \kappa) (1/r_i) \Delta_i^- \right), \\ u_{i+1}^L &= u_{i+1} - \frac{1}{4} \left((1 - \kappa) (1/r_{i+1}) \Delta_{i+1}^- + (1 + \kappa) r_{i+1} \Delta_{i+1}^+ \right). \end{aligned}$$

Le principe de limiteur de pente consiste à appliquer à celles-ci un limiteur ϕ tel que

$$\begin{aligned} \hat{u}_i^R &= u_i + \frac{1}{4} \left((1 - \kappa) \phi(r_i) \Delta_i^+ + (1 + \kappa) \phi(1/r_i) \Delta_i^- \right), \\ \hat{u}_{i+1}^L &= u_{i+1} - \frac{1}{4} \left((1 - \kappa) \phi(1/r_{i+1}) \Delta_{i+1}^- + (1 + \kappa) \phi(r_{i+1}) \Delta_{i+1}^+ \right). \end{aligned}$$

où la notation $\hat{\bullet}$ indique la reconstruction modifiée par le limiteur. Cette fonction ϕ va permettre de limiter la pente de la reconstruction pour s'assurer que le schéma reste TVD dans les zones à forte courbure (c'est-à-dire forte valeur de r_i ou de $1/r_i$). Sweby [Swe84] va développer toute une classe de limiteurs en définissant une région admissible dans laquelle celui-ci doit appartenir pour avoir un schéma TVD. La Fig. 7.1 représente en gris foncé la zone de Sweby, dans laquelle tout limiteur induit un schéma TVD d'ordre supérieur à 1.

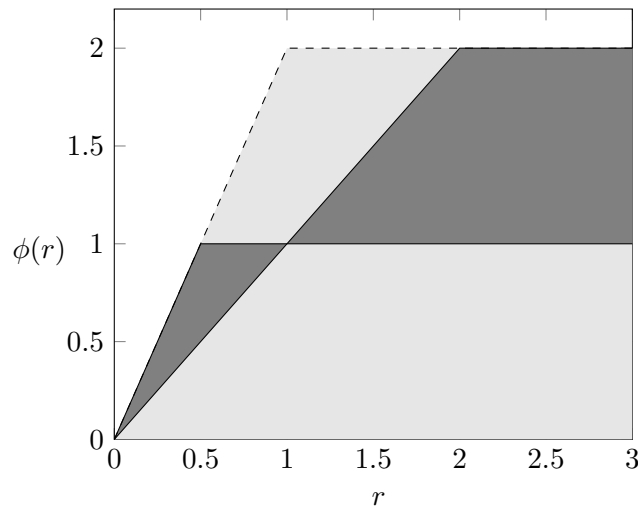


Fig. 7.1. Diagramme de Sweby. La région de TVD du premier ordre est composée des zones gris clair et gris foncé, tandis que la région de second ordre est exclusivement composée de la zone gris foncé.

La propriété $\phi(1) = 1$ est une condition nécessaire et suffisante pour préserver la linéarité de la solution et donc l'ordre deux. Lorsque le ratio des pentes est trop important, ϕ tend vers 0 et le schéma devient du premier ordre. Le limiteur le plus diffusif est appelé *Minmod*. Il correspond à la limite inférieure de la zone de Sweby. Le moins diffusif est appelé *Superbee*. Il correspond à la limite supérieure de la zone. Ce dernier possède un caractère compressif. La compressibilité est

la capacité à reproduire avec précision une discontinuité. Le limiteur *Overbee* correspond quant à lui à la zone supérieure du digramme soit $\phi(r) = \min(2r, 2)$. Il ne permet pas d'avoir un schéma d'ordre élevé car il ne préserve pas la linéarité de la solution puisque $\phi(1) \neq 1$. Cependant, il est le plus compressif des limiteurs TVD et de ce point de vue il est le plus adapté pour capturer précisément les discontinuités. Il est même possible de faire mieux en prenant en compte le nombre de CFL [Tor97, Hir07]. Dans ce cas, le limiteur correspondant à la borne supérieure de la zone TVD est appelé *Ultrabee*. Il correspond exactement au schéma d'Antidiffusion de Desprès & Lagoutière [Lag00, DL02], et permet de limiter la diffusion d'une discontinuité sur une maille. Un tel limiteur est alors intéressant à utiliser dans le cas du transport de la fraction volumique du système à 5 équations [KL10, PGM21].

On demande parfois au limiteur d'être symétrique i.e. $\phi(r)/r = \phi(1/r)$. Dans ce cas, les reconstructions s'écrivent simplement

$$\begin{aligned}\hat{u}_i^R &= u_i + \frac{1}{2}\phi(r_i)\Delta_i^+, \\ \hat{u}_{i+1}^L &= u_{i+1} - \frac{1}{2}\phi(r_{i+1})\Delta_{i+1}^+.\end{aligned}$$

On constate qu'il n'y a plus de dépendance au paramètre κ . On a en outre le théorème suivant qui résume les résultats énoncés précédemment

Théorème 1 (Schéma volumes finis MUSCL TVD [BHO17])

Le schéma défini par

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\bar{f}(\hat{u}_{i+1}^L, \hat{u}_i^R) - \bar{f}(\hat{u}_i^L, \hat{u}_{i-1}^R)),$$

avec \bar{f} la fonction flux monotone et k -lipschitzienne et les reconstructions linéaires du κ -schéma de van Leer

$$\begin{aligned}\hat{u}_i^R &= u_i^n + \frac{1}{4} \left((1 - \kappa)\phi(r_i)\Delta_i^+ + (1 + \kappa)\phi(1/r_i)\Delta_i^- \right), \\ \hat{u}_{i+1}^L &= u_{i+1}^n - \frac{1}{4} \left((1 - \kappa)\phi(1/r_{i+1})\Delta_{i+1}^- + (1 + \kappa)\phi(r_{i+1})\Delta_{i+1}^+ \right),\end{aligned}$$

où $\Delta_i^- = u_i^n - u_{i-1}^n$, $\Delta_i^+ = u_{i+1}^n - u_i^n$ et $r_i = \Delta_i^- / \Delta_i^+$ le ratio des pentes de la solution, est TVD si le limiteur de pente ϕ vérifie

$$0 \leq \phi(r_i) \leq \frac{3 - \kappa}{1 - \kappa} - (1 + \alpha) \frac{1 + \kappa}{1 - \kappa},$$

et

$$0 \leq \frac{\phi(r_i)}{r_i} \leq 2 + \alpha,$$

avec

$$-2 \leq \alpha \leq 2 \frac{1 - \kappa}{1 + \kappa},$$

sous la condition de stabilité sur le pas de temps

$$\frac{1}{\Delta t} > \frac{1}{\Delta x} \frac{2 - (2 + \alpha)\kappa}{1 - \kappa} \sup_{\substack{\tilde{u} \in [\hat{u}_{i-1}^R, \hat{u}_i^R] \\ \tilde{\tilde{u}} \in [\hat{u}_i^L, \hat{u}_{i+1}^L]}} \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, \hat{u}_{i+1}^L) - \frac{\partial \bar{f}}{\partial \tilde{\tilde{u}}}(\hat{u}_{i-1}^R, \tilde{\tilde{u}}) \right).$$

De plus, l'erreur de troncature $\tau_{\Delta x}$ dans le cas non-limité ($\phi(r) = 1$) est la suivante

$$\tau_{\Delta x} = -\frac{\kappa - 1/3}{4} \Delta x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(u).$$

Pour avoir un limiteur compressif TVD et qui préserve l'ordre élevé, on introduit généralement le paramètre β dans le limiteur β -*Minmod* tel que

$$\phi_i = \max(0, \min(r_i, \beta)), \quad \beta \in \left[1, \frac{3 - \kappa}{1 - \kappa}\right].$$

Si $\beta = 1$, on retrouve le limiteur *Minmod* usuel. Le choix $\beta > 1$ donne alors un limiteur compressif [BHO17].

Remarque 15

Le concept de schéma TVD et la théorie sur les limiteurs de pentes est établie pour le cas scalaire en dimension un. L'extension à des systèmes tels que la dynamique des gaz est plus délicate. La notion de schéma TVD pour un système n'a pas de sens. En pratique, on utilise les mêmes limiteurs de manière scalaire, c'est-à-dire, appliqués à chacune des variables, primitives ou conservatives. On cherche plutôt à garantir que le schéma préserve certaines conditions vérifiées par la solution exacte (positivité de la densité et de l'énergie interne, principe du maximum sur les fractions massiques et volumiques, ...).

7.2 Schéma MUSCL : cadre multidimensionnel

Dans la section précédente, nous avons rappelé des résultats classiques sur la méthode MUSCL dans le cas unidimensionnel. Nous allons maintenant voir comment étendre cette méthode en dimension d supérieure à un (on se contente ici de $d = 2$). On considère alors l'équation scalaire hyperbolique suivante

$$\partial_t u + \nabla \cdot \mathbf{F}(u) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \text{ et } \forall t \in \mathbb{R}^+, \quad (7.2.0.1)$$

où u est la variable d'intérêt et \mathbf{F} le vecteur de flux. La discrétisation volumes finis de l'équation précédente sur une cellule c est donnée par

$$|\Omega_c| \partial_t u_c = - \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \bar{\mathbf{F}}(u_c, u_d, \mathbf{n}), \quad (7.2.0.2)$$

où u_c est la moyenne de la solution u sur la cellule c , $|\Omega_c|$ est l'aire de la cellule c , $\mathcal{V}(c)$ est l'ensemble des cellules voisines par les faces de la cellule c , \mathbf{n} est la normale sortante à la face et $\bar{\mathbf{F}}(u, v, \mathbf{n})$ est un flux numérique monotone tel que

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial u}(u, v, \mathbf{n}) \geq 0, \quad \text{et} \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial v}(u, v, \mathbf{n}) \leq 0.$$

Ce flux est généralement évalué au centre des faces.

7.2.1 Reconstruction de la solution

Il existe principalement deux façons d'obtenir un schéma d'ordre deux en espace pour l'équation semi-discrète (7.2.0.2) en utilisant les concepts de la méthode MUSCL. La première [BC10, LMG15] est appelée *Multislope*. Elle consiste à reconstruire des pentes de chaque côté de l'interface d'une cellule afin d'évaluer les flux. Elle est appelée ainsi car, contrairement au cas unidimensionnel, il y a au sein d'une même cellule une pente associée à chaque face. Initialement développée pour des triangles [BC10], elle a été étendue avec succès sur des maillages quelconques en deux et trois

dimensions [LMG15]. Cette méthode possède la bonne propriété d'être positive sous conditions, c'est-à-dire que le schéma volumes finis (7.2.0.2) peut s'écrire sous la forme semi-discrète

$$|\Omega_c| \partial_t u_c = - \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| C_{cd}(u_{\mathcal{V}(c)})(u_c - u_d),$$

où les coefficients $C_{cd}(u_{\mathcal{V}(c)}) \geq 0$ dépendent des voisins de c . Cette propriété permet notamment de démontrer un certain nombre de résultats sur la monotonie.

La seconde méthode, appelée *Monoslope*, consiste à reconstruire la solution au sein de la cellule par un polynôme [BJ89]. Nous allons nous attarder maintenant sur cette méthode. Le schéma numérique (7.2.0.2) est d'ordre deux en espace en évaluant le flux numérique $\overline{\mathbf{F}}$ par $\overline{\mathbf{F}}(u_{cd}, u_{dc}, \mathbf{n}_{cd})$ où les reconstructions linéaires u_{cd} et u_{dc} sont telles que

$$\begin{aligned} u_{cd} &= u_c + \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c), \\ u_{dc} &= u_d + \nabla u_d \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_d), \end{aligned} \tag{7.2.1.1}$$

et où \mathbf{x}_c , \mathbf{x}_d et \mathbf{x}_f sont respectivement les centres de masse des cellules c , d et le centre de la face commune aux deux cellules.

Variante de reconstruction linéaire

Une variante de ce schéma, appelée U-MUSCL (*Unstructured MUSCL*), consiste à modifier les reconstructions (7.2.1.1) de la manière suivante

$$\begin{aligned} u_{cd} &= u_c + \frac{\kappa}{2} (u_j - u_i) + (1 - \kappa) \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c), \\ u_{dc} &= u_d + \frac{\kappa}{2} (u_i - u_j) + (1 - \kappa) \nabla u_d \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_d), \end{aligned} \tag{7.2.1.2}$$

avec $\kappa \in [-1, 1]$. Cette modification est due à Burg [Bur05] qui remarque que dans le cas unidimensionnel, sous cette forme, et avec une estimation centrée des gradients ∇u_c et ∇u_d , ce schéma est exactement le κ schéma de van Leer (7.1.1.2). En écrivant (7.2.1.2) sous la forme

$$u_{cd} = \frac{\kappa}{2} (u_d + u_c) + (1 - \kappa) (u_c + \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c)),$$

la reconstruction peut être vue comme une combinaison de l'interpolation linéaire (premier terme) et de l'extrapolation linéaire (deuxième terme) de u_{cd} . Notons que $\kappa = 0$ est la reconstruction MUSCL (7.2.1.1). Cependant, cette méthode n'est d'ordre deux que si le centre de la face \mathbf{x}_f se trouve exactement entre les centres de masse des cellules c et d (voir Fig. 7.2). Par conséquent, une modification doit être utilisée pour préserver la précision d'ordre deux [Nis20] sur des maillages ne vérifiant pas cette condition. Elle consiste à introduire le point \mathbf{x}_p comme le symétrique de \mathbf{x}_c par rapport à \mathbf{x}_f (voir Fig. 7.2). Ainsi, $\mathbf{x}_p = 2\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c - \mathbf{x}_d$. La reconstruction linéaire de la solution à ce point est

$$u_p = u_d + \nabla u_d \cdot \mathbf{x}_p.$$

Cette reconstruction est alors utilisée pour modifier la reconstruction (7.2.1.2) de telle sorte que

$$u_{cd} = u_c + \frac{\kappa}{2} (u_p - u_c) + (1 - \kappa) \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c), \tag{7.2.1.3}$$

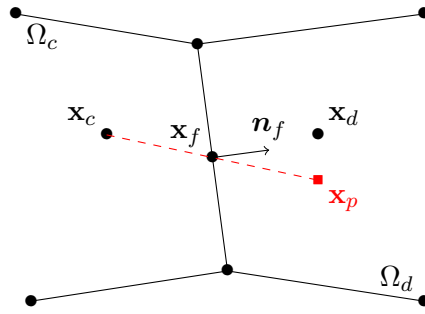


Fig. 7.2. Définition du point \mathbf{x}_p pour la reconstruction u_{cd} du schéma LP-U-MUSCL.

Le schéma LP-U-MUSCL (*Linear Preserving Unstructured MUSCL*) (7.2.1.3) [Nis20] est le schéma U-MUSCL avec la modification de préservation des solutions linéaires. Celui-ci est intéressant à utiliser en raison de sa simplicité et de sa précision avec le choix $\kappa = 1/3$. Comme le montre [Nis21a, PN22], le schéma U-MUSCL avec $\kappa = 1/3$ peut être d'une précision d'ordre trois sur des maillages cartésiens en dimension un. Cependant, seule une précision d'ordre deux peut être obtenue dans notre configuration, à savoir le cas bidimensionnel sur une grille structurée déformée avec un seul point de quadrature pour évaluer le flux sur les faces.

Estimation du gradient

Même si on utilise ici des maillages structurés, on souhaite utiliser des méthodes générales compatibles avec le non structuré. Aussi, le schéma de type MUSCL présenté précédemment nécessite le calcul du gradient des inconnues sur des maillages non structurés. L'évaluation des gradients par une méthode au moins d'ordre un, c'est-à-dire exacte pour les fonctions linéaires, est indispensable pour avoir un schéma globalement d'ordre deux.

Il existe un certain nombre de méthodes qui se basent sur deux approches distinctes : la méthode de Green-Gauss (GG) et la méthode des moindres carrés (LSQ). La première est basée sur l'application du théorème de Green-Ostrogradski. Le gradient est approché par

$$\nabla u_c = \frac{1}{|\Omega_c|} \sum_{c \in \mathcal{V}(d)} |\Gamma_{cd}| \bar{u}_{cd} \mathbf{n}_{cd},$$

où \bar{u}_{cd} est une approximation de u à la face. On peut pour cela utiliser une moyenne arithmétique

$$\bar{u}_{cd} = \frac{u_c + u_d}{2},$$

ou une interpolation linéaire

$$\bar{u}_{cd} = u_c \frac{\|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c\|}{\|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_c\|} + u_d \frac{\|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_d\|}{\|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_c\|}.$$

Cette méthode, appelée *Green-Gauss Cell-Based* ne fait intervenir que les voisins aux faces. Bien qu'elle soit facile à mettre en œuvre et peu coûteuse, ces deux méthodes ne sont précises que si \mathbf{x}_f est le milieu de $[\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_d]$ dans le premier cas ou que si \mathbf{x}_f est situé sur le segment $[\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_d]$ dans le second cas. Pour des maillages cartésiens peu déformés c'est acceptable. Elles ne sont pas très précises sur les

maillages déformés, et un processus itératif coûteux est nécessaire pour les faire converger [SVD⁺17]. Une solution consiste à utiliser le voisinage nodal, en interpolant les grandeurs aux nœuds par un problème de minimisation [HC89, RBY91]. C'est la méthode *Green-Gauss Node-Based*. Elle plus coûteuse mais préserve les champs linéaires, et ne nécessite pas de processus itératif pour améliorer sa précision.

La méthode des moindres carrés (voir Annexe A) est généralement préférée pour sa robustesse et sa précision. Elle est basée sur le développement de Taylor de la solution dans une cellule c sur un stencil $\mathcal{V}(c)$ composé de ses voisins. Cela peut être les voisins par les faces, les voisins par les nœuds, ou un stencil encore plus étendu. Un stencil élargi pour le calcul du gradient permet une plus grande précision, en particulier lorsque le maillage est fortement déformé. De plus il est possible de choisir l'ordre de reconstruction du gradient désiré. Une autre méthode basée sur les moindres carrés, consiste à calculer les gradients aux nœuds des cellules (voir Annexe A.2), et déduire le gradient au centre de la cellule en sommant les gradients aux nœuds pondérés par le nombre de nœuds de la cellule [NW20]. Cette approche se veut plus économique en terme de temps CPU.

Remarque 16

Il est possible d'envisager des reconstructions linéaires, quadratiques ou même d'ordre supérieur [MOG09, CDL11, DCL12, Tso18] mais un schéma d'ordre supérieur à deux nécessite une meilleure approximation de l'intégrale du flux physique sur les faces, et donc d'utiliser deux voire plusieurs points de quadrature sur les faces ce qui peut être coûteux.

7.2.2 Limitation des reconstructions

Le développement de méthodes volumes finis d'ordre élevé préservant la monotonie de la solution pour les lois de conservation scalaires est bien plus complexe dans le cadre multidimensionnel. En effet, un résultat dû à Goodman et LeVeque [GL85] montre qu'en dimension supérieure à un, un schéma TVD est au plus d'ordre un. Ce résultat a poussé à déterminer des contraintes plus faibles pour garantir une certaine monotonie de la solution. La plus exploitée est celle du Principe du Maximum Local (PML) ou critère de Spekreijse [Spe87]

$$\forall c, u_c^{n,\min} \leq u_c^{n+1} \leq u_c^{n,\max}, \quad (7.2.2.1)$$

où $u_c^{n,\min}$ et $u_c^{n,\max}$ sont les valeurs minimale et maximale de la solution pour une cellule c donnée et toutes les cellules adjacentes voisines au temps n , c'est-à-dire

$$u_c^{n,\min} = \min_{d \in \mathcal{V}(c)} (u_c^n, u_d^n), \text{ et } u_c^{n,\max} = \max_{d \in \mathcal{V}(c)} (u_c^n, u_d^n). \quad (7.2.2.2)$$

Nous allons maintenant tenter de déterminer les conditions sur les reconstructions u_{cd} et u_{cd} permettant de garantir le PML, sous une contrainte de stabilité sur le pas de temps, pour l'équation scalaire hyperbolique (7.2.0.1). Le théorème suivant, démontré dans la suite, les énonce.

Théorème 2 (Méthode volumes finis préservant le Principe du Maximum Local sur maillage non-structuré)

Soit $u_c^{n,\min}$ et $u_c^{n,\max}$ (7.2.2.2) les valeurs minimale et maximale de la solution pour une cellule c donnée et toutes les cellules adjacentes voisines au temps n . Le schéma volumes finis donné par

$$u_c^{n+1} = u_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, \hat{u}_{dc}^n, \mathbf{n}_{cd}), \quad (7.2.2.3)$$

avec $\bar{\mathbf{F}}$ la fonction flux monotone et k -lipschitzienne et les reconstructions linéaires limitées par ϕ un limiteur de pente tel que

$$\begin{aligned}\hat{u}_{cd}^n &= u_c^n + \phi_c \nabla u_c^n \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c), \\ \hat{u}_{dc}^n &= u_d^n + \phi_d \nabla u_d^n \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_d),\end{aligned}$$

vérifie le Principe du Maximum Local (7.2.2.1) sous la condition

$$\frac{1}{\Delta t} > \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\Omega_c|} \sup_{\substack{\tilde{u} \in [\min(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n), \max(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n)] \\ \tilde{\tilde{u}} \in [\min(\hat{u}_{dc}^n, u_c^n), \max(\hat{u}_{dc}^n, u_c^n)]}} \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, \hat{u}_{dc}^n, \mathbf{n}_{cd}) - \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{\tilde{u}}}(\hat{u}_{dc}^n, \tilde{\tilde{u}}, \mathbf{n}_{cd}) \right), \quad (7.2.2.4)$$

si les reconstructions sont bornées de la manière suivante

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), \quad \begin{cases} u_c^{n, \min} & \leq 2u_c^n - \hat{u}_{cd}^n & \leq u_c^{n, \max}, \\ u_c^{n, \min} & \leq \hat{u}_{dc}^n & \leq u_c^{n, \max}. \end{cases} \quad (7.2.2.5)$$

Démonstration. Le schéma volumes finis (7.2.2.3) peut se mettre sous la forme

$$u_c^{n+1} = \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\partial\Gamma_c|} [u_c^n - \lambda_c \bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, \hat{u}_{dc}^n, \mathbf{n}_{cd})], \quad (7.2.2.6)$$

avec $|\partial\Gamma_c|$ le périmètre de la cellule c tel que

$$|\partial\Gamma_c| = \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}|,$$

et

$$\lambda_c = \frac{\Delta t |\partial\Gamma_c|}{|\Omega_c|}.$$

De plus, puisque le flux numérique est consistant, on a $\forall u$

$$\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \bar{\mathbf{F}}(u, u, \mathbf{n}_{cd}) = 0.$$

L'équation (7.2.2.6) peut alors s'écrire

$$u_c^{n+1} = \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\partial\Gamma_c|} \alpha_{cd}^n, \quad (7.2.2.7)$$

avec

$$\alpha_{cd}^n = u_c^n - \lambda_c \left(\bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, \hat{u}_{dc}^n, \mathbf{n}_{cd}) - \bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) + \bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) - \bar{\mathbf{F}}(u_c^n, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) \right). \quad (7.2.2.8)$$

Le schéma volumes finis sur maillages non structurés peut être vu comme une combinaison convexe de schéma unidimensionnels. Nous allons donc étudier α_{cd}^n . D'après le théorème de la moyenne, il existe $\tilde{u} \in [\min(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n), \max(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n)]$ et $\tilde{\tilde{u}} \in [\min(\hat{u}_{dc}^n, u_c^n), \max(\hat{u}_{dc}^n, u_c^n)]$ tels que

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{\tilde{u}}}(\hat{u}_{cd}^n, \tilde{\tilde{u}}, \mathbf{n}_{cd}) &= \frac{\bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, \hat{u}_{dc}^n, \mathbf{n}_{cd}) - \bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n, \mathbf{n}_{cd})}{\hat{u}_{dc}^n - u_c^n}, \\ \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) &= \frac{\bar{\mathbf{F}}(\hat{u}_{cd}^n, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) - \bar{\mathbf{F}}(u_c^n, u_c^n, \mathbf{n}_{cd})}{\hat{u}_{cd}^n - u_c^n},\end{aligned}$$

ce qui permet de réécrire (7.2.2.8) comme

$$\alpha_{cd}^n = u_c^n - \lambda_c \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\hat{u}_{cd}^n, \tilde{u}, \mathbf{n}_{cd})(\hat{u}_{dc}^n - u_c^n) + \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, u_c^n, \mathbf{n}_{cd})(\hat{u}_{cd}^n - u_c^n) \right).$$

Cette dernière équation peut se factoriser de la manière suivante

$$\begin{aligned} \alpha_{cd}^n &= u_c^n \left(1 - \lambda_c \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) - \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\hat{u}_{cd}^n, \tilde{u}, \mathbf{n}_{cd}) \right) \right) \\ &\quad + \lambda_c \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, u_c^n, \mathbf{n}_{cd})(2u_c^n - \hat{u}_{cd}^n) - \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\hat{u}_{cd}^n, \tilde{u}, \mathbf{n}_{cd})\hat{u}_{dc}^n \right). \end{aligned}$$

Si les reconstructions vérifient les bornes (7.2.2.5), alors on peut encadrer α_{cd}^n par

$$u_c^n (1 - \sigma_{cd}^n) + \sigma_{cd}^n u_c^{n, \min} \leq \alpha_{cd}^n \leq u_c^n (1 - \sigma_{cd}^n) + \sigma_{cd}^n u_c^{n, \max}, \quad (7.2.2.9)$$

avec

$$\sigma_{cd}^n = \lambda_c \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) - \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\hat{u}_{cd}^n, \tilde{u}, \mathbf{n}_{cd}) \right).$$

Le coefficient σ_{cd}^n est strictement positif d'après les propriétés du flux numérique $\bar{\mathbf{F}}$, supposé monotone. En utilisant (7.2.2.7) et (7.2.2.9), on a alors l'encadrement de la solution au temps t^{n+1}

$$\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\partial \Gamma_c|} (u_c^n (1 - \sigma_{cd}^n) + \sigma_{cd}^n u_c^{n, \min}) \leq u_c^{n+1} \leq \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\partial \Gamma_c|} (u_c^n (1 - \sigma_{cd}^n) + \sigma_{cd}^n u_c^{n, \max}).$$

Afin d'encadrer u_c^{n+1} par des combinaisons convexes, on veut imposer

$$\sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\partial \Gamma_c|} \sigma_{cd}^n < 1,$$

soit

$$\Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} \frac{|\Gamma_{cd}|}{|\Omega_c|} \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\tilde{u}, u_c^n, \mathbf{n}_{cd}) - \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial \tilde{u}}(\hat{u}_{cd}^n, \tilde{u}, \mathbf{n}_{cd}) \right) < 1.$$

Ainsi, on obtient l'encadrement du PML sous la condition de stabilité sur le pas de temps énoncée. \square

Un résultat similaire a été démontré dans [Bla15] pour l'équation d'advection en dimension deux. Le théorème obtenu ici est quelque peu différent de celui de Barth (*Finite volume maximum principle on unstructured meshes*, R_1^0 [BHO17, Th. 22]) pour le même problème. En effet, il ne nous a pas été nécessaire d'introduire le paramètre géométrique de Barth Γ^{geo} (voir [BHO17] pour la définition de Γ^{geo}) qui impacte le pas de temps d'un facteur 1/2 pour des maillages cartésiens. Cependant, l'encadrement des reconstructions (7.2.2.5) n'est pas le même. On constate que ce n'est pas la reconstruction dans la cellule c qui doit être bornée par ses extremum locaux mais la reconstruction opposée \hat{u}_{dc}^n . De plus, il est aussi nécessaire d'encadrer $2u_c - \hat{u}_{cd}^n$, la symétrie de \hat{u}_{cd}^n par rapport à u_c . Dans le cadre unidimensionnel ou d'un maillage cartésien, il est facile de donner un sens à la symétrie de \hat{u}_{cd}^n . Si $\hat{u}_{cd}^n = \hat{u}_i^R$ et \hat{u}_i^R ne dépend pas de κ , alors $2u_c - \hat{u}_{cd}^n = \hat{u}_i^L$.

7.2.2.1 Conception d'un limiteur performant

Le théorème précédent permet donc, en introduisant un limiteur de pente ϕ_c dans les reconstructions \hat{u}_{cd} et \hat{u}_{dc} , d'avoir un schéma volumes finis préservant le PML sur maillage non-structuré. Maintenant, il reste à déterminer la valeur maximale du limiteur permettant de garantir le PML. Une fois déterminée, nous pourrions construire des limiteurs satisfaisant différentes propriétés utiles pour la résolution du système à cinq équations. On veut entre autres des limiteurs robustes pour **l'étape Lagrange**, et un limiteur compressif permettant de mieux représenter les discontinuités pour la fraction volumique dans **l'étape de Transport**.

La proposition suivante caractérise le limiteur induit par l'encadrement des reconstructions (7.2.2.5).

Proposition 21 (Limiteur préservant le Principe du Maximum Local)

Soit \hat{u}_{cd} la reconstruction linéaire u_{cd} limitée par ϕ_c

$$\hat{u}_{cd} = u_c + \phi_c \Delta u_{cd}, \text{ avec } \Delta u_{cd} = \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c). \quad (7.2.2.10)$$

Le limiteur ϕ_c de la reconstruction (7.2.2.10) respectant l'encadrement (7.2.2.5) se caractérise par

$$\phi_c = \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \begin{cases} \min \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{\Delta u_{cd}}, \frac{u_d^{n,\max} - u_c}{\Delta u_{cd}} \right) & \text{si } \Delta u_{cd} > 0, \\ \min \left(\frac{u_c^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|}, \frac{u_c - u_d^{n,\min}}{|\Delta u_{cd}|} \right) & \text{si } \Delta u_{cd} < 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.2.2.11)$$

Démonstration. D'après l'encadrement (7.2.2.5), on a

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), \begin{cases} u_c^{n,\min} \leq 2u_c - \hat{u}_{cd} \leq u_c^{n,\max}, \\ u_d^{n,\min} \leq \hat{u}_{cd} \leq u_d^{n,\max}, \end{cases}$$

soit

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), \begin{cases} u_c^{n,\min} - u_c \leq -\phi_c \Delta u_{cd} \leq u_c^{n,\max} - u_c, \\ u_d^{n,\min} - u_c \leq \phi_c \Delta u_{cd} \leq u_d^{n,\max} - u_c. \end{cases} \quad (7.2.2.12)$$

Maintenant, il faut discriminer les cas en fonction du signe de Δu_{cd}

- Si $\Delta u_{cd} > 0$, le système (7.2.2.12) devient

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), \begin{cases} \frac{u_c - u_c^{n,\max}}{\Delta u_{cd}} \leq \phi_c \leq \frac{u_c - u_c^{n,\min}}{\Delta u_{cd}}, \\ \frac{u_d^{n,\min} - u_c}{\Delta u_{cd}} \leq \phi_c \leq \frac{u_d^{n,\max} - u_c}{\Delta u_{cd}}. \end{cases} \quad (7.2.2.13)$$

Les inégalités de gauche de (7.2.2.13) sont toujours vraies par définition. En effet, on a toujours $u_c - u_c^{n,\max} \leq 0$ et $u_d^{n,\min} - u_c \leq 0$. Cela donne

$$0 \leq \phi_c \leq \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{\Delta u_{cd}}, \frac{u_d^{n,\max} - u_c}{\Delta u_{cd}} \right).$$

- Si $\Delta u_{cd} < 0$, le système (7.2.2.12) devient cette fois

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), \left\{ \begin{array}{l} \frac{u_c - u_c^{n,\min}}{\Delta u_{cd}} \leq \phi_c \leq \frac{u_c - u_c^{n,\max}}{\Delta u_{cd}}, \\ \frac{u_d^{n,\max} - u_c}{\Delta u_{cd}} \leq \phi_c \leq \frac{u_d^{n,\min} - u_c}{\Delta u_{cd}}. \end{array} \right. \quad (7.2.2.14)$$

Les inégalités de gauche de (7.2.2.14) sont toujours vraies par définition. En effet, on a toujours $u_c - u_c^{n,\min} \leq 0$ et $u_d^{n,\max} - u_c \leq 0$. Cela donne

$$0 \leq \phi_c \leq \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \left(\frac{u_d^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|}, \frac{u_c - u_d^{n,\min}}{|\Delta u_{cd}|} \right).$$

- Si $\Delta u_{cd} = 0$, il n'y a pas de contrainte sur le limiteur.

Les résultats précédents permettent de définir la borne supérieure du limiteur ϕ_c qui garantit le PML. Cette borne est donnée par

$$\phi_c = \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \left\{ \begin{array}{ll} \min \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{\Delta u_{cd}}, \frac{u_d^{n,\max} - u_c}{\Delta u_{cd}} \right) & \text{si } \Delta u_{cd} > 0, \\ \min \left(\frac{u_c^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|}, \frac{u_c - u_d^{n,\min}}{|\Delta u_{cd}|} \right) & \text{si } \Delta u_{cd} < 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{array} \right.$$

□

On retrouve un limiteur similaire à celui utilisé par [Bla15] dans le cas de l'advection pure. En pratique, l'évaluation des bornes min et max des cellules voisines peut s'avérer coûteuse plus le voisinage est étendu. Dans le cas de la résolution d'un système de lois de conservation par un schéma en temps implicite nécessitant un processus itératif, l'évaluation des bornes min et max peut grandement impacter le temps de calcul si le voisinage est trop étendu. Le corollaire suivant permet de déterminer un limiteur moins coûteux qui permet de vérifier le PML.

Corollaire 1

Si les reconstructions sont convexes dans le sens où

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), \left\{ \begin{array}{l} \min(u_c^n, u_d^n) \leq 2u_c - u_{cd} \leq \max(u_c^n, u_d^n), \\ \min(u_c^n, u_d^n) \leq u_{dc} \leq \max(u_c^n, u_d^n), \end{array} \right.$$

alors le schéma vérifie le PML.

Démonstration. Le résultat est immédiat puisque qu'on a facilement

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), u_c^{n,\min} \leq \min(u_c^n, u_d^n), \text{ et } \max(u_c^n, u_d^n) \leq u_c^{n,\max},$$

et par symétrie

$$\forall c \in \mathcal{V}(d), u_d^{n,\min} \leq \min(u_d^n, u_c^n), \text{ et } \max(u_d^n, u_c^n) \leq u_d^{n,\max}.$$

□

On a alors un limiteur moins coûteux en temps CPU. Il devient

$$\phi_c = \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \begin{cases} \min \left(\frac{u_c - \min(u_c^n, u_d^n)}{|\Delta u_{cd}|}, \frac{\max(u_c^n, u_d^n) - u_c}{|\Delta u_{cd}|} \right) & \text{si } |\Delta u_{cd}| \neq 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce limiteur est cependant beaucoup trop restrictif en pratique, et la précision du schéma est fortement dégradée. Il est préférable d'utiliser un limiteur moins restrictif et moins coûteux, quitte à ne plus garantir le PML. Ainsi, le limiteur (7.2.2.11) est modifié en remplaçant les quantités $u_d^{n,\min}$ et $u_d^{n,\max}$ par $u_c^{n,\min}$ et $u_c^{n,\max}$. On obtient alors le limiteur

$$\phi_c = \begin{cases} \min \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{|\Delta u_{cd}|^{\max}}, \frac{u_c^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|^{\max}} \right) & \text{si } |\Delta u_{cd}|^{\max} \neq 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.2.2.15)$$

avec

$$|\Delta u_{cd}|^{\max} = \max_{d \in \mathcal{V}(c)} (\Delta u_{cd}).$$

Ce limiteur garantit seulement le Principe du Maximum Global sous la condition sur le pas de temps (7.2.2.4). Il vérifie l'encadrement

$$u_c^{n,\min} \leq u_c \pm \phi_c \Delta u_{cd} \leq u_c^{n,\max}.$$

Le limiteur dernièrement défini est celui retenu dans la suite.

Comparaison avec un limiteur type Barth & Jespersen

Ce limiteur est plus restrictif que celui obtenu originellement par Barth & Jespersen [BJ89]. En effet, ils ont développé le premier limiteur multidimensionnel sur un maillage triangulaire. Afin de préserver une certaine monotonie dans la solution, ils utilisent le critère de Spekreijse [Spe87] pour déterminer le limiteur ϕ_c . Cela revient à demander à ce que la reconstruction u_{cd} reste comprise entre les minima et maxima locaux des cellules voisines. Ainsi

$$u_c^{n,\min} \leq u_c + \phi_c \Delta u_{cd} \leq u_c^{n,\max}.$$

Le limiteur s'écrit alors de manière compacte

$$\phi_c = \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \begin{cases} \max \left(\frac{u_c^{n,\min} - u_c}{\Delta u_{cd}}, \frac{u_c^{n,\max} - u_c}{\Delta u_{cd}} \right) & \text{si } \Delta u_{cd} \neq 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.2.2.16)$$

Remarque 17

Les limiteurs précédents ont été déterminés en posant

$$\Delta u_{cd} = \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c).$$

Dans le cas de la reconstruction U -MUSCL (7.2.1.2) ou LP - U -MUSCL (7.2.1.3), il suffit de définir Δu_{cd} par

$$\Delta u_{cd} = \frac{\kappa}{2} (u_p - u_c) + (1 - \kappa) \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c),$$

pour dans le calcul du limiteur.

Nous allons maintenant détailler plusieurs propriétés intéressantes pouvant être données au limiteur.

7.2.2.2 Limiteur préservant la linéarité

Soit la cellule $d \in \mathcal{V}(c)$ telle que $|\Delta u_{cd}|^{\max} = \Delta u_{cd}$. Supposons aussi que $u_c^{n,\min}$ ou $u_c^{n,\max}$ vaut u_d , alors en définissant Φ par

$$\Phi = \min \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{|\Delta u_{cd}|^{\max}}, \frac{u_c^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|^{\max}} \right).$$

Si la solution est linéaire, on a alors

$$\Phi = 2 + \frac{\nabla u \cdot (\mathbf{x}_c + \mathbf{x}_d - 2\mathbf{x}_f)}{\nabla u \cdot (\mathbf{x}_f + \mathbf{x}_c)} = 2 + \mathcal{O}(\Delta x).$$

Le terme d'ordre un vient du fait que le point d'évaluation de la reconstruction u_{cd} dans (7.2.2.19) ne se situe pas exactement entre les deux centres de masse. Ainsi, le limiteur vaut $2 + \mathcal{O}(\Delta x)$ lorsque la solution est linéaire. Il ne préserve pas l'ordre deux. Afin de préserver la linéarité de la solution, Barth & Jespersen ont imposé à leur limiteur (7.2.2.16) de satisfaire la condition

$$\phi_c \leq 1. \tag{7.2.2.17}$$

Celle-ci permet d'assurer que la reconstruction soit exacte dans le cas où la solution continue est linéaire. Le limiteur (7.2.2.15) devient

$$\phi_c = \begin{cases} \min(1, \Phi) & \text{si } |\Delta u_{cd}|^{\max} \neq 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{7.2.2.18}$$

Dans la suite, nous ferons un abus de langage en appelant la fonction $\min(1, \Phi)$ comme le limiteur de Barth & Jespersen, alors qu'un limiteur de type Barth & Jespersen correspond à la forme (7.2.2.16).

Remarque 18 (Multidimensional Limiting Process)

Il est possible de modifier l'évaluation du limiteur. Plutôt que d'évaluer la reconstruction non limitée aux centres des faces, elle peut s'évaluer aux nœuds. Ainsi, l'argument Φ dans le limiteur (7.2.2.18) devient

$$\Phi = \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{|\Delta u_{cn}|^{\max}}, \frac{u_c^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cn}|^{\max}} \right), \text{ et } |\Delta u_{cn}|^{\max} = \max_{n \in \mathcal{N}(c)} \Delta u_{cn}. \tag{7.2.2.19}$$

où

$$\Delta u_{cn} = \nabla u_c \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_c),$$

et \mathbf{x}_n est la coordonnée du nœud n . Les valeurs $u_c^{n,\min}$, $u_c^{n,\max}$ peuvent être prises dans un voisinage global de la cellule, ou dans un voisinage local au nœud. Cette modification vérifie toujours que la reconstruction est bornée par les minima et maxima locaux, puisque pour une reconstruction linéaire, les extrema dans une cellule sont atteints à un nœud. Cette méthode est appelée MLP (Multidimensional Limiting Process) [KK05, PYK10, DFM⁺21]. Elle est plus restrictive et conduit donc en général à des schémas plus robustes mais plus diffusifs.

7.2.2.3 Limiteur préservant la monotonie

Certains limiteurs ont la propriété de préserver la monotonie de la reconstruction, dans le sens où

$$\forall d \in \mathcal{V}(c), u_c \leq u_d \implies \hat{u}_{cd} \leq \hat{u}_{dc}. \quad (7.2.2.20)$$

Lorsqu'il s'agit de résoudre des écoulements diphasiques à grand rapport de pression ou de densité, comme dans l'étude de l'interaction d'une colonne de gaz dans du liquide que l'on présentera dans le [Chapitre 8](#), la propriété de préservation de la monotonie peut être essentielle, afin d'améliorer la robustesse du schéma numérique. Le très connu limiteur unidimensionnel *Minmod* vérifie cette condition, ce qui explique pourquoi il est très utilisé dans les codes industriels. Dans une approche volumes finis *Cell-Centered* sur maillage déformé, une telle condition est applicable à un limiteur. En effet, pour satisfaire au principe de monotonie, la reconstruction de u_c doit être comprise entre $\bar{u}_c^{\min} = \min_{d \in \mathcal{V}(c)}(u_c, \bar{u}_{cd})$ et $\bar{u}_c^{\max} = \max_{d \in \mathcal{V}(c)}(u_c, \bar{u}_{cd})$ où \bar{u}_{cd} est une valeur moyenne entre u_c et u_d sur leur face commune. Elle est telle que

$$\frac{\bar{u}_{cd} - u_c}{\|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c\|} = \frac{u_d - \bar{u}_{cd}}{\|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c\|}.$$

Ainsi,

$$\bar{u}_{cd} = \frac{u_c \omega_c + u_d \omega_d}{\omega_c + \omega_d}, \quad \omega_c = \|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_c\|^{-1}.$$

On obtient alors le limiteur (7.2.2.18) avec

$$\Phi = \max \left(\frac{\bar{u}_c^{\min} - u_c}{|\Delta u_{cd}|^{\max}}, \frac{\bar{u}_c^{\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|^{\max}} \right).$$

Cette fois, lorsque la solution est linéaire, on a directement $\Phi = 1 + \mathcal{O}(\Delta x)$.

7.2.2.4 Limiteur compressif

A l'inverse, il est possible d'enlever la contrainte de préservation de la monotonie (7.2.2.20) ainsi que la contrainte de préservation des solutions linéaires (7.2.2.17) pour seulement garantir le Principe du Maximum Global. Le limiteur ϕ_c devient alors

$$\phi_c = \begin{cases} \Phi & \text{si } |\Delta u_{cd}|^{\max} \neq 0, \\ 1 & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec

$$\Phi = \min \left(\frac{u_c - u_c^{n,\min}}{|\Delta u_{cd}|^{\max}}, \frac{u_c^{n,\max} - u_c}{|\Delta u_{cd}|^{\max}} \right).$$

Ce limiteur correspond alors à la borne supérieure de la zone admissible pour garantir le Principe du Maximum Global. De plus, on constate numériquement qu'il a la même propriété que les limiteurs unidimensionnel *Superbee*, *Overbee*, *Ultrabee* à savoir être compressif. Il permet de mieux représenter les discontinuités. De manière générale, un paramètre $\beta \in [1, \infty[$ est introduit pour contrôler le caractère compressif du limiteur [[QCM106](#), [Bla15](#), [CSN17](#), [DFM⁺21](#), [TPV22](#)]. Il s'écrit alors

$$\phi_c = \begin{cases} \min(\beta, \Phi) & \text{si } |\Delta u_{cd}|^{\max} \neq 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.2.2.21)$$

Si $\beta = 1$, on retrouve le limiteur de Barth & Jespersen. Si $\beta > 1$, le limiteur est compressif. Sur un maillage cartésien, on peut facilement montrer que la limite supérieure de $|\Delta u_{cd}|^{\max}$ est atteinte lorsque la solution est linéaire. On a alors $|\Delta u_{cd}|^{\max} = 2$. Cela explique pourquoi le paramètre β est souvent défini comme prenant les valeurs 1 ou 2 [Bla15, CSN17, DFM+21]. Un tel limiteur permet alors de réduire drastiquement la diffusion numérique de la fraction volumique lors de l'**étape de Transport**, comme nous l'illustrerons dans le [Chapitre 8](#).

7.2.2.5 Limiteur différentiable

Le limiteur de Barth & Jespersen donné par la fonction $\phi^{BJ}(\Phi) = \min(1, \Phi)$ peut être modifié. Venkatakrishan [Ven95], constate en effet que la convergence vers un état stationnaire est dégradée à cause de son caractère non-différentiable. Il propose de remplacer $\min(1, \Phi)$ dans (7.2.2.18) par

$$\phi^{VK}(\Phi) = \frac{\Phi^2 + 2\Phi}{\Phi^2 + \Phi + 2}.$$

Le limiteur de Venkatakrishan préserve la linéarité de la solution mais peut prendre des valeurs supérieures à 1. Pour améliorer la précision des reconstructions d'ordre élevé, Michalak et al. [MOG09] puis Nishikawa [Nis22] ont développé de nouvelles familles de limiteurs différentiables permettant de préserver les solutions d'ordre supérieur à deux. Dans l'approche de décomposition Lagrange-Transport, pour laquelle l'**étape Lagrange** peut être résolue par un schéma implicite, un tel limiteur peut grandement aider la convergence du processus itératif nécessaire à la résolution de cette étape, comme nous le détaillerons dans la [section 7.3](#).

Ainsi, nous avons développé un limiteur robuste, défini comme suit.

Proposition 22

Soit ϕ la fonction limiteur telle que

$$\phi_{x_p}^d(x) = \begin{cases} \frac{1}{d-1} \left[d \frac{x}{x_p} - \left(\frac{x}{x_p} \right)^d \right], & \text{si } x < x_p, \\ 1 & \text{si } x \geq x_p, \end{cases} \quad (7.2.2.22)$$

avec d en entier strictement supérieur à 1 et $x_p \in [1, 2]$ un réel. Cette fonction limiteur préserve l'ordre deux

$$\phi_{x_p}^d(x_p + \Delta x) = 1 + \mathcal{O}(\Delta x^2).$$

Dans ce limiteur différentiable, la quantité x_p permet, comme pour les limiteurs de Michalak et al [MOG09], de régler $\min(x)$ tel que $\phi_{x_p}^d(x) = 1$. Plus x_p est proche de 2 et plus le limiteur est diffusif. Il est nécessaire de choisir $x_p \leq 2$ pour garantir dans le cas linéaire que le limiteur préserve l'ordre deux. De plus, on veut imposer que

$$\forall x > 0, \phi_{x_p}^d < x.$$

Une condition nécessaire est de choisir d et x_p tels que $d/(d-1) < x_p$. Ce limiteur différentiable est plus diffusif que les limiteurs de Nishikawa [Nis22] et permet de préserver l'ordre deux. Son caractère plus diffusif assure une meilleure robustesse, notamment lors de la résolution implicite de l'**étape Lagrange**.

7.3 Schéma en temps

L'utilisation d'un schéma en temps précis est nécessaire lors de la simulation d'écoulement instationnaire. De plus, un tel schéma temporel doit permettre de préserver les bonnes propriétés du schéma numérique d'ordre un. Nous allons discuter dans cette partie de l'utilisation d'un schéma en temps d'ordre élevé dans le cas de la décomposition Lagrange-Transport, ainsi que la stratégie mise en place dans l'étape Lagrange lorsque la résolution est implicite et le schéma d'ordre deux en espace est utilisé.

7.3.1 Schéma explicite pour la décomposition Lagrange-Transport

Le schéma temporel est important pour augmenter la précision du schéma global, en particulier lorsque des schémas d'ordre élevé en espace sont utilisés. Cela permet d'éviter l'apparition d'artefacts numériques qui dégraderont la solution, comme le montre par exemple [DFM⁺21]. Dans le cas de la résolution d'un système écrit sous la forme semi-discrète

$$\partial_t \mathbf{U} = \mathbf{R}(\mathbf{U}, t),$$

où $\mathbf{R}(\mathbf{U}, t)$ correspond à la discrétisation spatiale du second membre de la loi de conservation étudiée. On utilise de manière naïve le schéma Euler-Explicite

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, \Delta t), \quad (7.3.1.1)$$

où Δt est le pas de temps et \mathbf{U}^n est le vecteur solution au temps $t^n = n\Delta t$. Ce schéma n'est que d'ordre un en temps. Une famille de schémas temporels appelée SSP-RK (*Strong Stability Preserving Runge-Kutta*) a été initialement introduite par Shu & al. [Shu88, SO88]. Un schéma à s étages s'écrit

$$\begin{cases} \mathbf{U}^0 = \mathbf{U}^n, \\ \mathbf{U}^k = \sum_{j=1}^{k-1} (\alpha_{kj} \mathbf{U}^j + \beta_{kj} \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^j, t^j)), \quad \forall k = 1, s, \\ \mathbf{U}^s = \mathbf{U}^{n+1}, \end{cases}$$

où les coefficients α_{kj} , β_{kj} sont choisis astucieusement de manière à atteindre l'ordre désiré. Ces schémas permettent entre autres de préserver les états convexes. En effet, si les coefficients α_{kj} et β_{kj} sont positifs, alors \mathbf{U}^k s'écrit sous la forme

$$\mathbf{U}^k = \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_{kj} \left(\mathbf{U}^j + \frac{\beta_{kj}}{\alpha_{kj}} \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^j, t^j) \right).$$

Par soucis de consistance, on doit avoir

$$\sum_{j=1}^{k-1} \alpha_{kj} = 1.$$

Le schéma SSP-RK est une combinaison convexe de la méthode d'Euler Explicite (7.3.1.1) avec le pas de temps Δt_{RK} satisfaisant une condition de stabilité en fonction de celui de schéma Explicite Δt_E

$$\Delta t_{RK} \leq \min_{kj} \frac{\beta_{kj}}{\alpha_{kj}} \Delta t_E.$$

Ainsi, si toutes les bonnes propriétés du schéma ont été déterminées avec le schéma temporel Euler-Explicite, alors elles sont préservées par les schémas SSP-RK. Dans le cas de l'approche Lagrange-Transport détaillée dans le [Chapitre 5](#), \mathbf{U} correspond au vecteur des variables conservatives et $\mathbf{R}(\mathbf{U}^n, \Delta t)$ au second membre. Le schéma peut s'écrire sous cette forme peu importe la discrétisation temporelle employée sur l'étape Lagrange. Cependant, il n'est pas évident que ce schéma soit d'ordre deux en temps dans le cas de la stratégie de décomposition d'opérateur en raison de la dépendance du flux numérique par rapport au pas de temps (comme expliqué dans la [remarque 7](#)). En effet, le flux numérique est une approximation du premier ordre en temps de l'opérateur spatial. De plus, on souhaite utiliser un schéma implicite pour l'étape **Lagrange**.

7.3.2 Schéma implicite pour l'étape Lagrange

On rappelle que la résolution de l'étape Lagrange par un schéma temporel implicite est basée sur la résolution d'un système vitesse-pression. Ce système est quasi-linéaire, et peut être considéré comme linéaire en figeant les termes de volume spécifique et de vitesse du son lagrangienne. Ainsi, à l'ordre un en espace, la résolution implicite de cette étape nécessite seulement la résolution d'un système linéaire. Cependant, lorsqu'on utilise le schéma du second ordre en espace, les non-linéarités introduites par le limiteur font qu'il est impossible d'écrire le saut de flux sous la forme d'un produit matrice-vecteur de \mathbf{X} . Une façon conventionnelle de résoudre les systèmes non linéaires est d'utiliser une méthode de quasi-Newton. Reprenons la résolution implicite de l'étape Lagrange, détaillée dans la [Sec. 5.3.2](#) du [Chapitre 5](#). On a

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^n - \vartheta^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{R}(\mathbf{V}^{n+1}). \quad (7.3.2.1)$$

Par soucis de clarté, on omet les notations lourdes liées à la résolution en vitesse-pression. On rappelle que \mathbf{R} est le second membre construit à partir du flux acoustique \mathbf{G} et du flux des termes de dissipation visqueuse et de conduction thermique \mathbf{D} . Pour résoudre ce système non-linéaire, on introduit la fonction f telle que

$$\mathbf{f}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} - \mathbf{V}^n + \vartheta^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{R}(\mathbf{X}).$$

On cherche le vecteur solution \mathbf{X} tel que $\mathbf{f}(\mathbf{X}) = 0$. La méthode de Newton est le processus itératif qui permet de déterminer une suite de $(\mathbf{X}^k)_k$ qui converge vers \mathbf{V}^{n+1} . On a alors

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{X}} (\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k) = -\mathbf{f}(\mathbf{X}^k), \quad (7.3.2.2)$$

où

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{X}} = \left(\text{Id} + \vartheta^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} \right).$$

La matrice $\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}}(\mathbf{X}^k)$ est approchée par $\mathbf{M}^{o1} = \frac{\partial \mathbf{R}^{o1}}{\partial \mathbf{X}}(\mathbf{X}^k)$ où \mathbf{R}^{o1} correspond au second membre construit avec le flux numérique d'ordre un. Le flux en vitesse-pression étant linéaire, on obtient finalement le processus itératif suivant

$$\left(\text{Id} + \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{M}^{o1} \right) (\mathbf{V}^{k+1} - \mathbf{V}^k) = -\mathbf{V}^k + \mathbf{V}^n - \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{R}^{o2}(\mathbf{V}^k), \quad (7.3.2.3)$$

où le second membre est construit avec le schéma d'ordre deux. La convergence du processus itératif est étudiée sur le second membre de (7.3.2.3). Lorsque la norme L_2 de chacune des composantes du vecteur

$$-\mathbf{V}^k + \mathbf{V}^n - \vartheta^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{R}^{o2}(\mathbf{V}^k),$$

est inférieur à un seuil ϵ , le processus a convergé. En pratique, on ajoute un nombre maximal d'itérations $\kappa_{\max} = 20$.

Amélioration du schéma implicite

Dans [TPV22], nous avons montré qu'un schéma implicite d'ordre un mais avec une erreur de troncature plus petite pouvait être obtenu en modifiant le second membre de (7.3.2.1). Soit θ un réel tel que

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^n - \vartheta^n \frac{\Delta t}{|\Omega|} (\theta \mathbf{R}(\mathbf{V}^{n+1}) + (1 - \theta) \mathbf{R}(\mathbf{V}^n)). \quad (7.3.2.4)$$

On appelle généralement une telle discrétisation temporelle un θ -schéma. Si $\theta = 0$, le schéma est explicite, alors que si $\theta = 1$, on retrouve le schéma implicite étudié précédemment. Si $\theta = 1/2$, on a le schéma de Crank-Nicolson modifié. On l'appelle ainsi car ce schéma n'est pas d'ordre deux, étant donné qu'on a gardé le volume ϑ au temps t^n dans l'équation (7.3.2.4). Ce choix nous permet de rester globalement conservatif après **l'étape de Transport**. Pour résoudre le θ -schéma par un processus itératif, il suffit de modifier la fonction \mathbf{f} introduite précédemment par

$$\mathbf{f}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} - \mathbf{V}^n + \frac{\Delta t}{|\Omega|} (\theta \mathbf{R}(\mathbf{X}) + (1 - \theta) \mathbf{R}(\mathbf{V}^n)),$$

et d'après (7.3.2.2), on en déduit en faisant les mêmes hypothèses que dans la cas purement implicite à savoir l'approximation sur la jacobienne du flux

$$\left(\mathbf{I}_d + \theta \frac{\Delta t}{|\Omega|} \mathbf{M}_{up}^{o1} \right) (\mathbf{V}^{k+1} - \mathbf{V}^k) = -\mathbf{V}^k + \mathbf{V}^n - \frac{\Delta t}{|\Omega|} (\theta \mathbf{R}^{o2}(\mathbf{V}^k) + (1 - \theta) \mathbf{R}^{o2}(\mathbf{V}^n)).$$

Nous avons en outre le résultat suivant sur l'erreur de troncature du θ -schéma.

Proposition 23

L'erreur de troncature du θ -schéma sous la forme semi-discrète

$$\frac{\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^n}{\Delta t} = -\vartheta^n (\theta \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}^{n+1}) + (1 - \theta) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}^n)),$$

est donnée par

$$\tau_{\Delta t} = \frac{\Delta t}{2} (\partial_t^2 \mathbf{V}(t) + 2\theta \vartheta(t) \partial_t \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))) + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

où \mathbf{V} est la solution exacte.

Démonstration. L'erreur de troncature est définie par

$$\tau_{\Delta t} = \frac{\mathbf{V}(t + \Delta t) - \mathbf{V}(t)}{\Delta t} + \vartheta(t) (\theta \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t + \Delta t)) + (1 - \theta) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))).$$

On a alors

$$\begin{aligned}
 \tau^n &= \frac{\mathbf{V}(t + \Delta t) - \mathbf{V}(t)}{\Delta t} + \vartheta(t) (\theta \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t + \Delta t)) + (1 - \theta) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))), \\
 &= \partial_t \mathbf{V}(t) + \frac{\Delta t}{2} \partial_t^2 \mathbf{V}(t) + \vartheta(t) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t)) + \theta \Delta t \nabla \cdot (\partial_t \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))) + O(\Delta t^2), \\
 &= [\partial_t \mathbf{V}(t) + \vartheta(t) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))] + \frac{\Delta t}{2} [\partial_t^2 \mathbf{V}(t) + 2\theta \vartheta(t) \nabla \cdot \partial_t \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))] + O(\Delta t^2), \\
 &= \frac{\Delta t}{2} [\partial_t^2 \mathbf{V}(t) + 2\theta \vartheta(t) \nabla \cdot \partial_t \mathbf{G}(\mathbf{V}(t))] + O(\Delta t^2).
 \end{aligned}$$

□

D'après l'erreur de troncature calculée précédemment, on peut voir que le nouveau schéma implicite, appelé θ -schéma, produit une erreur plus petite, notamment avec $\theta = 1/2$, que le schéma Euler-implicite correspondant au choix $\theta = 1$. Nous nous attendons donc à obtenir des résultats numériques plus précis avec ce choix.

Remarque 19

En régime faiblement compressible, on a $\partial_t \vartheta(t) \simeq 0$. Le choix $\theta = 1/2$ donne ainsi une erreur de troncature $\tau^n = O(\Delta t^2)$. Le schéma sera d'ordre deux en temps en régime incompressible.

7.4 Schéma de type Godunov non-conservatif : extension au second ordre

Dans le [Chapitre 6](#), nous avons introduit la notion de schéma de type Godunov non-conservatif. Le schéma précédemment a été construit en considérant la solution de manière constante dans chacune des cellules. L'extension à l'ordre deux nécessite de faire attention à cette considération. Nous allons voir précisément dans le cadre unidimensionnel que le produit non-conservatif nécessite de traiter un problème de Riemann à l'intérieur même de la cellule, afin de faire apparaître une contribution d'ordre deux. L'extension au cadre multidimensionnel se fera naturellement.

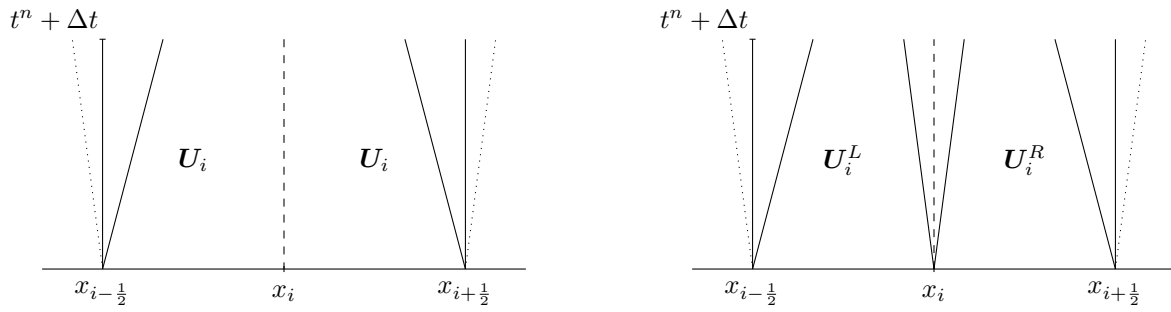
7.4.1 Extension au second ordre : cadre unidimensionnel

Nous reprenons toutes les notations du [Chapitre 6](#). Cette fois, on considère le problème illustré sur la [Fig. 7.3](#), où la solution n'est pas constante par morceaux. En effet, en utilisant un schéma de type MUSCL par exemple, où les flux sont évalués par une reconstruction polynomiale de la solution au sein des cellules, on peut considérer qu'il existe au sein de la cellule i deux états constants \mathbf{U}_i^L et \mathbf{U}_i^R , calculés à partir des variables reconstruites telles que

$$\mathbf{U}_i^L + \mathbf{U}_i^R = 2\mathbf{U}_i.$$

Cette idée a notamment été utilisée par LeVeque [[LeV98](#)]. Ainsi, on va résoudre quatre problèmes de Riemann. D'après la définition d'un schéma de type Godunov, on a

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \frac{1}{4} \left(\mathbf{U}_{i-\frac{1}{2}}^+ + \mathbf{U}_i^- + \mathbf{U}_i^+ + \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^- \right), \quad (7.4.1.1)$$



(a) Structure du problème de Riemann lorsque la solution est constante par morceaux. (b) Structure du problème de Riemann lorsque la solution n'est pas constante par morceaux.

Fig. 7.3. Structure du problème de Riemann.

avec

$$\begin{aligned} U_{i-\frac{1}{2}}^+ &= \frac{4}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{4}}} \mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta t}; U_{i-1}^R, U_i^L \right) dx, \\ U_i^- &= \frac{4}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{4}}}^{x_i} \mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i-\frac{1}{4}}}{\Delta t}; U_i^L, U_i^R \right) dx, \\ U_i^+ &= \frac{4}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{4}}} \mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{4}}}{\Delta t}; U_i^L, U_i^R \right) dx, \\ U_{i+\frac{1}{2}}^- &= \frac{4}{\Delta x} \int_{x_{i+\frac{1}{4}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{W} \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; U_i^R, U_{i+1}^L \right) dx. \end{aligned}$$

D'après la définition des flux (6.1.1.6), on a alors directement les expressions

$$\begin{aligned} U_{i-\frac{1}{2}}^+ &= U_i^L + \frac{4\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{F}_{i-\frac{1}{2}}^+ - F_{i-\frac{1}{4}} \right) - \frac{4\Delta t}{\Delta x} (\overline{P\Delta B})_{i-\frac{1}{2}}^+, \\ U_i^- &= U_i + \frac{4\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i-\frac{1}{4}} - \overline{F}_i^- \right) - \frac{4\Delta t}{\Delta x} (\overline{P\Delta B})_i^-, \\ U_i^+ &= U_i + \frac{4\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{F}_i^+ - F_{i+\frac{1}{4}} \right) - \frac{4\Delta t}{\Delta x} (\overline{P\Delta B})_i^+, \\ U_{i+\frac{1}{2}}^- &= U_i^R + \frac{4\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i-\frac{1}{4}} - \overline{F}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) - \frac{4\Delta t}{\Delta x} (\overline{P\Delta B})_{i+\frac{1}{2}}^-. \end{aligned}$$

Ici, la relation de consistance avec la forme intégrale (voir Def. 9) est supposée vérifiée par les flux intermédiaires \overline{F}_i^- et \overline{F}_i^+ . Ils sont alors égaux. En injectant les relations précédentes dans la définition d'un schéma de type Godunov (7.4.1.1), on obtient

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\overline{F}_{i+\frac{1}{2}}^- - \overline{F}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\overline{P\Delta B})_{i+\frac{1}{2}}^- + (\overline{P\Delta B})_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \overline{P\Delta B}_i,$$

où on voit alors apparaître une contribution d'ordre deux du produit non-conservatif, centrée sur la cellule, et donnée par

$$\overline{P\Delta B}_i = \overline{P\Delta B}_i^- + \overline{P\Delta B}_i^+.$$

La nécessité d'avoir une contribution centrée du produit non-conservatif pour des schémas de type volumes finis d'ordre deux n'est pas nouvelle [Bou04]. Ce résultat est cohérent avec le schéma

construit par Audusse & *al.* [ABB⁺04, AB04] pour les équations de Saint-Venant. Ici, nous avons mis en évidence son apparition dans le cadre de schéma de type Godunov non-conservatif. En appliquant les mêmes approximations que dans le cas d'ordre un du Chapitre 6, on définit les produits non-conservatifs centrés par

$$\overline{P\Delta B}_i^- = \overline{P}_i^- \left(\overline{B}_i^- - B_i^L \right) \quad \text{et} \quad \overline{P\Delta B}_i^+ = \overline{P}_i^+ \left(B_i^R - \overline{B}_i^+ \right).$$

Le flux \overline{B}_i^\pm peut être pris centré, c'est-à-dire, $\overline{B}_i^\pm = B_i = (B_i^L + B_i^R) / 2$. Le terme centré devient donc

$$\overline{P\Delta B}_i = \frac{1}{2} \left(\overline{P}_i^- + \overline{P}_i^+ \right) \left(B_i^R - B_i^L \right).$$

On constate alors que, à l'ordre un, sans reconstruction, ce terme est nul puisque $B_i^R = B_i^L = B_i$. Cependant, si on souhaite également appliquer un schéma d'ordre élevé sur le produit non-conservatif, de type MUSCL par exemple, la prise en compte de ce terme centré est absolument nécessaire. Il ne joue cependant ni sur la construction des flux, ni sur la notion de consistance. Enfin, la discrétisation des termes

$$\overline{P}_i^- \quad \text{et} \quad \overline{P}_i^+,$$

peut être faite identiquement à celle de l'ordre un, en prenant soin d'être consistant avec P et en vérifiant que le schéma garantisse les solutions équilibre.

7.4.2 Extension au second ordre : cadre multidimensionnel

Nous reprenons toutes les notations du Chapitre 6 dans le contexte des schémas de type Godunov multidimensionnels non-conservatifs. Par analogie avec le cas unidimensionnel, on peut montrer que le schéma de type Godunov multidimensionnel non-conservatif d'ordre deux possède aussi un second terme centré de l'approximation du produit non-conservatif. Le flux numérique d'ordre deux $\overline{F}_{ncf}(\mathbf{U}_{cd}, \mathbf{U}_{dc}, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f)$ associé au solveur de Riemann \mathbf{W}_{ncf} est toujours défini par

$$\overline{F}_{ncf} = \mathbf{F}_c \cdot \mathbf{n}_f - \int_{-\infty}^0 (\mathbf{W}_{ncf}(\xi; \mathbf{U}_{cd}, \mathbf{U}_{dc}, \mathcal{P}_n, \mathbf{n}_f) - \mathbf{U}_c) d\xi - (\overline{P\Delta B})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f.$$

Le schéma global devient

$$\mathbf{U}_c^{n+1} = \mathbf{U}_c^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{n \in \mathcal{N}(c)} \sum_{f \in \mathcal{SF}(nc)} |\Gamma_{ncf}| \left(\overline{F}_{ncf} + (\overline{P\Delta B})_{ncf} \cdot \mathbf{n}_f + (\overline{P\Delta B})_{cf} \cdot \mathbf{n}_f \right),$$

avec

$$(\overline{P\Delta B})_{ncf} = \overline{P}_{ncf}^-(\mathbf{U}_{cd}, \mathbf{U}_{dc}) (\mathbf{B}(\mathbf{U}_{dc}) - \mathbf{B}(\mathbf{U}_{cd})),$$

et le terme centré défini par la même approximation

$$(\overline{P\Delta B})_{cf} = \overline{P}_{cf}^-(\mathbf{U}_c, \mathbf{U}_{cd}) \left(\mathbf{B}(\mathbf{U}_{cd}) - \overline{B}_c^+ \right).$$

Ce dernier terme est exactement le même que dans le cas unidimensionnel. Il reste alors à approcher le flux \overline{B}_c^+ par $\mathbf{B}(\mathbf{U}_c)$, et discrétiser le terme \overline{P}_{cf}^- de manière consistante avec P .

7.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthode MUSCL permettant d'améliorer la précision des schémas de type Godunov à l'ordre deux sans trop d'effort. Après un rappel des résultats unidimensionnel, nous avons présenté un résultat permettant d'obtenir un schéma préservant le Principe du Maximum Local sous condition sur le pas de temps, avec un encadrement particulier des reconstructions. Le limiteur induit étant coûteux à évaluer, nous l'avons quelque peu relaxé pour garantir seulement le Principe du Maximum Global. Ensuite, la fonction limitation appliquée à un tel limiteur peut satisfaire différentes propriétés intéressantes selon les applications. Préserver la linéarité est essentiel pour garantir l'ordre deux, alors que préserver la monotonie de la reconstruction permet d'être plus robuste. La convergence d'un processus itératif nécessite l'utilisation d'un limiteur différentiable pour converger plus rapidement. Le caractère compressif est quant à lui intéressant à utiliser pour le transport d'une quantité discontinue comme la fraction volumique dans le système à cinq équations. L'extension à l'ordre deux en temps a aussi été abordée, et un θ -schéma implicite plus précis dans le cadre de la décomposition Lagrange-Transport a été développé. De plus, nous avons étendu la notion de schéma de type Godunov non-conservatif au cas où la solution discrète est discontinue au sein des cellules. Cette considération est étudiée pour construire un schéma consistant vis-à-vis de l'approche MUSCL. Nous avons mis en évidence l'apparition d'un terme centré lié au produit non-conservatif, qu'il est nécessaire d'évaluer. Le schéma ainsi construit est d'ordre deux en espace et préserve les discontinuités de contact dans le cas CSF.

Le chapitre suivant présentera une évaluation de ces méthodes sur une batterie de cas tests permettant de les comparer et de les valider pour traiter l'application visée.

Troisième partie

Résultats numériques

Chapitre 8

Validation numérique

Sommaire

8.1 Schémas numériques et conditions aux limites	166
8.1.1 Schéma temporel	166
8.1.2 Reconstruction et limitation	166
8.1.3 Tension de surface	168
8.1.4 Conditions aux limites	168
8.1.5 Raffinement du maillage avec une loi β	173
8.2 Transport pur	174
8.2.1 Disque de Zalesak	174
8.2.2 Advection de Kothe-Rider	175
8.3 Modèle à cinq équations réduit	176
8.3.1 Tube à choc diphasique unidimensionnel	176
8.3.2 Interaction choc/bulle	176
8.3.3 Interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau	179
8.4 Modèle à cinq équations réduit avec dissipation visqueuse	184
8.4.1 Plaque plane laminaire	184
8.4.2 Cavité entraînée	184
8.5 Modèle à cinq équations réduit avec tension de surface	186
8.5.1 Goutte d'eau à l'équilibre	187
8.5.2 Oscillation d'une goutte ellipsoïdale	190
8.5.3 Atténuation visqueuse d'une onde capillaire	193
8.6 Conclusion	195

Dans ce chapitre, nous allons soumettre les méthodes numériques présentées précédemment à un ensemble de cas académiques. Ces validations numériques vont nous permettre de comparer les schémas unidimensionnel et multidimensionnel, d'observer l'intérêt d'utiliser une correction bas-Mach pour certains écoulements ou encore de comparer les deux formulations utilisées pour prendre en compte les forces de tension de surface. L'approche MUSCL utilisée pour monter en ordre doit aussi permettre d'améliorer la précision des résultats, et l'utilisation d'un limiteur compressif de limiter la diffusion de l'interface.

Dans un premier temps, nous allons rappeler l'ensemble des méthodes et des outils numériques utilisés dans la suite. Ensuite, les cas de validation numériques sont présentés et regroupés en quatre

catégories : les cas de transport pur, les cas de validation acoustique du système à cinq équations réduit, les cas de validation de la prise en compte de la dissipation visqueuse et enfin les cas de validation de la prise en compte des forces de tension de surface.

8.1 Schémas numériques et conditions aux limites

8.1.1 Schéma temporel

La stratégie de décomposition Lagrange-Transport nous permet de choisir entre un schéma implicite ou un schéma explicite pour la résolution de l'**étape Lagrange**. On appellera EXEX (EXplicit-EXplicit) le schéma explicite sur l'**étape Lagrange** et IMEX (IMplicit-EXplicit) sa version implicite. Lorsqu'on utilisera le θ schéma décrit précédemment, on l'appellera CNEX (Crank-Nicolson-EXplicit). Sauf mention contraire, on utilisera toujours $\theta = 1/2$ lorsqu'on parlera du θ -schéma CNEX. Si, sur la résolution globale, on emploie le schéma temporel SSPRK2 (Strong-Stability-Preserving Runge-Kutta 2), on ajoutera le suffixe -RK2 au nom du schéma. Il est donné par

$$\begin{cases} \mathbf{U}^1 &= \mathbf{U}^n + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^n, \Delta t), \\ \mathbf{U}^2 &= \mathbf{U}^* + \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{U}^*, \Delta t), \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \frac{1}{2} (\mathbf{U}^n + \mathbf{U}^2). \end{cases}$$

Le pas de temps utilisé est toujours calculé en prenant le minimum de tous les pas de temps relatifs aux phénomènes physiques considérées, multiplié par un nombre CFL C inférieur à 1, tel que

$$\Delta t = C \min (\Delta t_a, \Delta t_u, \Delta t_v, \Delta t_t, \Delta t_c),$$

où $\Delta t_a, \Delta t_u, \Delta t_v, \Delta t_t, \Delta t_c$, sont respectivement les pas de temps liés aux contraintes acoustiques (6.2.4.1), contraintes de transport (5.4.0.1), contraintes de dissipation visqueuse et conduction thermique (5.2.2.1) et contraintes capillaires (6.2.4.2). Cependant, si une stratégie implicite est utilisée sur l'**étape Lagrange**, le pas de temps devient simplement

$$\Delta t = C \Delta t_u,$$

dans la mesure où l'**étape de Transport** est toujours résolue avec un schéma explicite en temps. Lorsqu'un schéma d'ordre deux en espace est employé, le nombre CFL doit être divisé par deux afin de vérifier la condition de stabilité donnée dans le [Théorème 2](#).

8.1.2 Reconstruction et limitation

On rappelle que deux schémas différents ont été présentés dans le [Chapitre 6](#) pour résoudre la partie acoustique de l'**étape Lagrange**, en prenant éventuellement en compte les forces de tension de surface sous la forme CSF (2.3.1.1) : un schéma unidimensionnel et un schéma multidimensionnel. Le flux numérique du schéma unidimensionnel ne dépend que des voisins aux faces, tandis que le stencil du flux numérique du schéma multidimensionnel dépend lui des voisins aux nœuds attachés à cette face. Ces deux schémas s'étendent à l'ordre deux d'une manière un peu différente.

La méthode LP-U-MUSCL (Linear Preserving Unstructured MUSCL, voir (7.2.1.3)) est utilisée avec $\kappa = 1/3$ pour calculer les reconstructions des grandeurs sur les variables primitives pour le

schéma unidimensionnel. L'extension du schéma LP-U-MUSCL au schéma multidimensionnel n'est pas évidente dans la mesure où les variables reconstruites ne le sont pas aux centres des faces mais aux nœuds. Ainsi, pour le schéma multidimensionnel, on utilisera simplement la méthode MLP (voir [Rem. 18](#)). Les minima et maxima locaux sont calculés avec le voisinage aux nœuds. Tous les gradients sont calculés avec la méthode des moindres carrés quadratique décrite dans l'[Annexe A](#) en utilisant le même stencil, sans aucun poids.

Lors de l'**étape Lagrange**, on reconstruit les variables primitives (\mathbf{u}, p) car le flux ne dépend que de la pression et de la vitesse, tandis que lors de l'**étape de Transport**, on reconstruit $(\rho_1, \rho_2, \mathbf{u}, p, z)$. Si la modélisation CSS ([2.3.2.1](#)) est employée, il est aussi nécessaire de reconstruire l'énergie capillaire lors de cette étape, afin de déterminer l'énergie totale. Si la modélisation CSF ([2.3.1.1](#)) est employée, et qu'on souhaite prendre en compte le terme centré d'ordre deux du produit non-conservatif (voir [Sec. 7.4](#) du [Chapitre 7](#)), il est également nécessaire de reconstruire la courbure κ et la fraction volumique z .

Deux limiteurs distincts seront utilisés. Le premier, est le limiteur différentiable robuste $\phi_{x_p}^d$ ([7.2.2.22](#)) présenté dans le [Chapitre 7](#), avec $d = 5$ et $x_p = 2$. Son caractère diffusif assure une meilleure robustesse, notamment lors de la résolution implicite de l'**étape Lagrange**. Ce limiteur est appliqué à toutes les variables excepté la fraction volumique lors de l'**étape de Transport**. Ainsi, le second limiteur employé est le limiteur compressif ([7.2.2.21](#)) avec $\beta = 2$, permettant de largement réduire la diffusion numérique de l'interface.

Lorsque l'**étape Lagrange** est résolue par un schéma implicite, avec le schéma d'ordre deux en espace, on ajoute également dans la matrice du processus itératif les contributions des reconstructions non limitées [[MOG07](#)], en se restreignant à une matrice à neuf diagonales. Cette stratégie, avec une matrice, plus étoffée que simplement la jacobienne exacte du schéma à l'ordre un, améliore la convergence du processus itératif.

Lorsqu'on utilise les corrections bas-Mach, présentées dans la [Sec. 6.3](#) du [Chapitre 6](#), avec la résolution de l'**étape Lagrange** par un schéma implicite, la matrice est construite avec la jacobienne exacte du flux, donc la correction bas-Mach est incluse dans la matrice. Cela permet de converger à l'ordre un en espace en une seule itération. Cependant, à l'ordre deux en espace dans l'**étape Lagrange**, le processus itératif peut parfois mettre plusieurs dizaines d'itérations pour converger. Pour améliorer la convergence, on remplace les limitations ϕ_c des reconstructions de l'**étape Lagrange** dans la cellule c par ϕ_c^L comme ceci

$$\phi_c^L = f(1 - m_p) + (1 - f(1 - m_p))\phi_c,$$

où

$$f(u) = 2u^3 - 3u^2 + 1,$$

et

$$m_p = \min_{d \in \mathcal{V}(c)} \left(\frac{p_c}{p_d}, \frac{p_d}{p_c} \right)^3.$$

La grandeur m_p permet de détecter les grands ratios de pression dans le voisinage $\mathcal{V}(c)$ de la cellule c . Si ce ratio est proche de 0, alors on est situé au voisinage d'un choc, et on ne souhaite pas modifier ϕ_c . Si ce ratio est proche de 1, alors la cellule considérée est dans une zone lisse, loin d'un choc, et on peut se permettre remplacer ϕ_c par ϕ_c^L qui sera proche de 1. La fonction f [[MOG09](#)] permet une transition douce entre les deux cas extrêmes. Cette stratégie permet d'améliorer la convergence du processus itératif, en tuant les non-linéarités des limiteurs. La fonction f a été introduite dans

[MOG09] pour faire la transition entre des reconstructions à l'ordre deux et des reconstructions à l'ordre plus élevé.

De plus, lorsque la correction bas Mach est employée dans une cellule, on modifie le paramètre θ comme ceci

$$\text{si } \theta_{LM} < 1, \text{ alors } \theta_{LM} = 0.$$

Là encore, l'élimination des non-linéarités de θ_{LM} permet d'améliorer la convergence du processus itératif.

8.1.3 Tension de surface

Pour le schéma multidimensionnel avec tension de surface sous la forme CSF (2.3.1.1), nous avons vu dans la Sec. 6.2.3.4 du Chapitre 6 que deux choix étaient possibles pour définir la courbure : aux faces ou aux nœuds. Nos expériences numériques ont montré que le choix de la courbure aux nœuds est plus diffusif numériquement que le choix aux faces. Par exemple sur le cas de l'oscillation d'une goutte ellipsoïdale présentée dans la Sec. 8.5.2, l'amplitude des oscillations était moins grande avec le choix aux nœuds. Ainsi, sauf mention contraire, la courbure sera définie aux faces.

La courbure est toujours estimée aux centres des cellules à partir des moments de la fraction volumique, calculés par la méthode des moindres carrés quadratique présentée en Annexe A. Ainsi, on a

$$\begin{aligned} \kappa_c &= -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla z}{|\nabla z|} \right) \\ &= \left(\frac{2z_x z_y z_{xy} - z_x^2 z_{yy} - z_y^2 z_{xx}}{(z_x^2 + z_y^2)^{3/2}} \right), \end{aligned}$$

avec la notation $z_\bullet = \frac{\partial z}{\partial \bullet}$, etc...

Lorsqu'on utilise la formulation CSS (2.3.2.1), l'énergie capillaire est calculée à partir du gradient de la fraction volumique, estimée de la même manière que les gradients du schéma à l'ordre deux, à partir de la méthode des moindres carrés quadratique détaillée en Annexe A.

8.1.4 Conditions aux limites

8.1.4.1 Conditions aux limites générales

Nous allons présenter très brièvement les conditions aux limites utilisées dans ces travaux. La plus part d'entre elles sont classiques. Les flux sur les bords sont calculés à l'aide de cellules fictives, dans lesquelles sont imposées les grandeurs nécessaires à l'évaluation des flux.

Condition de Neumann homogène

Pour utiliser des conditions de sortie, on utilise la condition de Neumann homogène : les valeurs des grandeurs dans la maille fictive sont les mêmes que celles dans la maille interne voisine.

Condition de paroi

Pour les conditions de paroi, il est nécessaire d'évaluer les flux de la partie acoustique de l'étape **Lagrange** et l'étape de **Transport** afin de faire rebondir les ondes. La vitesse de la maille fictive est telle que la vitesse normale à la paroi est nulle et la vitesse tangentielle à la paroi est égale à

la vitesse de la maille interne. Pour la dissipation visqueuse, on veut imposer une vitesse nulle à la paroi. On impose alors dans la maille fictive la vitesse opposée de la maille interne.

Condition de symétrie

Pour les conditions de symétrie, on effectue la même procédure qu'un mur, en prenant soin de ne pas appliquer la condition de non-glissement sur la dissipation visqueuse.

Condition périodique

L'utilisation de conditions périodiques avec des maillages structurés est assez simple. Puisque les quatre bords se font face avec le même nombre de mailles, il suffit d'imposer dans les mailles fictives la grandeur dans la maille interne du bord opposé.

8.1.4.2 Condition limite de mouillage

Pour traiter des configurations où un point triple apparaît (voir Fig. 2.2 dans le Chapitre 2), induisant un phénomène de mouillage, nous avons mis en place une condition aux limites adaptées aux maillages quelconques pour les formulations CSS et CSF.

Le cas du maillage cartésien

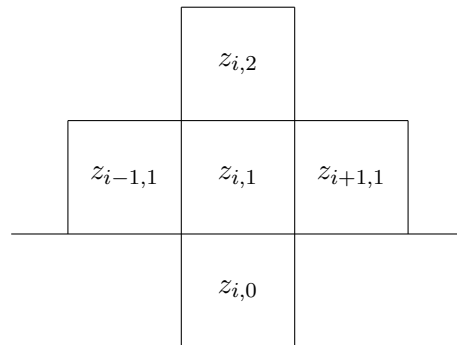


Fig. 8.1. Schéma du stencil utilisé pour calculer ∇z près d'une paroi.

Lorsque le liquide est en contact avec une paroi, il est nécessaire de considérer le problème du point triple. En ce point, le gradient de la fraction volumique doit respecter la condition

$$\nabla z \cdot \mathbf{n} = |\nabla z| \cos(\theta), \quad (8.1.4.1)$$

où ∇z est orienté du liquide vers le gaz ($z_l = 0, z_g = 1$), \mathbf{n} est la normale sortante à la paroi et θ est l'angle de mouillage que nous imposons. De nombreux auteurs proposent d'imposer directement dans le flux numérique de la formulation CSS

$$\frac{\nabla z_{cd}^n \cdot \mathbf{n}_{cd}}{|\nabla z_{cd}^n|} = \cos(\theta).$$

Cependant, il reste certains termes à déterminer dans le flux qui dépendent de la fraction volumique, ainsi que l'énergie capillaire. Pour remédier à ce problème, l'idée retenue ici consiste à utiliser une condition aux limites dans les cellules fantômes, qui permet de calculer la courbure, pour prendre en compte le phénomène de mouillage sur tout type de maillage. On utilise pour cela la condition de mouillage (8.1.4.1) dans une cellule qui a une face sur laquelle le mouillage s'applique. En effet, dans le cas d'un maillage cartésien sur la face inférieure (voir Fig. 8.1), si l'on considère le calcul du gradient dans la dernière cellule au mur avec ses quatre voisines par une méthode des moindres carrés linéaire, l'équation (8.1.4.1) s'écrit de manière discrète

$$\begin{pmatrix} z_{i+1,1} - z_{i-1,1} \\ z_{i,2} - z_{i,0} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{(z_{i+1,1} - z_{i-1,1})^2 + (z_{i,2} - z_{i,0})^2} \cos(\theta) \quad (8.1.4.2)$$

En élevant au carré l'équation (8.1.4.2), nous avons alors une équation quadratique à résoudre. Celle-ci a 2 solutions réelles, $z_{i,0}^+$ et $z_{i,0}^-$

$$z_{i,0}^\pm = z_{i,2} \pm \cot(\theta)(z_{i+1,1} - z_{i-1,1}).$$

Pour choisir la solution qui dirige le gradient du côté désiré, il faut regarder les 4 configurations possibles (voir Fig. 8.2) en fonction de l'angle θ et du signe de $(z_{i+1,1} - z_{i-1,1})$. On en déduit que

$$z_{i,0} = z_{i,2} - \cot(\theta)|z_{i+1,1} - z_{i-1,1}|.$$

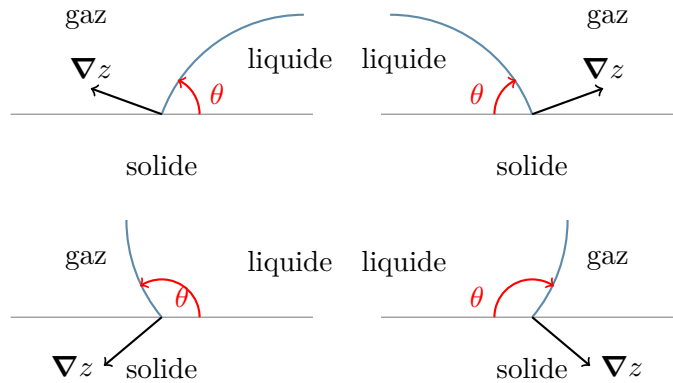


Fig. 8.2. Schéma des 4 configurations possibles.

Cette condition a été utilisée pour la première fois par [DS07], en calculant le gradient avec la méthode des différences finies de manière équivalente, dans le cadre de la simulation d'écoulements de fluides incompressibles.

Remarque 20

Il est possible que $z_{i,0}$ prenne des valeurs négatives. Ainsi, nous utiliserons cette condition de paroi exclusivement pour le calcul de la courbure à l'intérieur du domaine (pas dans les cellules fictives).

Le cas du maillage non structuré

Une généralisation de cette condition pour les maillages non structurés est possible. En effet, puisque nous calculons les gradients par une méthode des moindres carrés linéaire, nous avons une

expression presque analytique du gradient de

$$A_i \nabla z_i = \mathbf{b}_i, \quad (8.1.4.3)$$

où A_i ne dépend que de la géométrie et \mathbf{b}_i est le vecteur de la différence de fraction volumique entre la cellule i et ses voisines. La fraction volumique est également donnée par (8.1.4.3) par

$$\nabla z_i = X \mathbf{a} + \mathbf{b},$$

avec \mathbf{a} , \mathbf{b} deux vecteurs donnés en annexe et $X = z_0$ où z_0 est la valeur de z que l'on veut imposer dans la cellule fantôme de la paroi. La résolution de (8.1.4.1) s'écrit alors

$$(X \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 = \cos(\theta)^2 |X \mathbf{a} + \mathbf{b}|^2,$$

donc

$$X^2 ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})^2 - c^2 |\mathbf{a}|^2) + 2X ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) - c^2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + ((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 - c^2 |\mathbf{b}|^2) = 0,$$

avec $c = \cos(\theta)$. Le discriminant de cette équation quadratique peut être réduit à

$$\begin{aligned} \Delta &= 4 ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) - c^2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 - 4 ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})^2 - c^2 |\mathbf{a}|^2) ((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 - c^2 |\mathbf{b}|^2), \\ &= 4 ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})^2 (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 + c^4 (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 - 2c^2 (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \\ &\quad - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})^2 (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 + c^2 ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})^2 |\mathbf{b}|^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 |\mathbf{a}|^2) - c^4 |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2), \\ &= 4c^2 (c^2 ((\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 - |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2) (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})^2 |\mathbf{b}|^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})^2 |\mathbf{a}|^2 - 2(\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{a}| |\mathbf{b}|), \\ &= 4c^2 \left(((\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{b}| - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{a}|)^2 - c^2 (\mathbf{a} \wedge \mathbf{b})^2 \right). \end{aligned}$$

On peut alors exhiber 2 solutions réelles X^+ et X^- . Pour choisir la bonne, on peut faire une analogie avec le cas cartésien. Il faut alors choisir z_0 tel que

$$z_0 = \begin{cases} \min(X^+, X^-) & \text{si } \theta < \pi/2, \\ \max(X^+, X^-) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ainsi, une condition limite a été construite qui permet de respecter la condition de paroi mouillante, sans avoir à l'imposer directement dans le calcul du flux numérique.

Remarque 21

Le discriminant peut théoriquement prendre une valeur négative. Cela n'a jamais été observé dans les simulations réalisées. Cependant, afin d'avoir une condition limite robuste si $\Delta < 0$, on peut utiliser à la place la fraction volumique calculée par différences finies comme dans le cas du maillage cartésien.

Remarque 22

L'hypothèse que $z_l = 0$ et $z_g = 1$ a été faite pour dériver ces conditions aux limites. Si l'on souhaite utiliser $z_l = 1$ et $z_g = 0$, les calculs restent vrais, à condition de remplacer θ par $\pi - \theta$.

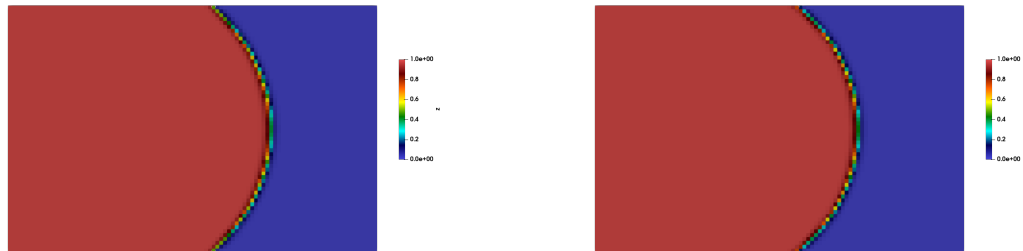
	P (Pa)	ρ (kg.m ⁻³)	\mathbf{u} (m.s ⁻¹)	z	γ	π (Pa)
liquide	10^5	10^3	$\mathbf{0}$	1	4.4	6.8×10^8
gaz	10^5	1	$\mathbf{0}$	0	1.4	0

Tab. 8.1. Mouillage : données initiales.

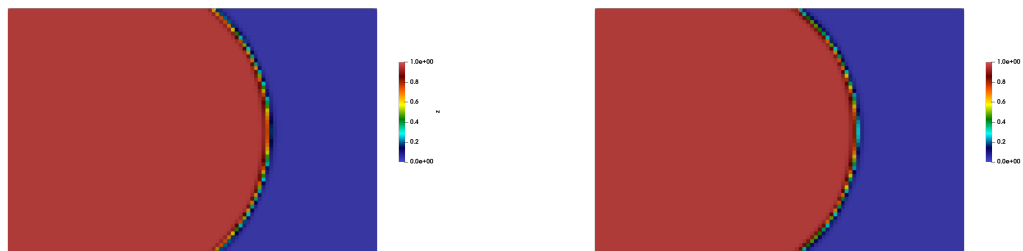
Validation numérique

On cherche ici à valider la condition de mouillage, et de montrer qu'elle est compatible avec les approches CSF et CSS. On se donne un domaine de taille $[0, 12 \times 10^{-5}] \text{ m} \times [0, 8 \times 10^{-5}] \text{ m}$, composé d'une sortie à gauche et de trois murs. Le domaine est rempli d'un gaz jusqu'en $x = 8 \times 10^{-5} \text{ m}$ modélisé par un gaz parfait et d'un liquide à partir de $x > 8 \times 10^{-5} \text{ m}$ suivant la loi des gaz parfaits. Les données des deux fluides sont détaillées dans le [Tab. 8.1](#). Le coefficient de tension de surface est de $72 \times 10^{-3} \text{ Pa}$. Pour illustrer un mouillage significatif, on prend un angle de mouillage de 30° et 150° .

Initialement, l'interface est plane, donc la courbure est infinie. Le gradient de la fraction volumique est partout orienté dans le sens de l'abscisse, sauf dans la première maille fictive au niveau de l'interface liquide/gaz. La courbure calculée est alors non-nulle dans la maille proche paroi, et l'interface est mise en mouvement. La fraction volumique est présentée au temps $t_f = 10^{-3} \text{ s}$ sur les [Fig. 8.3](#) et [Fig. 8.4](#), un temps suffisant pour obtenir une solution stationnaire. Les résultats sont



(a) Schéma unidimensionnel.

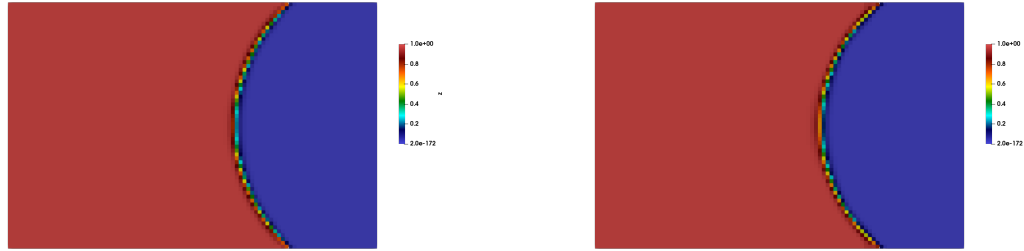


(b) Schéma multidimensionnel.

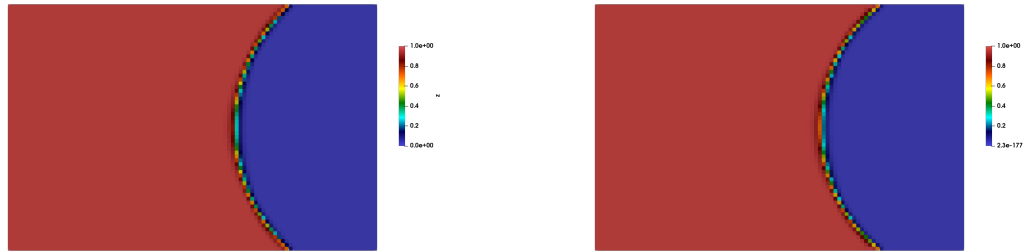
Fig. 8.3. Simulation du mouillage à 30° : fraction volumique du gaz au temps final. Approche CSF (à gauche) et CSS (à droite).

presque identiques pour les deux schémas avec les modélisations CSF et CSS. La même démarche

est réalisée avec un angle de 150° . Le liquide est alors non mouillant. Les résultats numériques sont cohérents avec l'angle imposé. L'approche est ainsi validée.



(a) Schéma unidimensionnel.



(b) Schéma multidimensionnel.

Fig. 8.4. Simulation du mouillage à 150° : fraction volumique du gaz au temps final. Approche CSF (à gauche) et CSS (à droite).

8.1.5 Raffinement du maillage avec une loi β

Le raffinement du maillage avec une loi β est généralement utilisé pour resserrer le maillage proche de la paroi, afin de résoudre précisément les couches limites. Dans le contexte de maillages structurés curvilignes, les nœuds x_i du maillage sont déplacés de la manière suivante

$$x_i^r = x_p + (x_m - x_p) \left(1 + \beta \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right),$$

avec

$$p_i = \exp \left(\log \left(\frac{\beta + 1}{\beta - 1} \right) (1 - i/n_x) \right), \quad \beta > 1,$$

où x_i^r est la coordonnée du nœud après raffinement, x_p est la coordonnée sur la ligne de maillage du nœud à la paroi, x_m est la coordonnée sur la ligne de maillage du nœud le plus loin de la paroi et n_x est le nombre de cellules sur la ligne de maillage. On remarque que les nœuds de coordonnées x_p et x_m ne sont pas déplacés par la loi β , tandis que tous les autres nœuds de la ligne de maillage sont rapprochés de la paroi. La Fig. 8.5 illustre le fonctionnement de la méthode pour $\beta = 1.1$. Le paramètre β doit être strictement supérieur à 1. Plus β tend vers 1 et plus le maillage sera raffiné proche de la paroi.

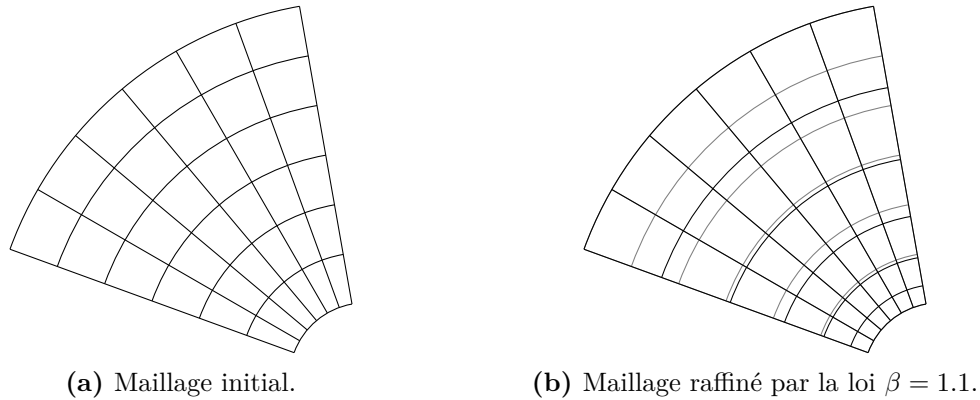


Fig. 8.5. Illustration de la méthode de raffinement du maillage.

8.2 Transport pur

Cette section a pour objectif de valider l'approche utilisée pour la résolution numérique de l'étape de transport, notamment celui de la fraction volumique du modèle diphasique, afin de limiter sa diffusion numérique. Pour cela, nous allons étudier des cas académiques de transport pur, plus ou moins complexes.

8.2.1 Disque de Zalesak

Nous considérons ici le célèbre disque de Zalesak [Zal79]. Ce disque, possédant une encoche, est placé dans un champ de vitesse $\mathbf{u}(x, y) = (0.5 - y, x - 0.5)$ m.s⁻¹ dans le domaine $\Omega = [0, 1] \text{ m} \times [0, 1] \text{ m}$. Au temps initial, le disque est défini par

$$z(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } (\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\| < R) \text{ et } (|x - c_x| \geq e \text{ ou } y - c_y > l), \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec $\mathbf{x} = (x, y)$, $\mathbf{c} = (0.5, 0.75)$ m le centre du disque, $R = 0.15$ m le rayon, $e = 0.025$ m la largeur de l'encoche et $l = 0.1$ m sa hauteur. Le ratio $\Delta x/R \simeq 0.026$ est suffisamment petit pour une bonne résolution du problème. Un nombre CFL de 0.4 sur un maillage de 256×256 cellules est utilisé avec des conditions aux limites de Neumann homogène. Les résultats donnés sur la figure Fig. 8.6 sont obtenus après une révolution au temps $t_f = 2\pi$ s. Nous allons comparer les résultats obtenus à l'ordre un et à l'ordre deux avec différents choix sur le paramètre β du limiteur compressif.

Les calculs à l'ordre un, à l'ordre deux avec $\beta = 1$ et à l'ordre deux avec $\beta = 2$ sont présentés sur la Fig. 8.6. Le schéma d'ordre un est bien trop diffusif pour transporter fidèlement la géométrie. L'utilisation d'un schéma à l'ordre deux améliore nettement les résultats, mais l'interface est bien plus raide avec le limiteur compressif, c'est-à-dire, le choix $\beta = 2$. La forme du disque est bien préservée, presque symétrique.

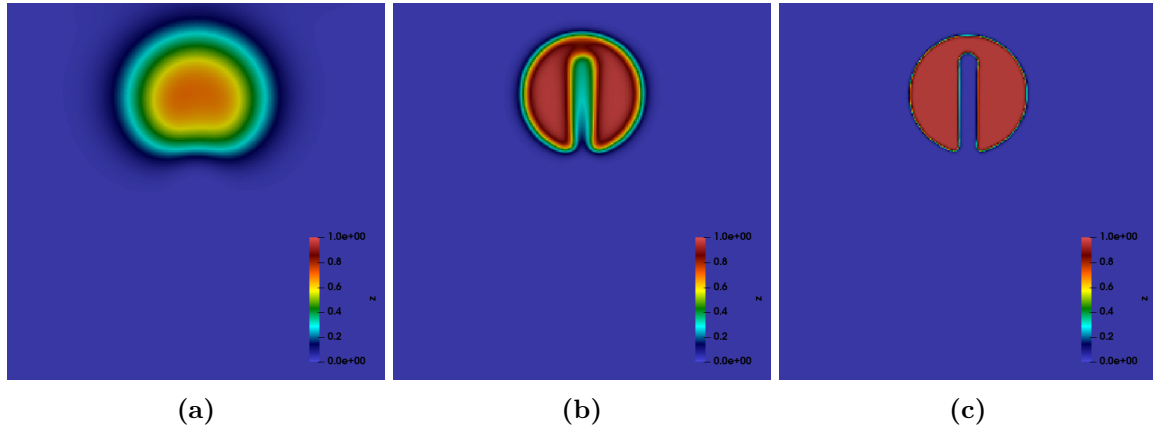


Fig. 8.6. Disque de Zalesak : ordre un (a), ordre deux avec $\beta = 1$ (b) et ordre deux avec $\beta = 2$ (c).

8.2.2 Advection de Kothe-Rider

On considère maintenant le cas test de l'advection de Kothe-Rider [RK98] sur un domaine $\Omega = [0, 1] \text{ m} \times [0, 1] \text{ m}$. Ce cas consiste à placer un disque dans un champ de vitesse tel que

$$\mathbf{u}(x, y, t) = \begin{pmatrix} -\sin(\pi y) \cos(\pi y) \sin(\pi x)^2 \cos(\pi t/t_f) \\ \sin(\pi x) \cos(\pi x) \sin(\pi y)^2 \cos(\pi t/t_f) \end{pmatrix}.$$

Le disque de rayon $R = 0.15 \text{ m}$ est placé au point $(0.5, 0.75) \text{ m}$. Le nombre CFL est de 0.4 et le maillage est constitué de 256×256 cellules, avec des conditions aux limites constantes. Le ratio $\Delta x/R$ est donc le même que pour le cas précédent. Les résultats donnés sur la figure Fig. 8.7 sont obtenus au temps intermédiaire $t = 3 \text{ s}$ et au temps final $t_f = 6 \text{ s}$. D'abord, jusqu'à $t = 3 \text{ s}$, le champ

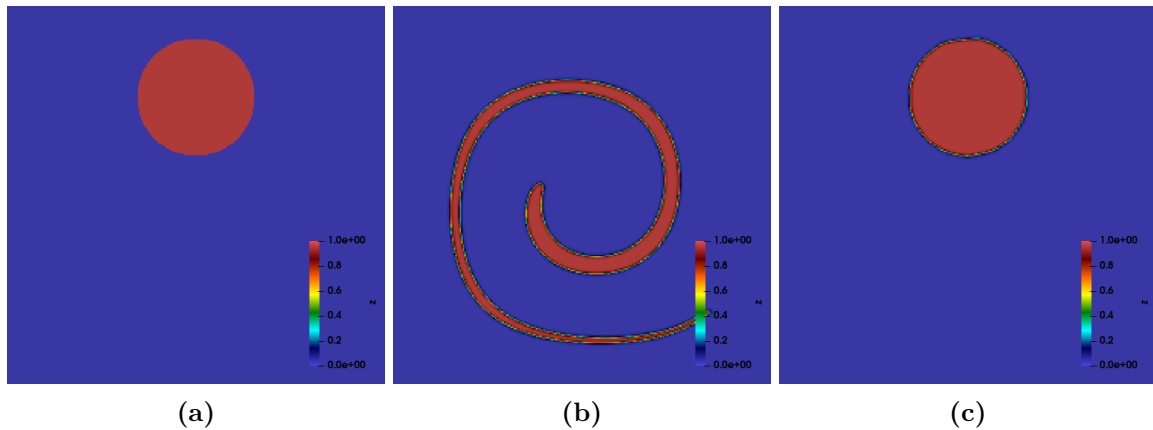


Fig. 8.7. Advection de Kothe-Rider. Condition initial (a), solution à $t = 3$ (b) et solution au temps final $t = 6 \text{ s}$ (c).

de vitesse déforme le cercle en un filament. Ce dernier (voir Fig. 8.7.b) est bien capturé dans les régions où il est suffisamment grand vis-à-vis de la taille des cellules. Ensuite, le champ de vitesse rembobine le filament pour reformer un disque. A la fin, la forme du disque est assez bien préservée (voir Fig. 8.7.c).

8.3 Modèle à cinq équations réduit

Maintenant que nous avons présenté les avantages de la méthode LP-U-MUSCL avec un limiteur compressif, nous allons valider l’approche de décomposition Lagrange-Transport sur différents cas académiques.

8.3.1 Tube à choc diphasique unidimensionnel

Dans le cas d’un écoulement purement unidimensionnel, les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sont équivalents. On s’intéresse alors à la résolution d’un tube à choc liquide/gaz de type Sod sur le domaine $\Omega = [0, 1]$ m, étudié dans [VSM16] par exemple. L’équation d’état des gaz raides est utilisée pour le liquide, tandis que le gaz est modélisé par la loi des gaz parfaits. Les conditions initiales sont les suivantes

$$(\rho, u, p, \gamma, \pi) = \begin{cases} (10^3, 0, 10^9, 4.4, 6 \times 10^8) & \text{si } x \leq 0.7 \text{ m,} \\ (5, 0, 10^5, 1.4, 0) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le nombre CFL est de 0.25. Un maillage de 1000 cellules est utilisé, avec des conditions aux limites de type Neumann homogène. Le temps final est $t_f = 240 \mu\text{s}$. Ce cas permet de tester la capacité des différents schémas à représenter avec précision les trois ondes de ce problème. On retrouve une détente, une discontinuité de contact, et un choc. Ce cas test est assez difficile au vu des grands ratios de pression et de densité présents. Les résultats de comparaison des schémas d’ordre un en espace pour les approches IMEX, CNEX, EXEX et EXEX-RK2 sont présentés sur la Fig. 8.8. Les résultats sont en bon accord avec la solution exacte pour les différents schémas temporels. L’approche purement implicite est aussi la plus diffusive, alors que l’approche CNEX permet d’obtenir des résultats aussi précis que le schéma purement explicite avec le pas de temps implicite. En effet, le pas de temps lié à la contrainte acoustique est 60 fois plus petit que celui lié à la contrainte de transport.

Nous allons maintenant comparer à l’ordre deux en espace les différents schémas temporels. Cette comparaison est faite sur la Fig. 8.9. On constate que tous les schémas en temps donnent d’excellents résultats. Comme attendu, l’approche EXEX explicite sur l’étape **Lagrange** est toujours la moins diffusive. Ce comportement se retrouve sur le schéma implicite CNEX, qui est en fait une moyenne des deux approches sur l’étape **Lagrange**. De plus, l’utilisation d’un limiteur compressif sur la fraction volumique limite grandement la diffusion numérique de l’interface liquide/gaz. On peut observer un *undershoot* sur la discontinuité de contact de la densité à l’ordre deux. Cette observation, appelée *wall heating*, est souvent faite lorsque des techniques de limitation de diffusion de l’interface sont utilisées, comme le schéma d’antidiffusion [KL10, FBC⁺11]. La compréhension profonde de ce phénomène et sa correction est cependant hors du cadre de ces travaux.

8.3.2 Interaction choc/bulle

Nous considérons maintenant un premier cas bidimensionnel d’interaction choc/bulle plan. Ce cas a largement été étudié dans la littérature [SA99a, KL10, Jun13, PGM17]. Le domaine rectangulaire $\Omega = [0, 2] \text{ m} \times [0, 1] \text{ m}$ contient un cylindre de gaz de rayon $R = 0.4 \text{ m}$ à $(0.5, 0.5) \text{ m}$ initialement au repos dans un liquide alors qu’un choc initialement en $x = 0.04 \text{ m}$ se propage dans le liquide de la gauche vers la droite (voir Fig. 8.10). Les conditions initiales de chaque phases sont données dans Tab. 8.2. La phase gazeuse est modélisée par l’équation d’état des gaz parfaits avec $\gamma = 1.4$ tandis

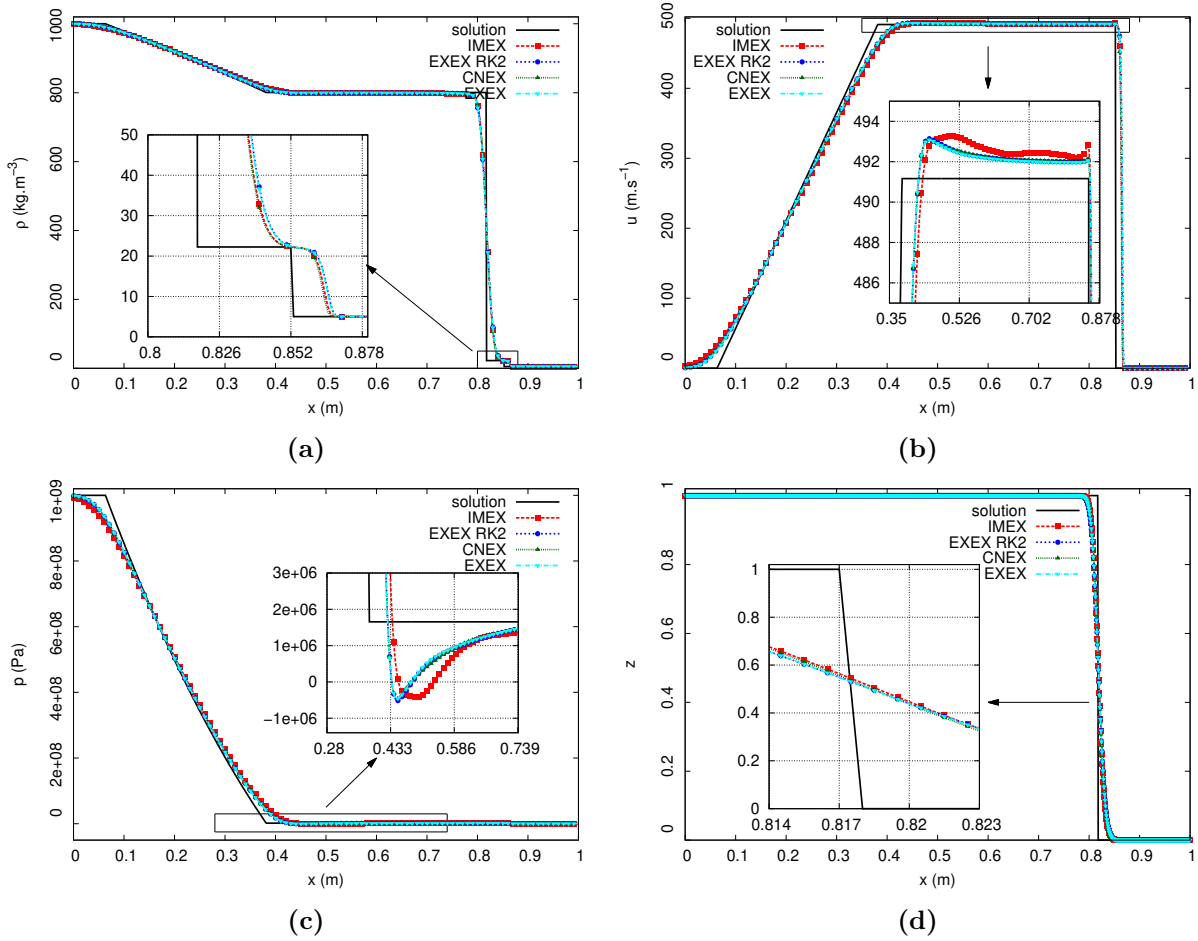


Fig. 8.8. Tube à choc diphasique unidimensionnel : la densité (en haut à gauche), la vitesse (en haut à droite), la pression (en bas à gauche) et la fraction volumique (en bas à droite) sont comparées au temps final $t_f = 240 \mu$ avec la solution exacte. Sauf pour la fraction volumique où tous les points sont affichés, une cellule est représentée tous les dix points pour plus de clarté.

	ρ (kg.m ⁻³)	\mathbf{u} (m.s ⁻¹)	p (Pa)
Liquide (choc)	1030.9	(300,0)	3×10^9
Liquide	1000	(0,0)	10^5
Gaz	1	(0,0)	10^5

Tab. 8.2. Interaction choc/bulle : données initiales.

que le liquide est représenté par la loi d'état des gaz raides avec $\gamma = 4.4$ et $\pi = 6.8 \times 10^8$ Pa. De part la symétrie du problème, un domaine de $\Omega = [0, 2] \text{ m} \times [0.5, 1] \text{ m}$ est utilisé avec une condition de symétrie en bas, alors que une condition réflexive est imposée en haut, et des conditions de Neumann homogène sont imposées à gauche et à droite. Le domaine est discrétisé en 1600×400 cellules.

8.3. Modèle à cinq équations réduit

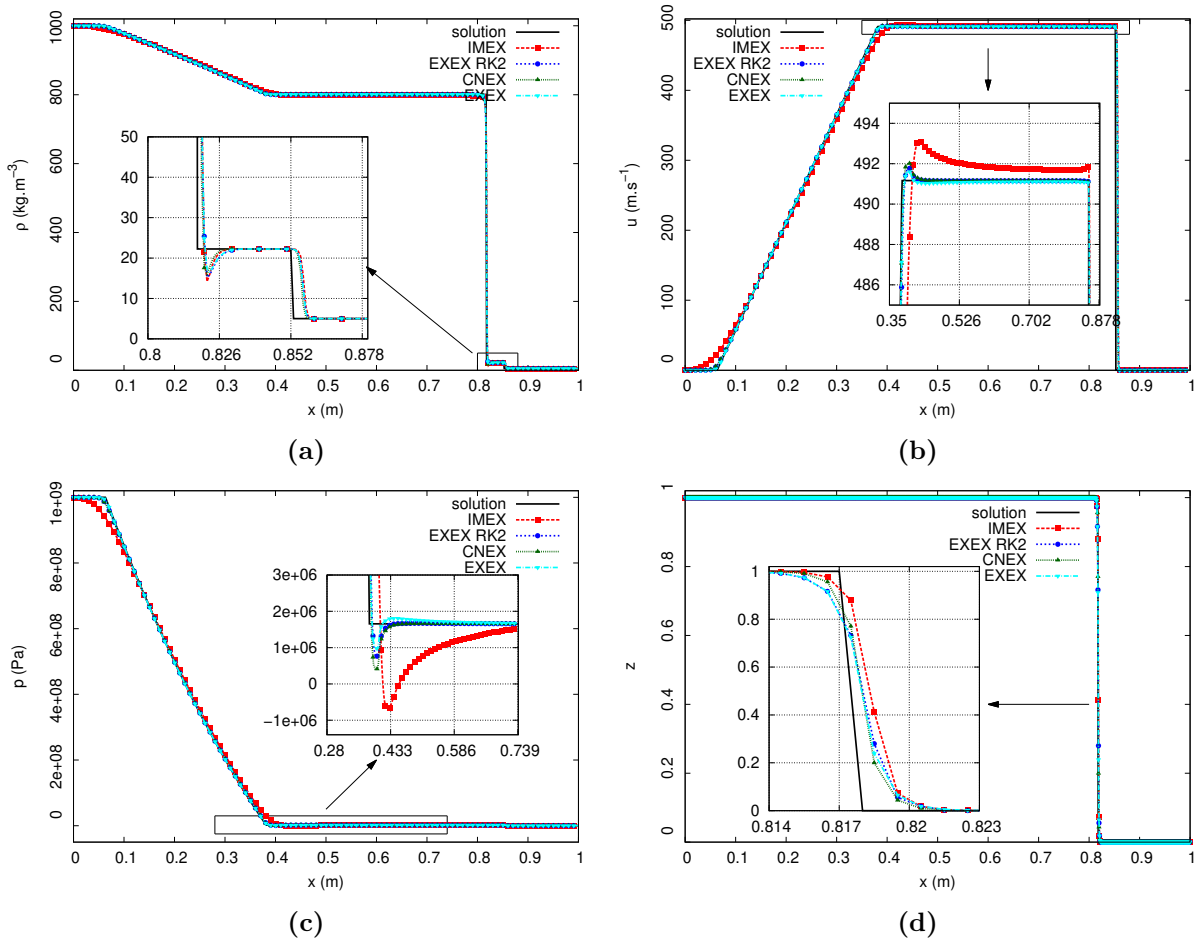


Fig. 8.9. Tube à choc diphasique unidimensionnel : résultats à l'ordre deux en espace.

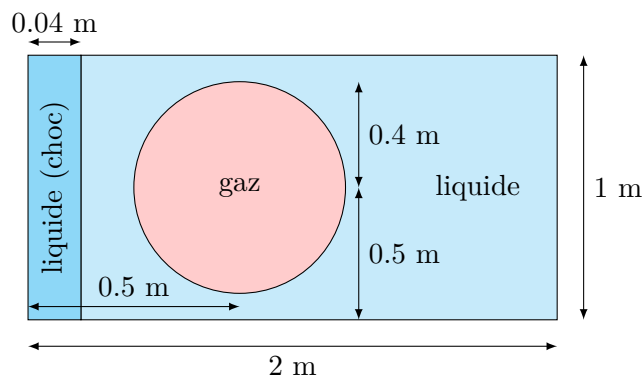


Fig. 8.10. Interaction choc/bulle : description géométrique du cas.

Ce cas test permet, entre autres, d'illustrer la robustesse de la méthode. En effet, il met en jeu des grands ratios de densité et de pression. Pour ce cas, nous montrerons seulement les résultats avec l'approche explicite de décomposition Lagrange-Transport. En effet, les conditions sur la positivité

des pentes permettent, avec un ratio $r = (\rho_c c_c)/(\rho_d c_d)$ pour chaque face cd , d’avoir un pas de temps bien plus grand que le choix $r = 1$ avec l’approche explicite [Lat13, Pel17]. Aussi, ce pas de temps, même un peu plus petit que celui obtenu par le schéma implicite pour lequel la CFL dépend seulement de la vitesse matérielle, est compensé par la nécessité de résoudre un processus itératif à l’ordre deux dans l’étape **Lagrange**. Sur la Fig. 8.11 on trace l’évolution du pas de temps Δt au cours du temps pour le schéma unidimensionnel à l’ordre deux avec les approches IMEX et EXEX. On se rend compte que les pas de temps sont assez proches tout au long de la simulation. Les calculs,

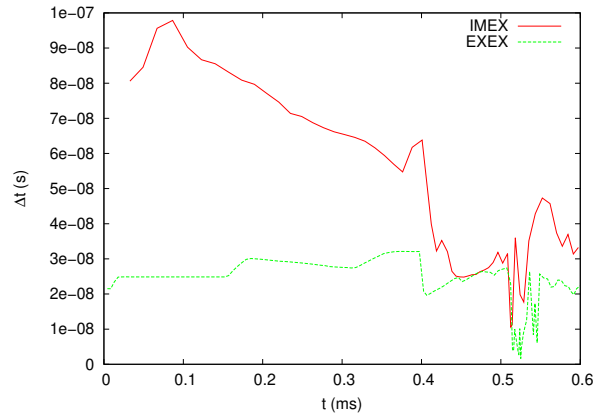


Fig. 8.11. Interaction choc/bulle : évolution du pas de temps avec les approches IMEX et EXEX pour le schéma unidimensionnel.

menés sur 64 cœurs, ont pris 836 s pour l’approche EXEX et 2637 s pour l’approche IMEX. Ainsi, pour ce type de cas, avec une résolution à l’ordre deux dans l’étape **Lagrange**, l’approche EXEX est suffisante, ce qui n’est pas le cas avec des schémas à l’ordre un espace sur l’étape **Lagrange**.

Maintenant, nous allons comparer les schémas unidimensionnel et multidimensionnel. Dans ce cas test, aucun effet dissipatif ni la tension de surface ne sont pris en compte. De plus, le maillage étant assez fin et le nombre de Mach de l’ordre de l’unité, nous n’utilisons aucune correction bas-Mach. L’évolution de la densité et de la fraction volumique à différents temps est présentée sur les Fig. 8.12 et Fig. 8.13. Les résultats sont très similaires et cohérents avec la littérature. Le choc se propageant dans le liquide vient percuter la colonne de gaz qui subit une large déformation avant de se séparer en plusieurs fragments. Le limiteur compressif sur la fraction volumique permet de limiter la diffusion de l’interface. Les différences entre les deux schémas sont visibles sur l’aspect de la fragmentation du gaz. Le schéma multidimensionnel, plus dissipatif, possède un front de gaz au niveau de l’axe de symétrie plus régulier que le schéma unidimensionnel, où des instabilités liées au passage du choc à travers l’interface semblent apparaître (voir Fig. 8.14).

8.3.3 Interaction entre une onde de choc et une goutte d’eau

Nous allons poursuivre la comparaison entre les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sur le cas expérimental de l’interaction entre une onde de choc et une goutte d’eau [HRC⁺20], étudié numériquement dans [HRC⁺20, THR⁺20, LTR22]. Ce cas complexe consiste à étudier la fragmentation d’une goutte en suspension dans un écoulement d’air supersonique à Mach 4.4. La configuration numérique est présentée sur la Fig. 8.15. Celle-ci est similaire au cas précédent. Un choc se propageant dans l’air va venir percuter une goutte d’eau au repos, centrée sur l’axe à

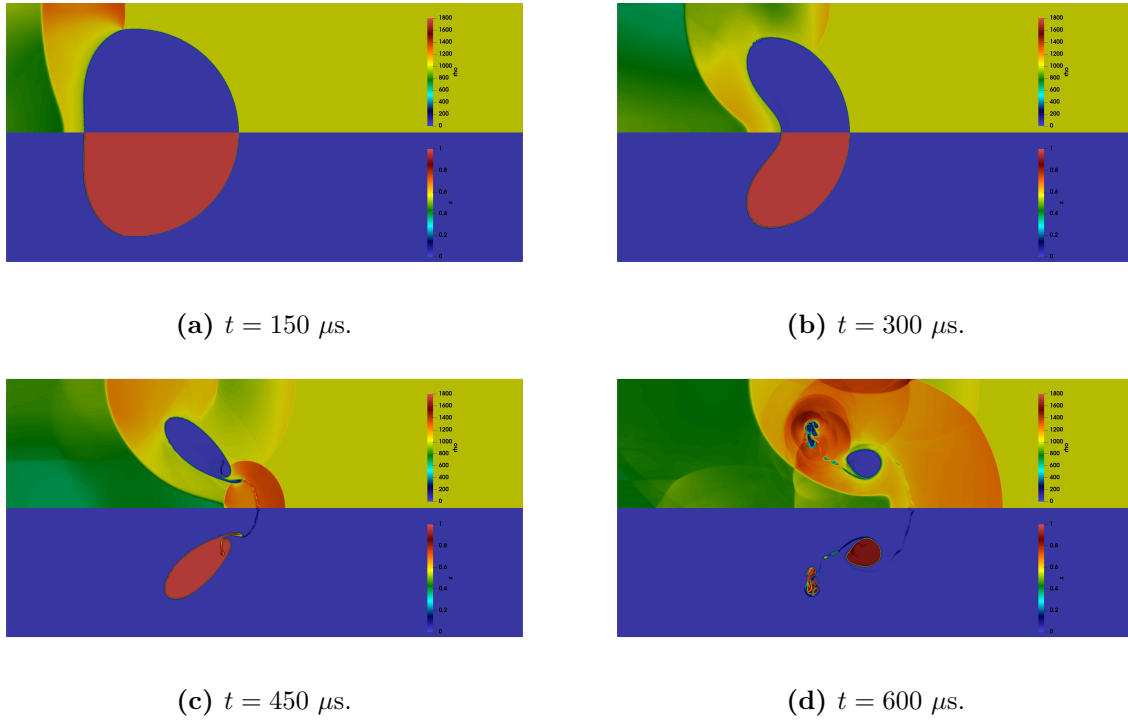


Fig. 8.12. Interaction liquide gaz : évolution de la densité (en haut) et de la fraction volumique (en bas) avec le schéma unidimensionnel explicite.

$x = 2.5675$ mm et de rayon $r = 0.5675$ mm. Afin d'avoir une comparaison réaliste avec l'expérience, ce cas est réalisé en géométrie 2D axisymétrique. Le maillage utilisé est constitué de 1600×800 cellules, ce qui correspond à $\Delta x/R = \Delta r/R \simeq 0.022$. C'est à peu près le même ratio que celui employé pour les cas de Transport pur. Cette fois, la condition du bord supérieur est une condition de Neumann homogène, tandis qu'à gauche, la condition est une entrée supersonique définie par la dernière ligne du Tab. 8.3. En bas du domaine, une condition d'axe de symétrie est utilisée, tandis qu'une condition de Neumann homogène est utilisée en sortie. Le gaz est décrit par l'équation d'état des gaz parfaits avec $\gamma_g = 1.4$ alors que le liquide est modélisé par l'équation d'état des gaz raides où $\gamma_l = 4.4$ et $\pi_l = 6 \times 10^8$ Pa. Encore une fois, seul les effets acoustiques sont pris en

	P (Pa)	ρ (kg.m ⁻³)	u_x (m.s ⁻¹)	c (m.s ⁻¹)	u_s (m.s ⁻¹)
Liquide	$1,000 \times 10^5$	1000	0	1700	
Gaz	$1,020 \times 10^5$	1,16	0	348	
Gaz (choc)	$21,10 \times 10^5$	5,71	1175	717	1424

Tab. 8.3. Interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau : données initiales.

compte dans ces simulations, étant donné que le nombre de Weber est de l'ordre de 10^5 . De plus, le maillage n'est pas suffisamment fin pour prendre en compte les effets de dissipation visqueuse et de conduction thermique, et pour résoudre la fragmentation à l'échelle des gouttelettes. On souhaite

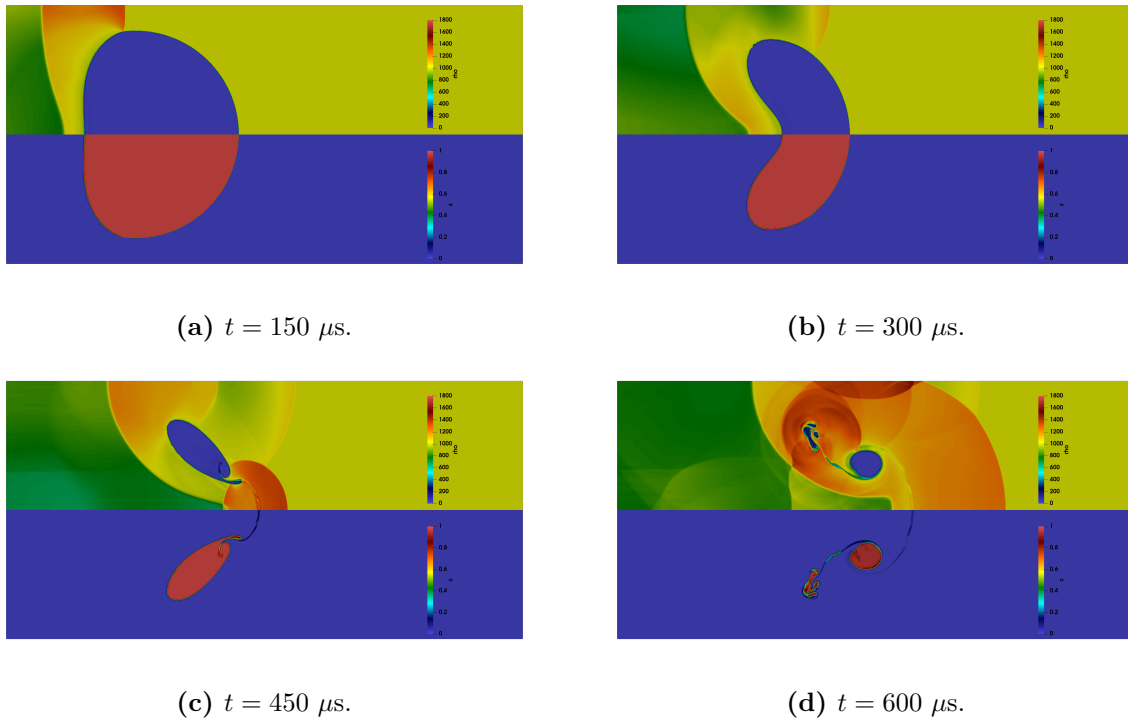


Fig. 8.13. Interaction liquide gaz : évolution de la densité (en haut) et de la fraction volumique (en bas) avec le schéma multidimensionnel explicite.

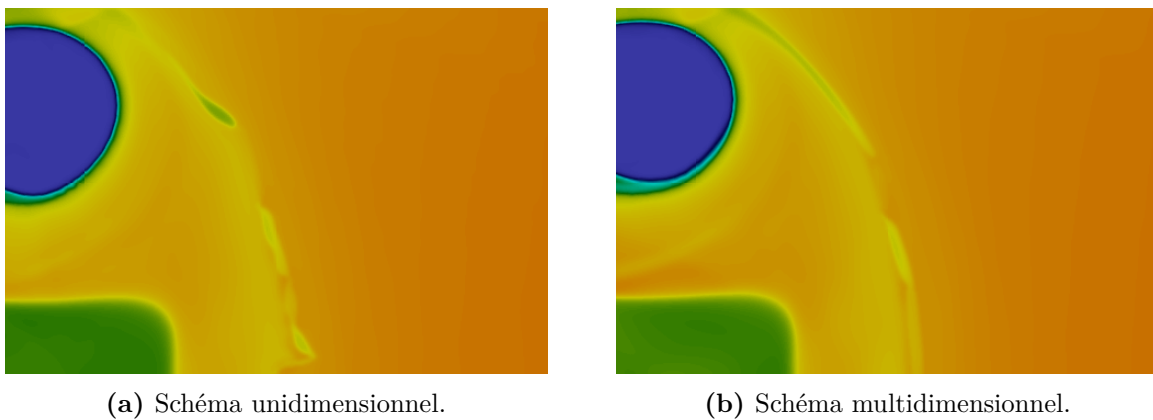


Fig. 8.14. Interaction liquide gaz : zoom sur le champ de densité au niveau du filament au temps final $t_f = 600 \mu s.$

alors simplement comparer le phénomène de fragmentation global, mais surtout la position du choc détaché en amont de la goutte en fonction des deux schémas. **L'étape Lagrange** est donc résolu avec le schéma explicite. On représente sur la même image les résultats expérimentaux avec la simulation où est représenté en rouge le contour du Schlieren numérique défini par la quantité

$$\exp\left(-k\sqrt{|\nabla\rho|}\right), \text{ avec } k \ll 1$$

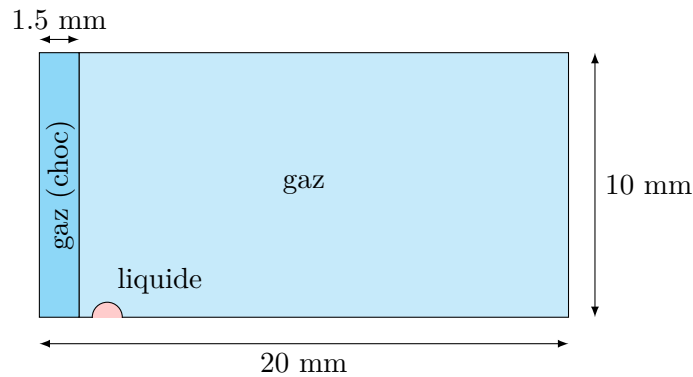


Fig. 8.15. Interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau : description géométrique du cas.

L'échelle entre l'expérience et la simulation est ajustée afin d'avoir la goutte d'eau positionnée au même endroit au temps initial avant impact $t_0 = -0.32 \mu\text{s}$. Le temps total de simulation est de $t = 39 \mu\text{s}$. La phénoménologie de ce cas test est largement commentée dans [HRC⁺20]. Les images obtenues ne permettent pas d'observer la fragmentation de manière précise. On voit simplement que la goutte est fragmentée dans un "brouillard". Cependant, on distingue clairement le choc détaché en amont de l'écoulement ainsi que le choc de recompression à l'arrière de la goutte. Les comparaisons entre l'expérience et la simulation sont faites sur les Fig. 8.16 et Fig. 8.17. Afin de les comparer, on superpose à l'expérience le contour du Schlieren numérique de la simulation. Celui-ci permet notamment d'observer les chocs, ainsi que les zones du domaine contenant du liquide. Dans un premier temps, le choc défilant vient percuter la goutte au repos. Apparaît alors un choc détaché en amont de la goutte, qui commence à se déformer. Le choc défilant continue à se propager jusqu'à sortir du domaine, tandis qu'un choc de recompression est observable à l'arrière de la goutte. De manière générale, les schémas unidimensionnel et multidimensionnel donnent sur les premiers temps des résultats similaires concernant la position du choc détaché. Jusqu'à $t = 26.77 \mu\text{s}$, les deux schémas numériques donnent des résultats très satisfaisant vis-à-vis de l'expérience, le choc est bien positionné. Aux temps suivant, on observe expérimentalement un choc plus oblique que celui obtenu par la simulation, qui est plutôt courbe, même si sa position sur l'axe de symétrie est proche. Cette observation est similaire pour le choc de recompression, bien décrit par la simulation jusqu'à $t = 20.77 \mu\text{s}$.

Cependant, de grandes différences sont observables sur la fragmentations de la goutte, laquelle reste bien plus compacte avec le schéma multidimensionnel que le schéma unidimensionnel. Cela s'explique par le fait qu'on observe numériquement une moins grande sensibilité du schéma multidimensionnel aux instabilités, que ce soit les instabilités de choc comme le *Carbuncle* où les instabilités hydrodynamiques de type Kelvin-Helmoltz par exemple. Ceci est notamment observable sur le choc défilant, lequel présente une instabilité de type *Odd-Even decoupling* avec le schéma unidimensionnel (voir Fig. c par exemple), qui est absente avec le schéma multidimensionnel. De manière générale, la fragmentation est un phénomène très non-linéaire pour lequel il est difficile d'avoir une convergence en maillage. Nous avons observé que même l'utilisation d'un limiteur moins diffusif donne une fragmentation très différente, qui est beaucoup plus prononcée. Malheureusement, l'expérience ne permet pas de savoir ce qui est le plus représentatif de la réalité physique de la fragmentation, étant donné que la goutte est représentée comme un "brouillard" dans les images données par l'expérience. Cette difficulté à résoudre précisément le phénomène de fragmentation est notamment illustré dans

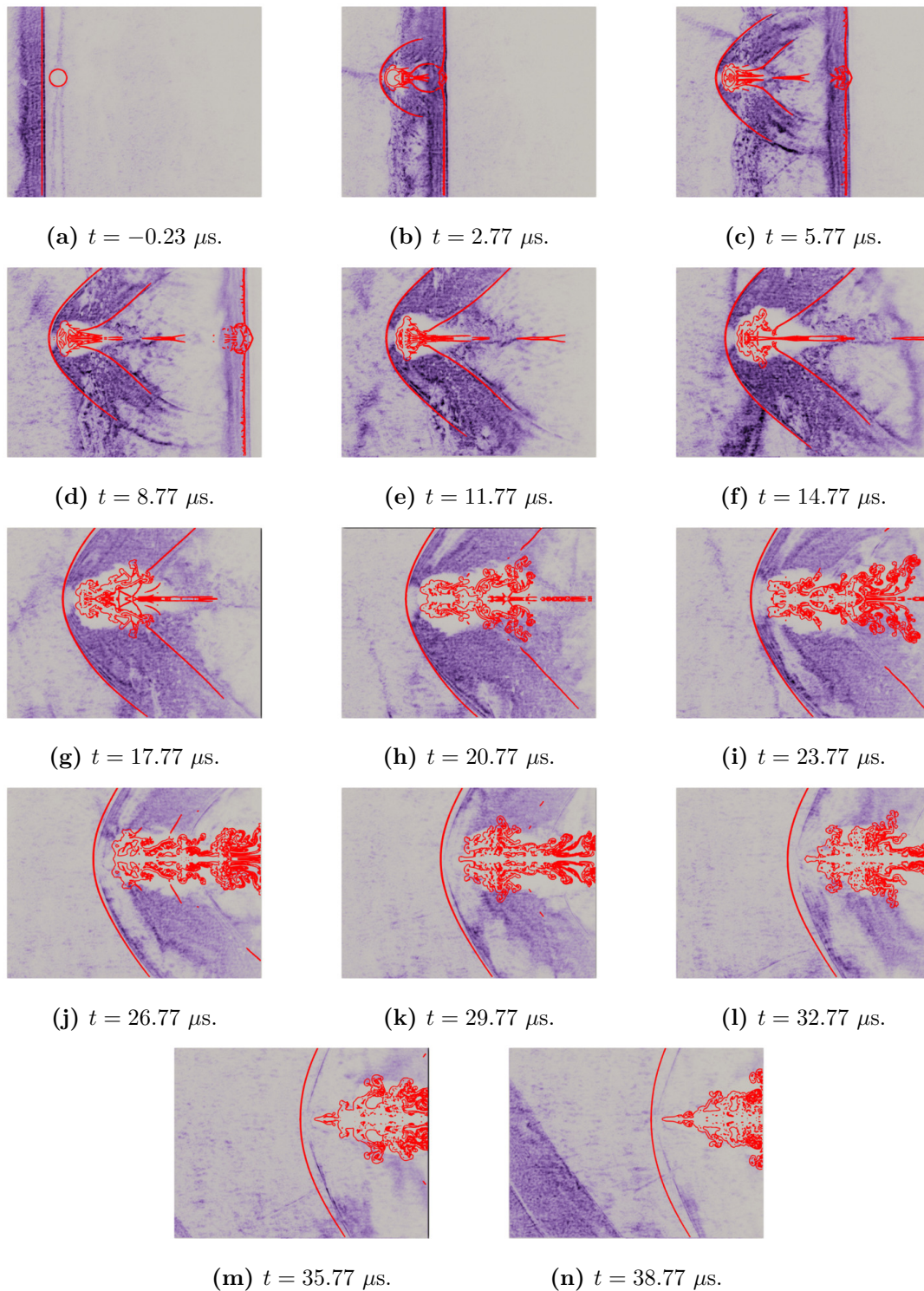


Fig. 8.16. Interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau : superposition de l'expérience (nuances de violet) et du contour du Schlieren numérique (rouge) pour le schéma unidimensionnel.

[THR⁺20], où l'expérience est comparée à deux approches numériques distinctes, une approche VoF et une approche à interface diffuse. Ici, une des grandes différences entre les deux schémas est la présence à partir de $t = 32.77 \mu\text{s}$ d'une pointe de liquide sur l'axe de symétrie pour le schéma unidimensionnel. Cette forme est aussi observée dans [HRC⁺20, THR⁺20, LTR22].

8.4 Modèle à cinq équations réduit avec dissipation visqueuse

Maintenant, les effets dissipatifs sont pris en compte dans un contexte monophasique. Deux cas test académiques associés respectivement à une plaque plane et une cavité entraînée vont nous permettre de valider notre approche numérique.

8.4.1 Plaque plane laminaire

Ce cas test monophasique est une reproduction d'un cas étudié dans [Nis21a]. On s'intéresse à un écoulement visqueux sur une plaque plane à $M_\infty = 0.15$ et $Re_\infty = 10^6$. Le domaine $\Omega = [-2, 2] \times [0, 4]$ est initialisé par un gaz parfait de densité $\rho = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, de pression $p = 3.17460317 \times 10^5 \text{ Pa}$ et de vitesse $\mathbf{u} = (100, 0) \text{ m.s}^{-1}$. Le coefficient adiabatique du gaz est de $\gamma = 1.4$ et sa viscosité est de $\mu = 2 \times 10^{-4} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$. Une condition d'entrée est imposée à gauche du domaine, tandis qu'une condition de Neumann homogène est imposée en haut et à droite. La condition de paroi (non glissement) ne commence qu'à partir de $x = 0^+$ en bas du domaine, alors qu'une condition de symétrie est imposée de $x = -2$ à $x = 0^-$. L'objectif de ce cas test est de vérifier que la méthode permet de capturer précisément un écoulement visqueux proche paroi, pour lequel la théorie de Blasius donne une bonne approximation du résultat. Le maillage est initialement un maillage cartésien régulier de 80×160 cellules, sur lequel est appliqué la loi β présentée Sec. 8.1.5. Le raffinement est appliqué sur la paroi horizontale, ainsi que sur l'axe vertical qui relie la zone amont sans plaque avec la zone aval de la plaque, en utilisant $\beta = 1.001$.

Ce cas est intéressant car il permet de comparer les profils de vitesse donnés par la simulation avec des résultats analytiques. L'obtention des courbes théorique de Blasius est réalisée par la méthode décrite dans [Mas09]. On trace ainsi à $x = 0.9 \text{ m}$ les vitesses adimensionnées pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel d'ordre deux. Pour ce cas, on choisi de ne pas utiliser de correction bas-Mach, pour étudier uniquement les schémas à l'ordre deux. On cherche ici une solution stationnaire, en supposant que le calcul est convergé lorsque les résidus sont inférieurs à 10^{-6} . Les résultats (voir Fig. 8.18) sont en bon accord avec la théorie de Blasius. La composante horizontale de la vitesse est superposée avec la courbe théorique tandis que pour la composante verticale, de légers écarts sont observables, surtout en ce qui concerne le schéma multidimensionnel, plus diffusif. Cette composante est la plus difficile à capturer.

8.4.2 Cavité entraînée

Ce cas test monophasique nous permet de tester le schéma numérique en couplant les effets visqueux avec le schéma d'ordre deux et la correction bas-Mach. En effet, on considère un domaine carré de $\Omega = [0, 1] \text{ m} \times [0, 1] \text{ m}$ initialisé avec une vitesse nulle, une pression $p = 10^5 \text{ Pa}$ et une densité $\rho = 1 \text{ kg.m}^{-3}$. Le gaz considéré suit la loi des gaz parfaits avec $\gamma = 1.4$ et possède une viscosité $\mu = 10^{-2} \text{ Pa.s}$. La dissipation thermique est négligée. La paroi supérieure du domaine est entraînée à une vitesse $\mathbf{u} = (1, 0) \text{ m.s}^{-1}$.

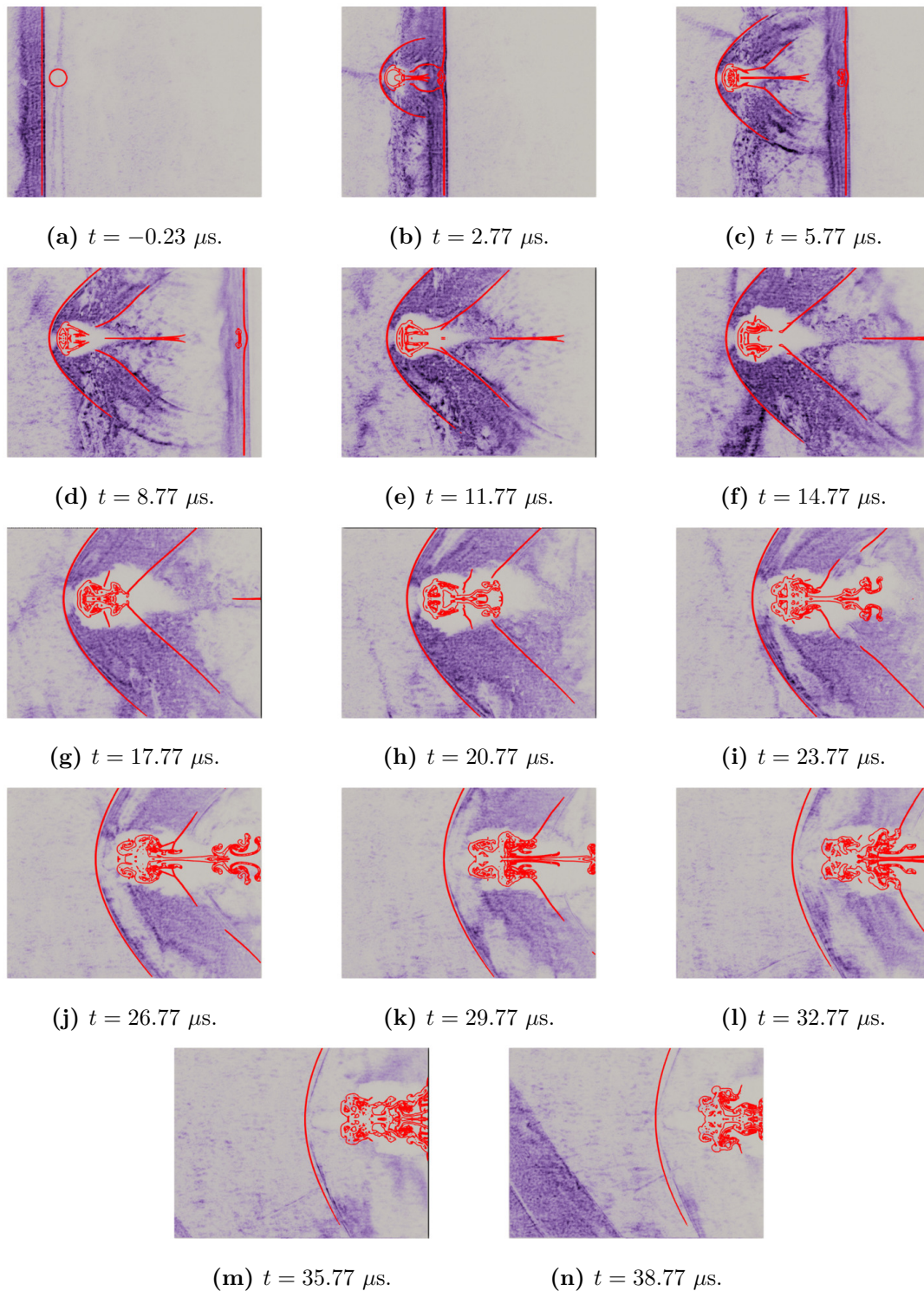
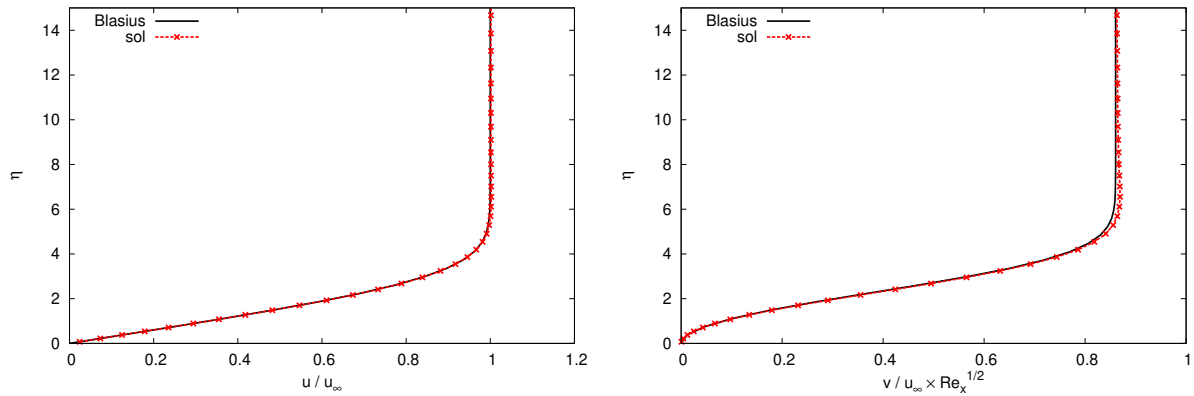
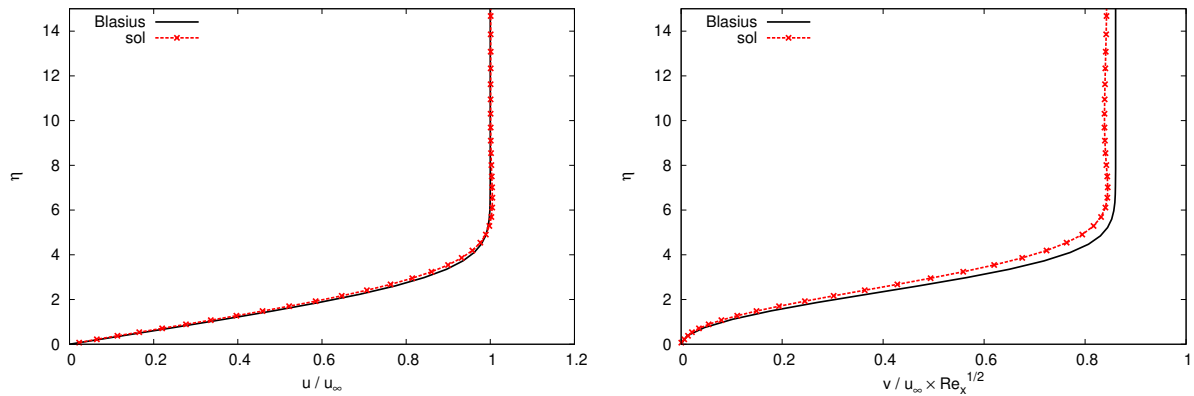


Fig. 8.17. Interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau : superposition de l'expérience (nuances de violet) et du contour du Schlieren numérique (rouge) pour le schéma multidimensionnel.

8.5. Modèle à cinq équations réduit avec tension de surface



(a) Profils des vitesses à $x = 0.9$ m pour le schéma unidimensionnel.



(b) Profils des vitesses à $x = 0.9$ m pour le schéma multidimensionnel.

Fig. 8.18. Plaque plane laminaire : comparaison des profils des vitesses pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec la solution de Blasius.

On considère un maillage grossier de 50×50 cellules, raffiné sur les quatre parois par la loi β avec $\beta = 1.01$. Les calculs sont menés jusqu'à $t_f = 10$ s avec le schéma unidimensionnel d'ordre deux avec et sans correction bas-Mach, en utilisant l'approche implicite. On compare des coupes du champ de vitesse au centre du domaine avec les résultats de [GGS82]. Ces résultats sont obtenus avec une résolution des équations de Navier-Stokes incompressible (voir Fig. 8.19). Même avec un maillage grossier, le schéma à l'ordre deux permet de retrouver un écoulement de type cavité entraînée, avec un vortex au centre du domaine. Cependant, les résultats restent loin de la référence. L'utilisation d'une correction bas-Mach permet d'améliorer nettement les résultats. La même observation peut être faite sur le schéma multidimensionnel, mais ne sera pas montrée ici.

8.5 Modèle à cinq équations réduit avec tension de surface

Cette série de cas académiques doit permettre de valider et comparer les schémas numériques prenant en compte la tension de surface, et de tester le couplage de ses effets avec la dissipation visqueuse ou encore la correction bas Mach. On rappelle que deux formulations différentes des

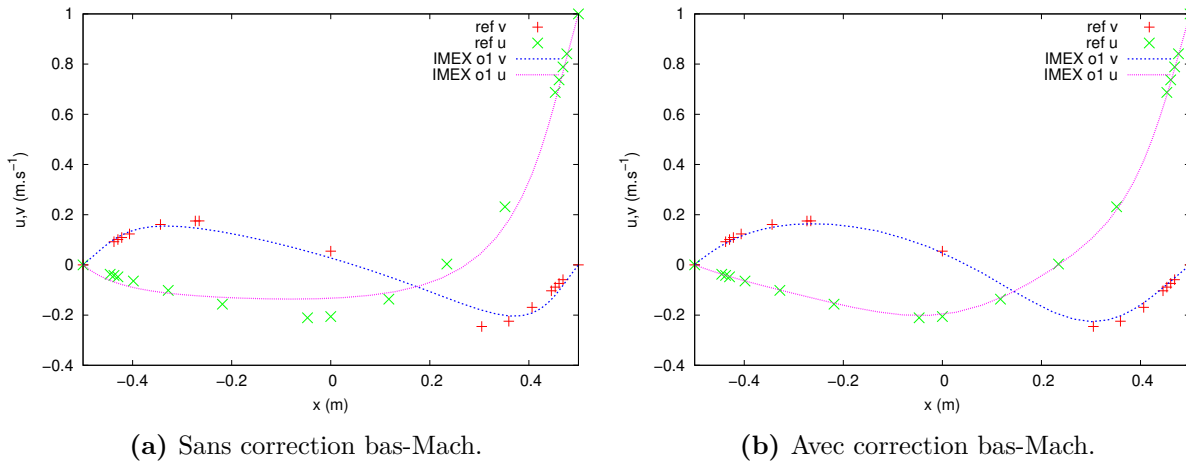


Fig. 8.19. Cavité entraînée : comparaison des coupes de vitesse avec la référence de Ghia avec et sans correction bas-Mach.

forces de tension de surface sont considérées ici, l'approche conservative CSS (2.3.2.1) et l'approche non-conservative CSF (2.3.1.1).

8.5.1 Goutte d'eau à l'équilibre

Ce cas académique bidimensionnel va nous permettre de tester la capacité des schémas numériques à préserver les solutions d'équilibre. En effet, on place initialement une goutte d'eau de rayon $R = 1.8 \times 10^{-5}$ m au centre d'un domaine de taille $\Omega = [0, 0.9 \times 10^{-5}] \text{ m} \times [0, 0.9 \times 10^{-5}] \text{ m}$ d'air au repos. Les données initiales sont explicitées dans le Tab. 8.4. Le coefficient de tension de surface

	P (Pa)	ρ (kg.m^{-3})	\mathbf{u} (m.s^{-1})	z	γ	π (Pa)
liquide	10^5	10^3	$\mathbf{0}$	1	4.4	6.8×10^8
gaz	10^5	1	$\mathbf{0}$	0	1.4	0

Tab. 8.4. Goutte d'eau à l'équilibre : données initiales.

est de $\sigma = 0.072 \text{ N.m}^{-1}$. Le domaine est divisé en 128×128 cellules. Puisque la courbure de la goutte est non-nulle, la tension de surface doit induire un saut de pression à l'interface, qui doit respecter la loi de Laplace (2.3.0.1). On propose alors d'étudier l'amplitude des courants parasites via l'énergie cinétique totale dans le domaine, ainsi que de calculer l'erreur sur le saut de pression, pour 6 schémas différents : les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sous la forme CSF avec courbure exacte imposée, les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sous la forme CSF avec courbure calculée numériquement ainsi que les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sous la forme CSS. Le temps final est $t_f = 5 \times 10^{-5}$ s. Les calculs sont faits avec le schéma implicite, à l'ordre un en espace, sans correction bas Mach. Les conditions de paroi sont utilisées sur les quatre bords.

Afin de calculer les dérivées de la fraction volumique, on initialise les mailles traversées par le cercle définissant la goutte en mailles de mélange, pour lesquelles la fraction volumique comprise

entre 0 et 1 dans une maille de mélange est calculée en subdivisant cette maille en 100×100 sous-cellules, en estimant leur nombre dans le cercle et en divisant ce nombre par le nombre total de sous-cellules.

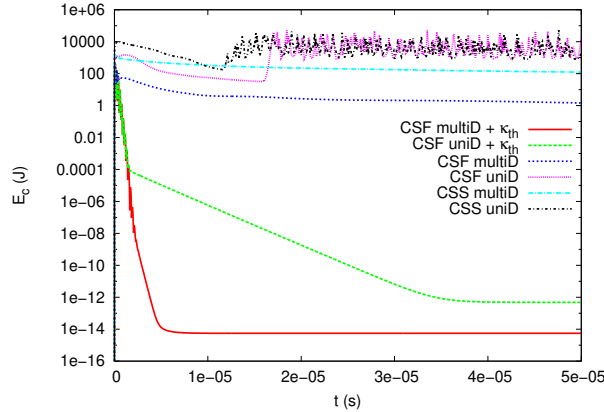


Fig. 8.20. Goutte d'eau à l'équilibre : évolution de l'énergie cinétique totale dans le domaine.

La Fig. 8.20 montre l'évolution de l'énergie cinétique dans le domaine au cours du temps. Tout d'abord, on constate que l'approche CSF préserve les solutions d'équilibre : la courbure exacte (CSF uniD + κ_{th} & CSF multiD + κ_{th}) permet de faire tendre l'énergie cinétique totale vers l'erreur machine. Ensuite, on observe que si la courbure n'est pas calculée exactement, le schéma unidimensionnel CSF (CSF uniD) et CSS (CSS uniD) ne converge pas en temps long vers une solution stationnaire, contrairement au schéma multidimensionnel CSF (CSF multiD) et CSS (CSS multiD). On observe numériquement un champ de vitesse complètement aligné avec le maillage, qui provoque des instabilités au niveau de l'interface. Celle-ci sont complètement absentes avec le schéma multidimensionnel, le champ de vitesse est lui aussi complètement différent. Pour l'illustrer, on représente sur la Fig. 8.21 l'amplitude de la vitesse à $t = 10^{-5}$ s, avant l'apparition de ces instabilités, pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sous la forme CSF. Alors que le champ de vitesse est réellement multidimensionnel pour le schéma multidimensionnel, le schéma unidimensionnel possède un champ de vitesse aligné avec le maillage. Celui-ci perturbe l'interface et provoque de grandes instabilités. On remarque aussi que la prise en compte des effets de tension de surface de manière équilibrée par l'approche CSF permet de réduire l'amplitude des courants parasites face à l'approche CSS. Au niveau de l'énergie cinétique totale, elle est diminuée de deux décades.

Pour vérifier que le bon saut de pression est obtenu, on trace sur la Fig. 8.22 l'écart ξ_p tel que

$$\xi_p = \frac{|[p_{sim}] - [p_{th}]|}{[p_{th}]},$$

où

$$[p_{sim}] = \frac{\sum_c pz}{\sum_c z} - \frac{\sum_c p(1-z)}{\sum_c (1-z)},$$

et

$$[p_{th}] = \sigma \sqrt{\frac{\pi}{\sum_c z\omega_c}}.$$

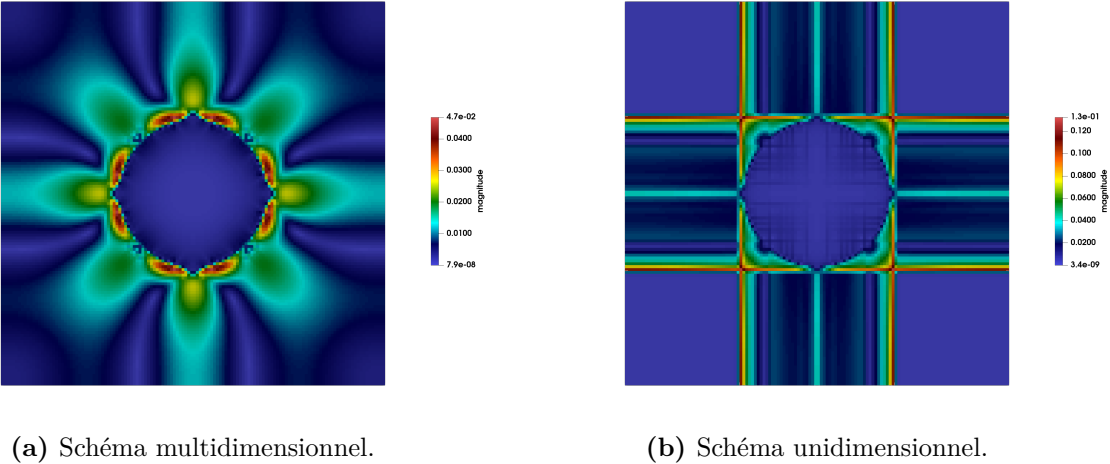


Fig. 8.21. Goutte d'eau à l'équilibre : amplitude de la vitesse à $t = 10^{-5}$ s pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sous la forme CSF

Afin de comparer les écarts avant l'apparition de ses instabilités, on regarde les résultats jusqu'au temps $t = 10^{-5}$ s. De manière générale, les écarts sont de l'ordre du pour-cent (4 % max). La loi de Laplace est donc bien reproduite par les deux approches. Étant donné que l'estimation du

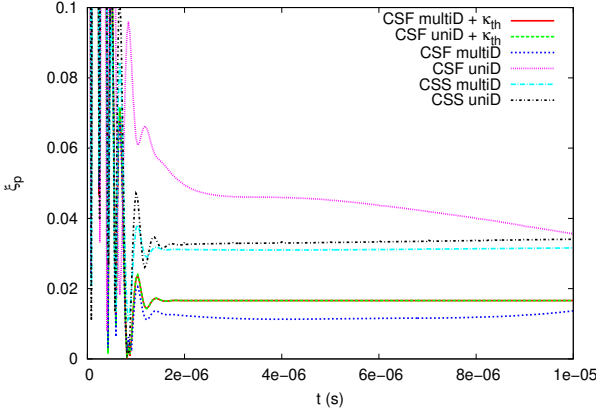


Fig. 8.22. Goutte d'eau à l'équilibre : évolution de l'écart entre la pression théorique et la pression calculée.

saut de pression est calculée en prenant en compte toutes les cellules du domaine, les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sous la forme CSF avec courbure exacte (CSF uniD + κ_{th} & CSF multiD + κ_{th}) ne donne pas exactement sur la Fig. 8.22 un écart de 0 %. Il faudrait pour cela utiliser un seuil sur l'estimation de $[p_{sim}]$ pour ne pas prendre en compte les mailles de mélange.

Extension à l'ordre deux et correction bas-Mach

Pour vérifier que l'extension des schémas unidimensionnel et multidimensionnel à l'ordre deux ainsi qu'avec la correction bas Mach permet de préserver les solutions stationnaires, on impose

cette fois directement dans la goutte d'eau le saut de pression théorique $\Delta p = 4000$ Pa ainsi que la courbure exacte $\kappa = 1/r$. En effet, puisque le domaine est fermé et qu'il n'y a pas de dissipation visqueuse, initialiser la goutte sans le saut de pression ferait apparaître dans le domaine des ondes qui, rebondissant sans jamais s'amortir, ne permettraient pas d'obtenir une solution stationnaire. De plus, puisqu'on impose directement la solution stationnaire, pour laquelle la vitesse est nulle dans tout le domaine, on utilise le schéma explicite. En effet, le processus itératif nécessaire à la résolution de l'étape **Lagrange** dans l'approche implicite ne converge pas en pratique rapidement vers une solution à vitesse nulle.

La simulation est menée jusqu'à $t = 5 \times 10^{-8}$ s, qui est un temps final suffisant pour observer un éventuel déséquilibre des schémas. Pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel à l'ordre deux avec correction bas Mach, l'énergie cinétique totale au temps final est inférieure à 10^{-18} J, ce qui permet d'affirmer que les schémas sont équilibrés. L'équilibre à l'ordre deux est notamment assuré grâce à la prise en compte des termes centrés d'ordre deux du produit non-conservatif, ici la tension de surface sous la forme CSF. En effet, négliger ces termes ne permet pas de préserver la loi de Laplace, et l'énergie cinétique totale augmente de manière conséquente jusqu'au temps final. Ce résultat est illustré sur la [Fig. 8.23](#).

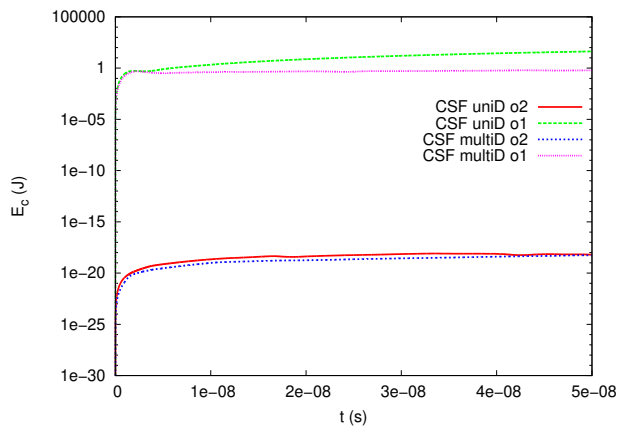


Fig. 8.23. Goutte d'eau à l'équilibre : évolution de l'énergie cinétique totale pour le schéma unidimensionnel et multidimensionnel avec le terme centré non-conservatif (o2) et sans le terme centré non-conservatif (o1).

8.5.2 Oscillation d'une goutte ellipsoïdale

Ce cas académique bidimensionnel a été introduit dans [PS05], et étudié notamment dans [ND15, CHL20, Cor20, PBM23]. Une goutte en forme d'ellipse est positionnée au centre d'un domaine carré de taille $\Omega = [0, 1] \text{ m} \times [0, 1] \text{ m}$ rempli de gaz au repos. L'ellipse est définie par

$$\frac{(x - 0.5)^2}{0.2^2} + \frac{(y - 0.5)^2}{0.12^2} = 1.$$

L'ellipse, considérée liquide, est modélisée par la loi des gaz raides, tandis que l'air est représenté par la loi des gaz parfaits. Les données initiales sont explicitées dans le [Tab. 8.5](#). Le coefficient de tension de surface est $\sigma = 340 \text{ N.m}^{-1}$. Le temps de simulation est $t_f = 0.5 \text{ s}$. Comme pour le cas précédent, sur les quatre bords sont utilisées des conditions de paroi. Le maillage est composé de 128×128

	P (Pa)	ρ (kg.m ⁻³)	\mathbf{u} (m.s ⁻¹)	z	γ	π (Pa)
liquide	10 ⁵	10 ²	$\mathbf{0}$	1	2.4	1. × 10 ⁷
gaz	10 ⁵	1	$\mathbf{0}$	0	1.4	0

Tab. 8.5. Oscillation d'une goutte ellipsoïdale : données initiales.

cellules. La courbure de la goutte, qui n'est pas uniforme, induit un mouvement périodique de l'interface. En effet, initialement, l'énergie potentielle associée à la tension de surface est maximale tandis que l'énergie cinétique est nulle. Le transfert de l'énergie potentielle en énergie cinétique va alors déformer l'ellipse en une sphère, pour laquelle l'énergie cinétique est maximale, qui va alors se déformer pour donner la même ellipse que précédemment. Ce processus d'oscillation, sans effets dissipatifs, est sensé durer indéfiniment, et seule la diffusion numérique du schéma doit atténuer l'amplitude des oscillations. Périgaud [PS05] utilise la formule de Rayleigh modifiée [Ray79, FOF88] pour estimer analytiquement la période des oscillations en fonction des densités des deux fluides, du rayon R de la goutte au repos ainsi que du coefficient de tension de surface σ . Cette relation est donnée par

$$\omega^2 = (o^3 - o) \frac{\sigma}{(\rho_l + \rho_g) R^3}, \quad \text{avec } \omega = \frac{2\pi}{T},$$

avec o le mode d'oscillation égale ici 2. Si on estime, par conservation de son volume que l'ellipse à un rayon moyen $R = 0.15$ m, on a alors une période théorique de 85 ms.

On va d'abord comparer les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec les formulations CSF et CSS pour différentes résolutions de **l'étape Lagrange**, à savoir :

- la résolution à l'ordre un (notée o1 dans la légende de la Fig. 8.24),
- la résolution à l'ordre un avec correction bas Mach (lm+o1),
- la résolution à l'ordre deux (o2),
- la résolution à l'ordre deux avec correction bas Mach (lm+o2).

L'étape de Transport est toujours résolue à l'ordre deux avec $\kappa = 1/3$ et $\beta = 2$ pour limiter la diffusion de l'interface. A l'ordre deux sur **l'étape Lagrange**, on n'utilise pas la correction d'ordre deux sur l'approche CSF. En effet, on a remarqué numériquement une moins bonne convergence du processus itératif à l'ordre deux en prenant en compte ce terme. Ce n'est pas gênant ici car, on ne cherche pas forcément à être équilibré sur un tel cas, puisque en théorie, la goutte doit osciller indéfiniment, sans jamais revenir à l'équilibre. Les résultats sur la Fig. 8.24 présentent l'évolution de l'énergie cinétique volumique totale dans le domaine pour les différents schémas. On constate tout d'abord que les schémas à l'ordre un et à l'ordre deux sans correction bas-Mach ne permettent pas de bien reproduire le phénomène d'oscillation périodique de la goutte. A l'ordre deux sans correction, les résultats sont bien moins bons. On remarque numériquement que cela est dû à l'utilisation de $\beta = 2$, un choix qui a tendance à comprimer l'interface et à diminuer fortement l'amplitude des oscillations. Avec $\beta = 1$, on retrouve les résultats de la littérature [PS05, ND15, CHL20, Cor20, PBM23], à savoir que l'amortissement des oscillations est préservé sur plusieurs périodes. La correction bas-Mach permet, pour les quatre approches, de préserver l'amplitude des oscillations de manière très correcte. Ces dernières ne sont presque pas atténuées lorsque le schéma à l'ordre deux est employé en plus de la correction bas-Mach. De manière générale, on remarque que le schéma multidimensionnel est plus diffusif que le schéma unidimensionnel. De plus l'approche CSS présente plus de perturbations parasites dans les oscillations que l'approche CSF. On remarque

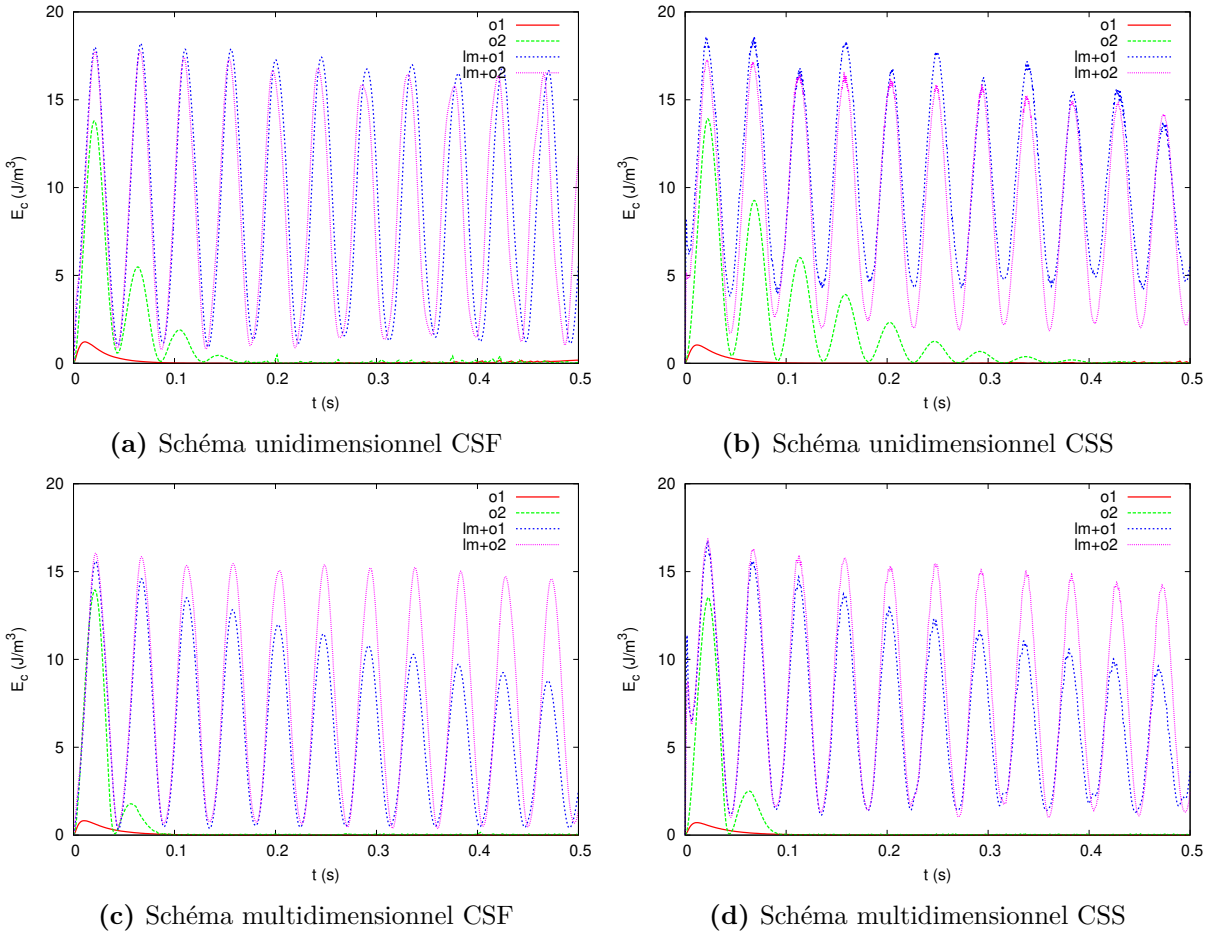


Fig. 8.24. Oscillation d'une goutte ellipsoïdale : évolution de l'énergie cinétique volumique dans le domaine pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec les formulations CSF et CSS, où l'étape Lagrange est résolue à l'ordre un (o1), à l'ordre un avec correction bas Mach (lm+o1), à l'ordre deux (o2) et à l'ordre deux avec correction bas Mach (lm+o2).

aussi que l'énergie cinétique minimale est toujours plus petite avec l'approche non-conservative. Cela est cohérent avec les résultats obtenus sur le cas précédent. Les courants parasites sont largement diminués. Pour un tel cas, on constate clairement que la dissipation du schéma est responsable de l'amortissement des oscillations, et que l'utilisation d'une correction bas-Mach avec un schéma d'ordre élevé est nécessaire pour retrouver le comportement théorique de la goutte.

Le [Tab. 8.6](#) donne la période d'oscillation obtenue pour les quatre schémas. Celle-ci est mesurée comme une moyenne des 5 périodes d'oscillations observables sur les figures, à partir du premier et dernier maximum. La période moyenne est quasiment la même pour tous les schémas. L'écart avec la période théorique est inférieure à 6%. Les schémas unidimensionnel et multidimensionnel ainsi que les deux approches CSF et CSS sont donc capables de reproduire des phénomènes dynamiques liés à la tension de surface, à condition d'employer une correction bas-Mach.

	CSF		CSS	
	1D	2D	1D	2D
lm+o1	0.090s	0.090s	0.090s	0.089s
lm+o2	0.089s	0.090s	0.090s	0.090s

Tab. 8.6. Oscillation d'une goutte ellipsoïdale : période des oscillations observées numériquement.

8.5.3 Atténuation visqueuse d'une onde capillaire

Dans ce cas test, on s'intéresse à l'atténuation d'une onde capillaire. La théorie linéaire des petites oscillations d'une interface entre deux fluides visqueux ayant la même viscosité a été étudiée théoriquement par Prosperetti [Pro81], qui en a donné une solution analytique dans le cas où les viscosités cinématiques des deux fluides sont égales, soit $\nu_l = \nu_g$. Pour ce cas test, étudié notamment

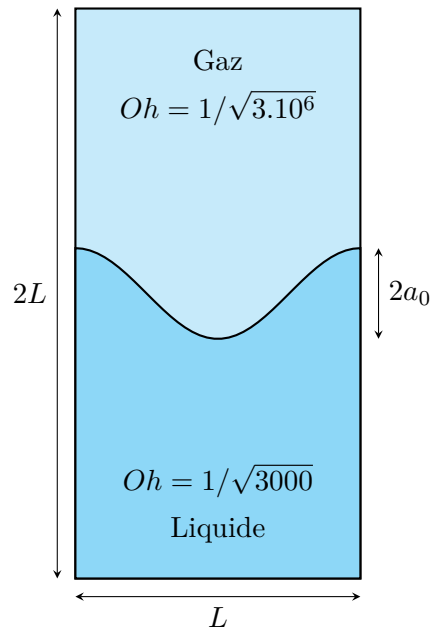


Fig. 8.25. Atténuation visqueuse d'une onde capillaire : description géométrique du cas

dans [PZ99, Bla15], on considère deux fluides séparés par une interface sinusoidale

$$a(\mathbf{x}) = a_0 \cos(k\mathbf{x}),$$

où a_0 est l'amplitude initiale des oscillations et k est le nombre d'onde (voir Fig. 8.25). Lorsque $a_0 \ll 2\pi k$, l'évolution temporelle de l'amplitude des oscillations est donnée par Prosperetti [Pro81]

$$a(x, t) = \frac{4(1 - 4\beta)\epsilon^2}{8(1 - 4\beta)\epsilon^2 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\sqrt{\epsilon t}) + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega_0^2 a(x, 0)}{z_i^2 - \epsilon} \right) \exp((z_i^2 - \epsilon)t) \operatorname{erfc}(\mathcal{R}(z_i)\sqrt{t}),$$

8.5. Modèle à cinq équations réduit avec tension de surface

avec $\beta = \rho_1\rho_2/(\rho_1 + \rho_2)^2$, $\omega_0 = \sigma\kappa/(\rho_1 + \rho_2)$, $\epsilon = \nu k^2$, $Z_i = \prod_{j=1, j \neq i}^4 (z_j - z_i)$ et z_i , $i = 1, 4$ les racines complexes conjuguées de l'équation

$$z^4 - 4\beta\sqrt{\epsilon}z^3 + 2(1 - 6\beta)\epsilon z^2 + 4(1 - 3\beta)\epsilon^{3/2}z + (1 - 4\beta)\epsilon^2 + \omega_0 = 0.$$

La notation $\mathcal{R}(z_i)$ désigne la partie réelle de z_i , et erfc est la fonction d'erreur complémentaire. En se basant sur les travaux de Popinet et Zaleski [PZ99], nous prenons les données du [Tab. 8.7](#), avec une loi d'état de type gaz parfait pour l'air, et une équation de type gaz raide pour le liquide.

	ρ (kg.m ⁻³)	p (Pa)	μ (kg.m ⁻¹ .s ⁻¹)	γ	π (Pa)
Eau	10 ³	10 ⁵	1.68495882 × 10 ²	4.4	6.8 × 10 ⁸
Air	1	10 ⁵	1.68495882 × 10 ⁻¹	1.4	0

Tab. 8.7. Atténuation visqueuse d'une onde capillaire : données initiales.

Le coefficient de tension de surface est de $\sigma = 13.556 \times 10^3$ N.m⁻¹. Le domaine est rectangulaire, $[0, 2\pi]$ m × $[0, 4\pi]$ m. L'amplitude a_0 est telle que le ratio $2L/a_0 = 10^{-2}$ est suffisamment petit pour se placer dans le cadre de la théorie linéaire des petites oscillations. Le nombre d'Ohnesorge, ratio des forces visqueuses sur les forces de tension de surface et les forces inertielles, et donné par

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho\sigma L}}.$$

Ici, on a $Oh = 1/\sqrt{3000}$ pour le liquide et $Oh = 1/\sqrt{3 \times 10^6}$ pour le gaz. La viscosité cinématique adimensionnée vaut $\epsilon = 6.472 \times 10^{-2}$ pour les deux fluides. La conduction thermique est supposée nulle dans ce cas. Le temps final de simulation est $t_f = 10$ s. Des conditions aux limites périodiques sont utilisées sur les bords gauche et droit tandis que des conditions de paroi sont imposées en haut et en bas du domaine.

Nous allons comparer l'évolution de l'amplitude des oscillations au cours du temps avec la solution théorique pour différents maillages. Les calculs sont réalisés avec l'approche implicite de la décomposition Lagrange-Transport. **L'étape Lagrange** est toujours résolue à l'ordre un avec correction bas-Mach tandis que **l'étape de Transport** est résolue à l'ordre deux avec le limiteur compressif. Au vu des résultats obtenus sur le cas de l'oscillation d'une goutte ellipsoïdale, cette approche est suffisante pour reproduire avec précision des oscillations sur plusieurs périodes. Pour résoudre plus précisément les ondes capillaires, on prend un pas de temps tel que $\Delta t = \min(\Delta t_t, 50\Delta t_c)$, où Δt_t est le pas de temps lié à **l'étape de Transport** et Δt_c est celui lié à la tension de surface. Ajouter la contrainte capillaire dans le pas de temps avec un facteur 50 permet de mieux résoudre la dynamique de ce cas puisque plus d'itérations seront faites entre chaque période d'oscillation. En effet, utiliser seulement le pas de temps de **l'étape de Transport** ne permettrait pas de résoudre avec précision chaque période des oscillations.

Une convergence en maillage est réalisée. L'amplitude initiale étant plus petite que la taille d'une maille, on initialise les mailles dans lesquelles est contenue l'interface sinusoidale avec des mailles de mélange, à la manière du cas de la Goutte d'eau à l'équilibre. On utilise encore 100×100 sous cellules pour estimer la fraction volumique des mailles de mélange. Cette procédure permet de calculer les gradients de la fraction volumique pour l'approche CSS, et la courbure pour l'approche CSF. Elle est nécessaire car l'amplitude initiale étant très petite, l'interface n'est contenue que dans une maille.

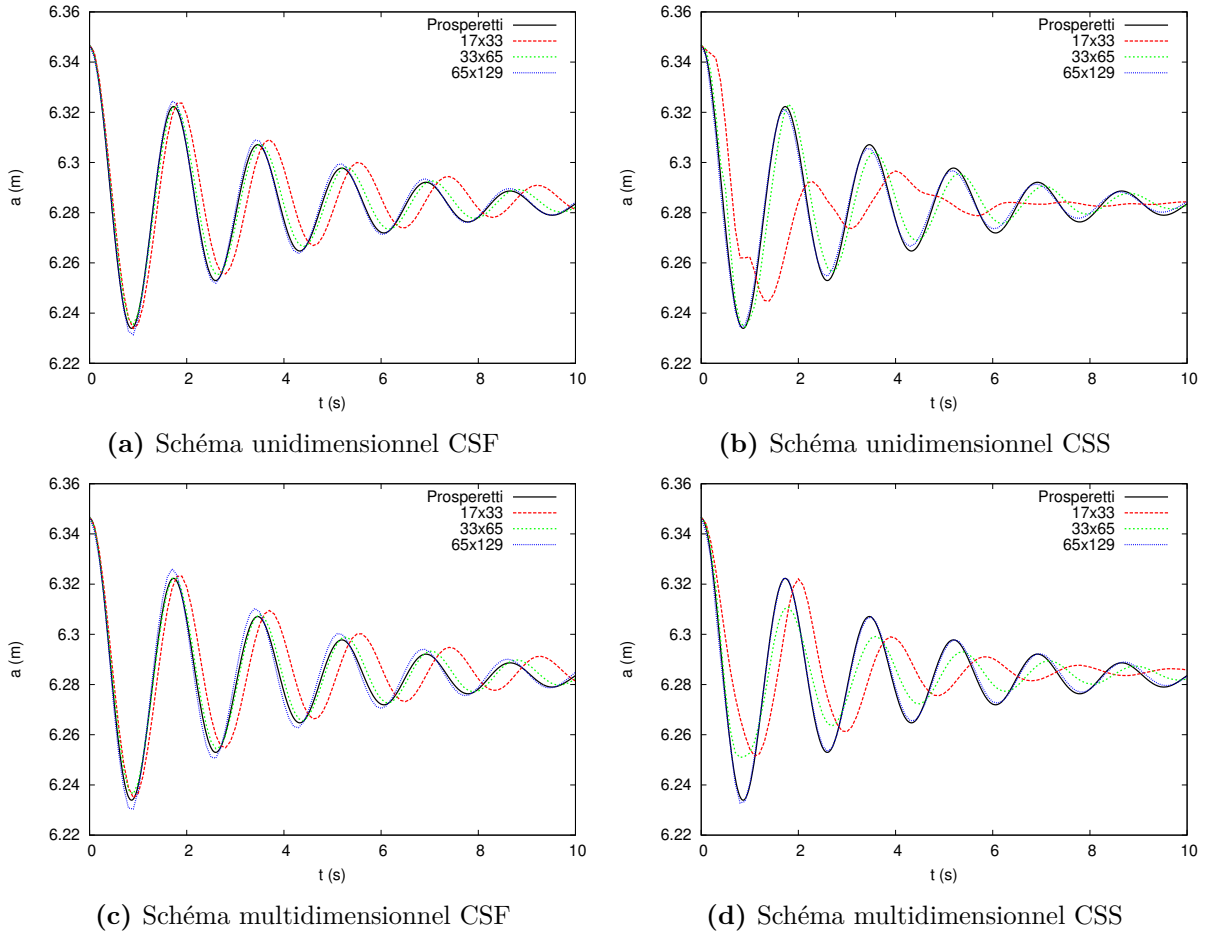


Fig. 8.26. Atténuation visqueuse d'une onde capillaire : évolution de l'amplitude des oscillations de l'interface pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec les formulations CSF et CSS, pour différents maillages.

Les résultats présentés sur la Fig. 8.26 permettent de comparer les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec les approches CSF et CSS, pour différents maillages. Les résultats sont en bon accord avec la solution exacte donnée par Prosperetti. La fréquence d'oscillation ainsi que le taux d'amortissement sont d'autant plus proches de la solution théorique que le maillage est raffiné.

8.6 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de valider l'ensemble des méthodes numériques présentées précédemment. Les cas de transport pur ont montré l'intérêt d'utiliser un limiteur compressif sur la fraction volumique afin de limiter drastiquement la diffusion de l'interface entre deux fluides. Ensuite, le modèle à cinq équations réduit seul a été résolu, en comparant les schémas unidimensionnel et multidimensionnel. Ceux-ci ont donné des résultats similaires lors de l'étude de l'interaction choc/bulle, tandis que la comparaison numérique avec le cas expérimental de l'interaction entre une onde de choc et une goutte d'eau a mis en évidence de grandes différences dans le processus de fragmentation. De

manière générale, l'observation faite est que le schéma multidimensionnel est moins sensible aux instabilités, aussi bien les instabilités hydrodynamiques de type Kelvin-Helmholtz ou Rayleigh-Taylor, que les instabilités de choc de type *Odd-Even decoupling* ou *Carbuncle* [PGM17, GCLM22].

La prise en compte de la dissipation visqueuse pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel a été validée, avant de comparer les deux formulations CSF et CSS permettant de prendre en compte les forces de tension de surface. La formulation CSF, équilibrée par construction, devait permettre de diminuer l'amplitude des courants parasites face à la formulation CSS. Cette hypothèse a été confirmée sur les cas statiques. Cependant, en dynamique, l'effet des courants parasites pour le schéma CSS n'est pas vraiment visible, surtout si le maillage est assez fin.

Nous allons employer dans le prochain chapitre ces méthodes sur des cas plus applicatifs traitant de l'ablation liquide.

Chapitre 9

Application à la fusion de l'aluminium

Sommaire

9.1 Fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide	197
9.2 Fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air .	199
9.3 Fusion d'une bille d'aluminium dans un écoulement supersonique . . .	203
9.3.1 Validation de la partie hyperbolique	203
9.3.2 Validation de la dissipation visqueuse et la conduction thermique	205
9.3.3 Fusion d'une bille d'aluminium	206
9.4 Conclusion	208

Dans ce chapitre, nous allons employer nos schémas numériques sur des cas plus applicatifs. On veut notamment voir si nos méthodes permettent de simuler le phénomène d'ablation liquide, que ce soit sur des cas quasi-incompressibles de type cavité entraînée, que des cas d'écoulements supersoniques autour d'une bille métallique susceptible de fondre.

9.1 Fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide

Ce cas test monophasique va nous permettre de tester le couplage entre les domaines fluide et solide, avec un certain nombre de phénomènes physique présent dans la partie fluide.

Une cavité fluide de taille $[0, 1] \text{ mm} \times [0, 1] \text{ mm}$ est initialement remplie d'aluminium liquide de densité $\rho_l = 2365 \text{ kg.m}^{-3}$ à la pression $p = 10^5 \text{ Pa}$. La viscosité du fluide est $\mu_l = 1.235 \times 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, et sa conductivité thermique est $\lambda_l = 90 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. La paroi supérieure est entraînée à une vitesse de 10 m.s^{-1} et chauffée à une température de 2000 K . La paroi inférieure est couplée à un domaine solide de taille identique, et de température uniforme égale à la température de fusion $T_f = 933 \text{ K}$. On utilise le couplage comme une simple condition aux limites de fusion, à température $T_s = 933 \text{ K}$ et $\rho_s = 2550 \text{ kg.m}^{-3}$. Cela permet de simplifier les calculs en omettant la résolution de la thermique dans le solide. La chaleur latente de fusion est prise à $3.97 \times 10^5 \text{ J.kg}^{-1}$.

Le liquide est modélisé par la loi d'état de type Mie-Grüneisen afin de retrouver une dilatation thermique correspondant à de l'aluminium liquide. Les paramètres liés à la loi d'état sont donnés dans le [Tab. 9.1](#). L'énergie interne de référence ε_0 , la pression de référence p_0 , la température de référence T_0 , la densité de référence ρ_0 , les coefficients de Grüneisen de référence $\alpha_{p,0}$ et $\beta_{T,0}$ ainsi

grandeurs	valeurs	unités
p_0	10^5	Pa
ρ_0	2368	kg.m^{-3}
c_v	970	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$\alpha_{p,0}$	1.17×10^{-4}	K^{-1}
$\beta_{T,0}$	2.38×10^{-11}	Pa^{-1}
T_0	933	K

Tab. 9.1. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide : paramètres de la loi d'état.

que la capacité volumique c_v permettent de déduire les paramètres Γ (2.4.2.6) et π (2.4.2.7) de la loi d'état tels que

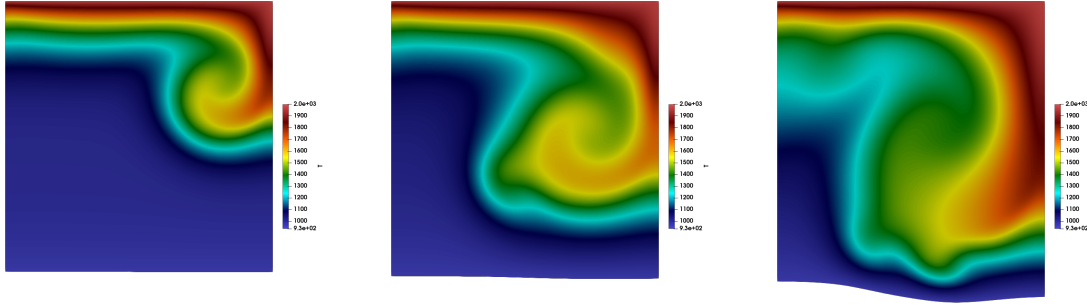
$$\Gamma = \frac{\alpha_{p,0}}{\rho_0 c_v \beta_{T,0}},$$

$$\pi = \frac{1}{\Gamma + 1} \left(\frac{1}{\beta_{T,0}} + \Gamma^2 \rho_0 c_v T_0 \right) - p_0.$$

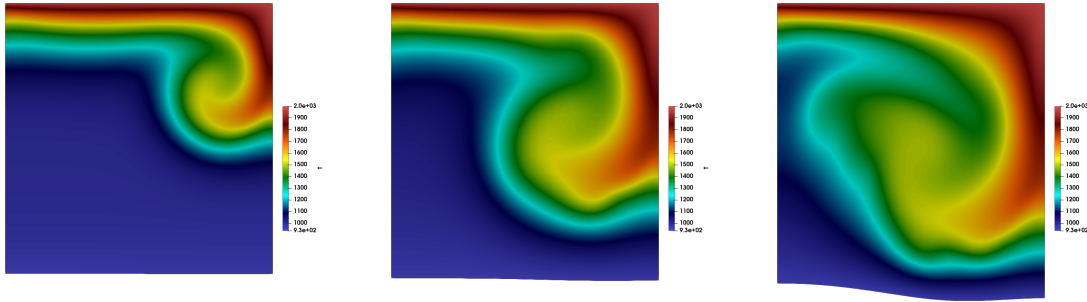
On en déduit alors que les paramètres de la loi d'état de type Mie-Grüneisen valent $\Gamma = 2.14$ et $\pi = 1.651 \times 10^{10}$ Pa. Les calculs sont effectués sur un maillage composé de 128×128 cellules. Une condition de paroi est utilisée sur les trois autres bords, et un raffinement est appliqué sur les quatre bords, avec la loi β (voir Sec. 8.1.5) en prenant $\beta = 1.1$. Le maillage légèrement raffiné ainsi que la présence de la dissipation visqueuse et la conduction thermique rend très attrayante l'approche implicite de la décomposition Lagrange-Transport. En effet, le pas de temps de simulation est ici 1000 fois plus grand que le pas de temps imposé par les conditions de stabilité de **l'étape Lagrange**. Nous allons comparer les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec correction bas-Mach à l'ordre un. Puisque dans ce cas, le nombre de Mach est inférieur à 1 dans tout le domaine, on impose directement $\theta_{LM} = 0$. **L'étape de Transport** est résolue à l'ordre deux avec $\kappa = 1/3$. Le nombre CFL est imposé à 0.1. Le champ de température ainsi que l'amplitude de la vitesse sont représentés sur les Fig. 9.1 et Fig. 9.2 à deux instants différents.

Le nombre de Mach est de l'ordre de $10^{-3} - 10^{-4}$ et le nombre de Reynolds autour de 2×10^4 . La paroi supérieure met en mouvement et chauffe l'aluminium liquide dans la cavité. Le mouvement du liquide prend la forme d'un vortex, qui vient se déstabiliser au centre du domaine. Lorsque la température augmente en bas du domaine, un flux thermique significatif active la condition de fusion. On a alors injection d'aluminium liquide et récession de la paroi. Pour les deux schémas, le profil d'ablation est similaire. Les différences sont dues à la recirculation du liquide qui se déstabilise différemment. On constate numériquement qu'avec simplement un schéma d'ordre un sur **l'étape de Transport** et une correction bas Mach sur **l'étape Lagrange**, la recirculation du liquide n'est jamais déstabilisée. Le schéma à l'ordre un est trop diffusif. En ajoutant l'ordre deux sur **l'étape Lagrange**, il n'y a quasiment aucune différence. La stratégie d'utiliser un simple schéma d'ordre un avec une correction bas Mach sur **l'étape Lagrange** et un schéma d'ordre deux sur **l'étape de Transport** est au moins nécessaire pour observer des instabilités dans l'écoulement.

On trace sur la Fig. 9.3 le profil d'ablation au temps final $t = 2\text{ms}$ ainsi que l'évolution du flux



(a) Schéma unidimensionnel.



(b) Schéma multidimensionnel.

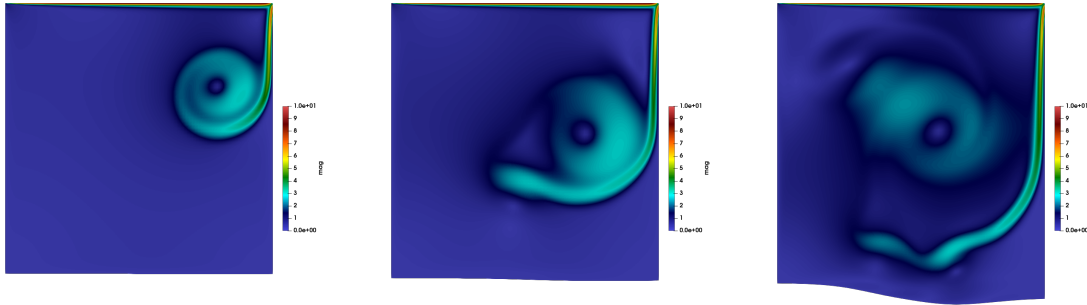
Fig. 9.1. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide : évolution temporelle de la température à $t = 0.66\text{ms}$ (gauche), $t = 1.32\text{ms}$ (centre) et $t = 2\text{ms}$ (droite) pour les schéma unidimensionnel et multidimensionnel.

thermique $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ en $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$ en fonction du temps au centre de la paroi. Les profils d'ablation obtenus avec les deux schémas sont différents, surtout au centre du domaine. La différence maximale de déplacement de la paroi est d'environ un dixième de millimètre. On se rend compte, en observant l'évolution du flux thermique à $x = 0.5 \text{ mm}$ que celui-ci évolue différemment à partir de $t = 1 \text{ s}$. En effet, le champ de vitesse se déstabilisant différemment entre les deux schémas, la quantité de chaleur apportée à la paroi est bien plus grande avec le schéma unidimensionnel, d'un facteur deux à $t = 1.8 \text{ ms}$. L'ablation est ainsi très différente.

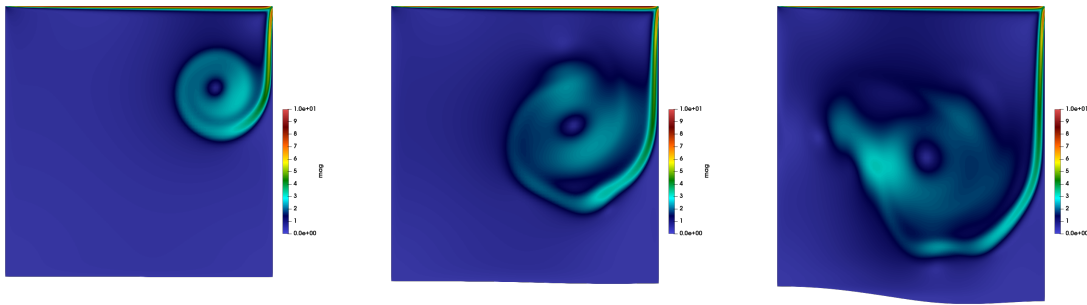
9.2 Fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air

Contrairement au cas précédent, on va chercher à étudier le processus d'ablation liquide d'un bloc d'aluminium par un gaz chaud.

Une cavité fluide de taille $[0, 10] \text{ mm} \times [0, 10] \text{ mm}$ est initialement remplie d'air de densité $\rho_g = 0.296 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ à la pression $p = 10^5 \text{ Pa}$. Ce gaz est modélisé par la loi d'état des gaz parfait. La paroi supérieure est entraînée à une vitesse de $1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et chauffée à une température de 8000 K . La paroi



(a) Schéma unidimensionnel.



(b) Schéma multidimensionnel.

Fig. 9.2. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide : évolution temporelle de l'amplitude de la vitesse à $t = 0.66\text{ms}$ (gauche), $t = 1.32\text{ms}$ (centre) et $t = 2\text{ms}$ (droite) pour les schéma unidimensionnel et multidimensionnel.

inférieure est couplée à un domaine solide de taille identique, à température de fusion $T_f = 933\text{ K}$. Le processus d'ablation va injecter dans le domaine fluide de l'aluminium liquide de densité $\rho_g = 2368\text{ kg.m}^{-3}$. Le liquide est représenté par un gaz raide. Cette loi d'état est suffisante dans le contexte où la variation de température de la phase liquide est assez faible. Les données du liquide et du gaz sont présentées dans le Tab. 9.2. On utilise le couplage comme une simple condition aux limites de fusion, à température $T_s = 933\text{ K}$ et $\rho_s = 2550\text{ kg.m}^{-3}$. Contrairement au cas précédent, on prend une chaleur latente de fusion de $3.97 \times 10^3\text{ J.kg}^{-1}$. Elle est 100 fois inférieure à celle utilisée dans le cas précédent. Cela permet d'avoir un processus d'ablation significatif sur une durée plus courte.

La tension de surface va avoir un rôle important à jouer dans cette application. En effet, en prenant un coefficient de tension de surface $\sigma = 0.88\text{ Pa}$, le nombre de Weber est estimé à $We = 30$. Les forces capillaires sont alors supérieures en moyenne aux forces inertielles. De plus, l'angle de mouillage est pris à $\theta = 75^\circ$. Ainsi, lorsque du liquide fondu sera injecté dans la cavité, il va remonter sur les paroi gauche et droite. Les incertitudes sur les grandeurs liées aux forces capillaires sont grandes, c'est pourquoi elles sont choisies afin d'avoir un impact significatif sur le processus de fusion.

Les calculs sont réalisés sur un maillage de 128×128 cellules. La loi β permet de raffiner le

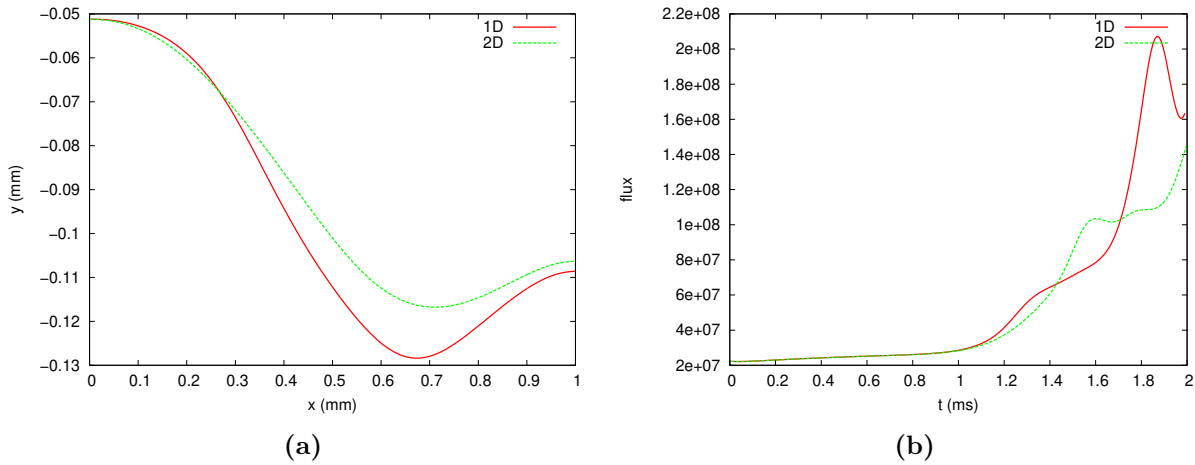


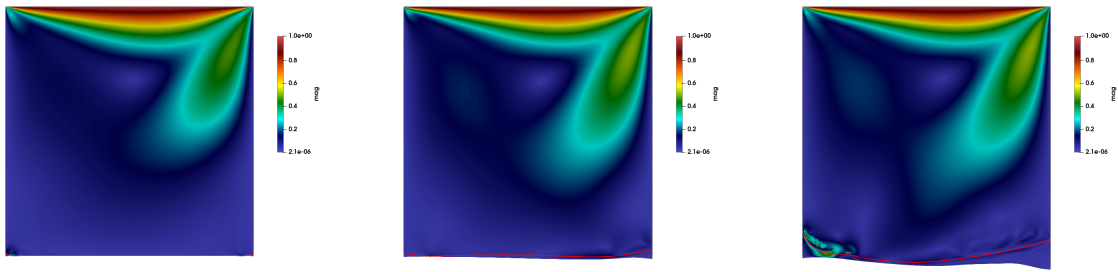
Fig. 9.3. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide : profil d'ablation (a) et évolution temporelle du flux thermique au centre de la paroi (b) pour les schémas unidimensionnel et multidimensionnel.

	Al. liquide	Air
ρ (kg.m ⁻³)	2368	0.296
γ	1.4	1.4
π (Pa)	8.57×10^8	0
μ (Pa.s)	1.235×10^{-3}	1.8×10^{-5}
λ (W.m. ⁻¹ .K ⁻¹)	90	2×10^{-2}
c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	970	905

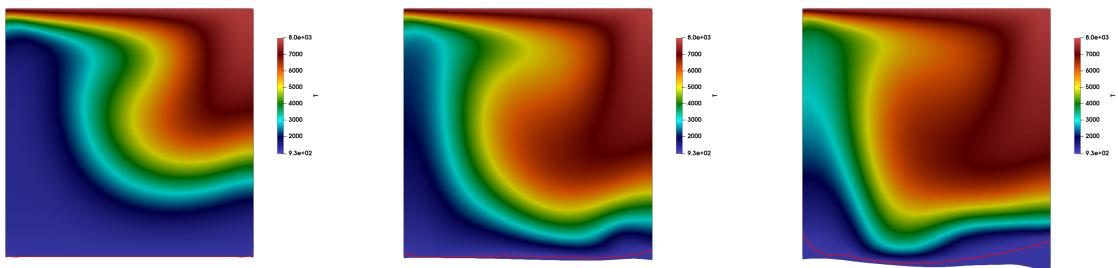
Tab. 9.2. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air : données initiales du liquide et du gaz.

maillage en prenant $\beta = 1.01$. Le schéma unidimensionnel d'ordre un avec correction bas Mach est utilisé sur **l'étape Lagrange**, tandis que le schéma d'ordre deux avec le limiteur compressif et $\kappa = 1/3$ est utilisé sur **l'étape de Transport**. Sur ce cas spécifique, l'approche CSS modélisant les forces de tension de surface produit des courants parasites du même ordre de grandeur que la vitesse de l'écoulement. Les précédents cas de validation ont montré que la formulation CSF, équilibrée par construction, produit des courants parasites d'une plus faible amplitude. Ainsi, cette dernière formulation est utilisée. Le temps final ici est $t_f = 0.15$ s. Grâce à l'approche implicite de **l'étape Lagrange**, le pas de temps utilisé est 3000 fois plus grand que celui imposé par l'approche explicite. Un raffinement plus important à la paroi aurait rendu l'approche implicite encore plus attractive.

On représente sur les [Fig. 9.4](#) l'évolution du champ de température ainsi que l'amplitude de la vitesse dans le domaine. L'interface gaz/liquide est représentée comme l'isoligne rouge $z = 0.5$. La paroi supérieure du domaine entraîne le gaz initialement au repos. Le champ de vitesse observé est caractéristique d'un écoulement dans une cavité entraînée. On observe une recirculation au centre



(a) Amplitude de la vitesse.



(b) Température.

Fig. 9.4. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air : évolution de l'amplitude de la vitesse (a) et de la température (b) à $t = 0.05$ s, 0.1 s et 0.15 s. Isoligne de la fraction volumique à $z = 0.5$ en rouge.

du domaine. La paroi chauffe également le gaz, qui est initialement à $T = 920$ K. La recirculation de gaz amène alors une quantité importante d'énergie à la paroi inférieure. Dans notre approche, un tel écoulement ne peut pas être correctement calculé sans employer de correction bas Mach. Lorsque la température à la paroi atteint la température de fusion $T = 933$ K, le processus d'ablation liquide commence. Le liquide qui apparaît se déplace rapidement vers les coins inférieurs du domaine, sous l'effet de la force de tension de surface et particulièrement des forces au niveau de la ligne triple. Dans ces poches de liquide, la vitesse de l'écoulement est très petite, mais des recirculations sont présentes. Du liquide chaud est coincé et le processus d'ablation est plus important.

Comme illustré sur la [Fig. 9.5](#) l'interface liquide/gaz reste très peu diffusée grâce au limiteur compressif utilisé sur la fraction volumique z . On compare également au même temps le profil de la fraction volumique avec et sans la tension de surface. Sans tension de surface, l'interface reste complètement plane. Le liquide n'est pas du tout en mouvement. On en conclut que, même si on a diminué artificiellement l'enthalpie de fusion de l'aluminium, et que la température imposée à la paroi supérieure est très grande, la tension de surface à un rôle majeur dans ce type d'application.

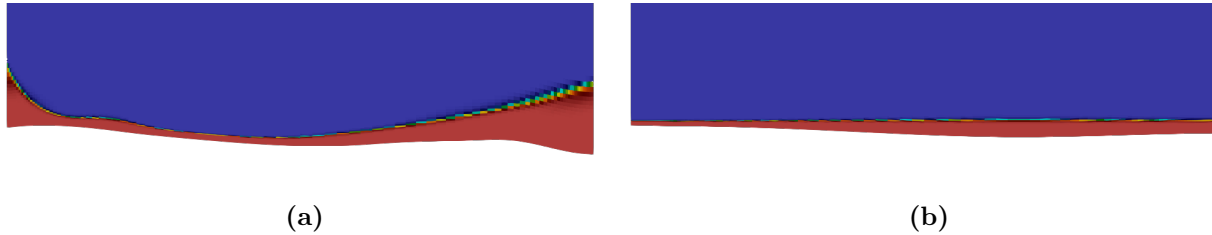


Fig. 9.5. Simulation de la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air : fraction volumique au temps final $t_f = 0.15$ s (a) avec tension de surface et (b) sans tension de surface.

9.3 Fusion d'une bille d'aluminium dans un écoulement supersonique

Dans ce dernier cas applicatif, on cherche à étudier l'ablation liquide d'une bille d'aluminium d'un centimètre de rayon soumise à un écoulement hypersonique.

Ce cas est inspiré d'une étude expérimentale et numérique menée dans [DHB⁺22] sur le processus d'ablation liquide du Gallium. On considère une bille soumise à un écoulement gazeux supersonique, pour lequel l'écoulement amont est défini par $\rho_g = 0.7049$ kg.m⁻³, $\mathbf{u}_g = (1670, 0)$ m.s⁻¹ et $p_g = 6.94 \times 10^4$ Pa. L'air est modélisé par un gaz parfait de coefficient adiabatique $\gamma_g = 1.4$, de viscosité $\mu_g = 2.378 \times 10^{-5}$ Pa.s de conductivité thermique $\lambda_g = 2.56 \times 10^{-2}$ W.m⁻¹.K⁻¹ et de capacité thermique $c_{v,g} = 717.6325$ J.kg⁻¹.K⁻¹. Le maillage est composé de 100×300 cellules.

9.3.1 Validation de la partie hyperbolique

Dans un premier temps, on va chercher une solution stationnaire à cet écoulement. Avant de traiter le système complet, on étudie d'abord le comportement des schémas sur les équations d'Euler. Les schémas unidimensionnel et multidimensionnel à l'ordre un sont comparés. L'approche implicite est employée, avec la géométrie considérée axisymétrique, en utilisant l'approche conservative (voir [Annexe B](#)). Le calcul est considéré convergé lorsque les résidus sont diminués de 6 décades.

Le schéma multidimensionnel est assez dissipatif pour ne pas provoquer d'instabilité de choc, pouvant perturber l'écoulement [PGM17, GCLM22]. Ce n'est pas le cas du schéma unidimensionnel, qui est susceptible de provoquer le phénomène de *Carbuncle* [PGM17, GCLM22]. Pour remédier à cela, une correction est employée. Il en existe de nombreuses dans la littérature, lesquelles sont basées sur l'idée que plus de dissipation numérique permet de limiter la production de ces instabilités. C'est pourquoi les schémas HLL ou Rusanov sont connus pour être moins sensibles au phénomène de *Carbuncle*, contrairement au schéma HLLC ou Roe par exemple. Cependant, dans l'approche de décomposition Lagrange-Transport, Peluchon a montré que le schéma HLL produit ce type d'instabilité de choc [Pel17]. Nous avons alors exploré un autre type de correction pour le schéma unidimensionnel.

Récemment, Flieschmann & al. [FAA20] ont montré qu'une correction des schéma de type Godunov permettant d'être compatible avec les écoulements bas Mach avait la bonne propriété d'être presque insensible aux instabilités de chocs. Leur correction consiste à réduire la dissipation du schéma. C'est le cas du schéma unidimensionnel avec correction bas-Mach présentée dans la [Sec. 6.3.2](#) du [Chapitre 6](#), lequel va réduire la dissipation du schéma dans la zone subsonique. Ce-

pendant, cette approche provoque toujours des instabilités de choc. Ainsi, une approche semblable à [FAA20] est employée. Le flux unidimensionnel de l'étape Lagrange est centré par le Mach local. Les flux de vitesse et de pression deviennent

$$\begin{aligned}\bar{u} &= (1 - \theta) \frac{u_c + u_d}{2} + \theta \left(\frac{\lambda^+ u_c + \lambda^- u_d}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\Delta p}{\lambda^+ + \lambda^-} \right), \\ \bar{p} &= (1 - \theta) \frac{p_c + p_d}{2} + \theta \left(\frac{\lambda^- p_c + \lambda^+ p_d}{\lambda^+ + \lambda^-} - \frac{\lambda^+ \lambda^- \Delta u}{\lambda^+ + \lambda^-} \right).\end{aligned}$$

où θ est toujours le mach local comme défini dans le Chapitre 6. Ces flux sont compatibles avec l'idée de centrer le flux de pression pour avoir un schéma bas-Mach. De plus, dans les zones quasi-incompressibles, le schéma sera d'ordre deux. Pour le schéma multidimensionnel, on utilise la correction bas Mach proposée dans la Sec. 6.3.2 du Chapitre 6. Dans ce type d'écoulement, une zone subsonique est présente en aval du choc, proche du point d'arrêt. Celle-ci permet donc de réduire la dissipation dans cette zone et d'avoir des résultats plus précis, notamment en ce qui concerne le champ de pression, devant vérifier à la paroi $\partial_n p = 0$.

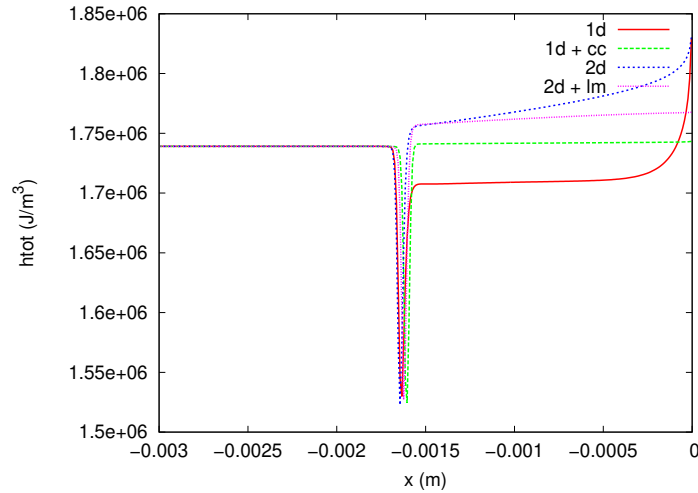


Fig. 9.6. Simulation d'un écoulement axysymétrique autour d'une bille : Enthalpie totale le long de la ligne d'arrêt pour les différents schémas.

De plus, l'enthalpie massique totale doit être conservée le long des lignes de courants en l'absence de choc. Ici, sur la ligne d'arrêt, un choc détaché est présent, c'est pourquoi on observe un léger pic sur l'enthalpie massique totale au niveau du choc sur la Fig. 9.6. Celui-ci est positionné autour de -0.0017 m. En amont du choc, l'enthalpie massique totale est constante. Cependant en aval, elle doit être égale à l'enthalpie massique amont. On remarque que les quatre schémas étudiés donnent des résultats très différents. Tout d'abord, les schémas unidimensionnel et multidimensionnel sans correction ou modification présentent une enthalpie croissante à mesure qu'on se rapproche de la paroi. Ce comportement est problématique dans la mesure où la seule quantité d'intérêt dans la suite sera le gradient de température sur la paroi, qui doit être calculé précisément. De plus, on observe visuellement que le schéma unidimensionnel (1d) produit un *Carbuncle* au niveau du choc détaché, ce qui perturbe l'écoulement. Ce n'est pas le cas du schéma multidimensionnel (2d). Les deux corrections (1d+cc & 2d+lm) utilisées ici permettent de réduire la diffusion numérique des schémas

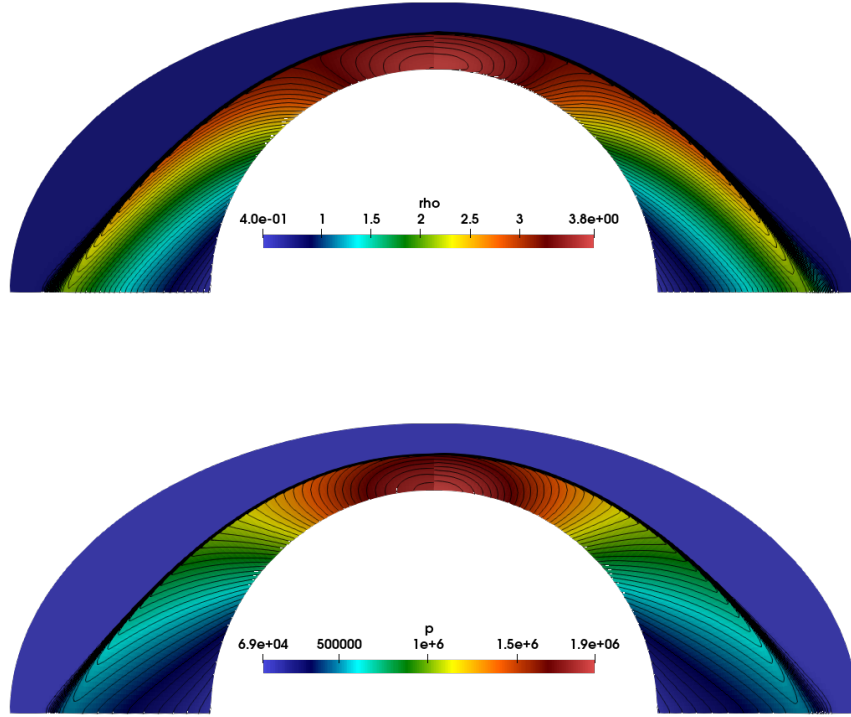


Fig. 9.7. Simulation d'un écoulement axysymétrique autour d'une bille : profil de densité (en haut) et de la pression (en bas) du schéma unidimensionnel avec correction centrée (1d + cc) à gauche et du schéma multidimensionnel avec correction bas-Mach (2d + lm) à droite.

dans la zone subsonique. Pour le schéma multidimensionnel, on observe une nette diminution de l'enthalpie totale en aval par rapport au même schéma sans correction, mais elle n'est cependant toujours pas égale à l'enthalpie amont. Pour le schéma unidimensionnel avec correction centrée, les résultats sont nettement meilleurs. De plus, aucun *Carbuncle* n'est produit par cette correction.

Pour s'en assurer, on présente sur la Fig. 9.7 le champ de densité et de la pression avec 50 isolignes. Premièrement, on constate qu'aucun des schémas ne produit d'instabilité de type *Carbuncle*. Le profil de la densité est plutôt lisse, et même si de légères différences sont notables, les résultats sont cohérents et satisfaisant vis-à-vis de l'observation faite sur l'enthalpie totale le long de la ligne d'arrêt. Le maillage n'est pas suffisamment raffiné pour avoir $\partial_n p = 0$ à la paroi. On s'assurera par la suite que, pour la résolution des équations de Navier-Stokes, qui nécessitent un maillage raffiné proche paroi pour calculer précisément la couche limite, on a bien $\partial_n p = 0$. Le schéma unidimensionnel corrigé donnant ici de meilleurs résultats, c'est celui qui sera retenu pour la suite de l'étude.

9.3.2 Validation de la dissipation visqueuse et la conduction thermique

Maintenant, nous allons prendre en compte la dissipation visqueuse et thermique. On suppose que la paroi de la bille est à sa température de fusion soit $T = 933$ K. Cette température est imposée

à la paroi. Le maillage, toujours composé de 100×300 cellules, est raffiné dans le sens de la bille avec la loi beta telle que $\beta = 1.0005$. La maille au point d'arrêt a ainsi une épaisseur de 10^{-7} m.

On trace le flux thermique à la paroi $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$, en W.m^{-2} (voir Fig. 9.8). Sur la première cellule

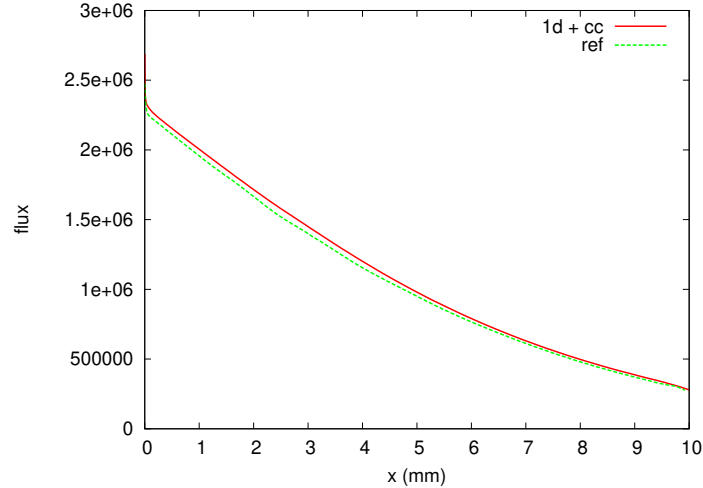


Fig. 9.8. Simulation d'un écoulement axisymétrique autour d'une bille : comparaison entre le schéma unidimensionnel avec correction centrée et la référence.

à la paroi en $x = 0$ mm, le flux à une valeur de $2.65 \times 10^6 \text{ W.m}^{-2}$, puis reprend sur 3 cellules un profil régulier. Le flux obtenu est en accord avec un code interne du CEA, pour lequel la résolution n'est pas basée sur l'approche de décomposition Lagrange-Transport mais sur une approche implicite d'ordre deux en espace. Les profils de la densité et de la température dans le domaine sont présentés sur la Fig. 9.9 avec encore 50 isolignes. De part la couche limite visqueuse, la densité est bien plus élevée que dans le cas Euler. Le schéma unidimensionnel avec correction centrée ne provoque pas de *Carbuncle*, les isolignes de densités et de température sont régulières. De plus, il est généralement nécessaire d'utiliser une correction sur le solveur hyperbolique dans la couche limite visqueuse pour limiter la diffusion. Ici, la correction est activée partout dans la couche limite, où le nombre de Mach tend vers 0 proche de la paroi.

9.3.3 Fusion d'une bille d'aluminium

A partir du calcul Navier-Stokes obtenu précédemment, c'est-à-dire, un écoulement axisymétrique à Mach 4.5 autour d'une sphère de 1 cm, nous allons simuler la fusion de la bille. La condition de non-glissement sur la paroi est remplacée par une condition de fusion. On suppose toujours le solide à température de fusion. Pour simplifier les calculs, on prend une vitesse d'injection nulle, en imposant la densité du solide à celle de l'aluminium liquide, soit $\rho_s = 2368 \text{ kg.m}^{-3}$. L'enthalpie de fusion est toujours prise à $3.97 \times 10^3 \text{ J.kg}^{-1}$ afin d'avoir un processus d'ablation significatif sur un temps court. L'aluminium liquide est supposé régi par la loi des gaz raides, en prenant cette fois les constantes égales à $\gamma = 3.14$ et $\pi = 4586056275.2 \text{ Pa}$. Il est de plus caractérisé par sa viscosité $\mu_l = 1.235 \times 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, sa conductivité thermique est $\lambda_l = 90 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, et sa capacité volumique $c_{v_l} = 920 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$. La tension de surface est ici négligée. Les calculs sont cette fois menés en instationnaire où le temps final est pris à $t_f = 1 \text{ ms}$. Le schéma de **l'étape Lagrange** n'est pas modifié, tandis que **l'étape de Transport** est résolue à l'ordre un (o1) et à l'ordre deux

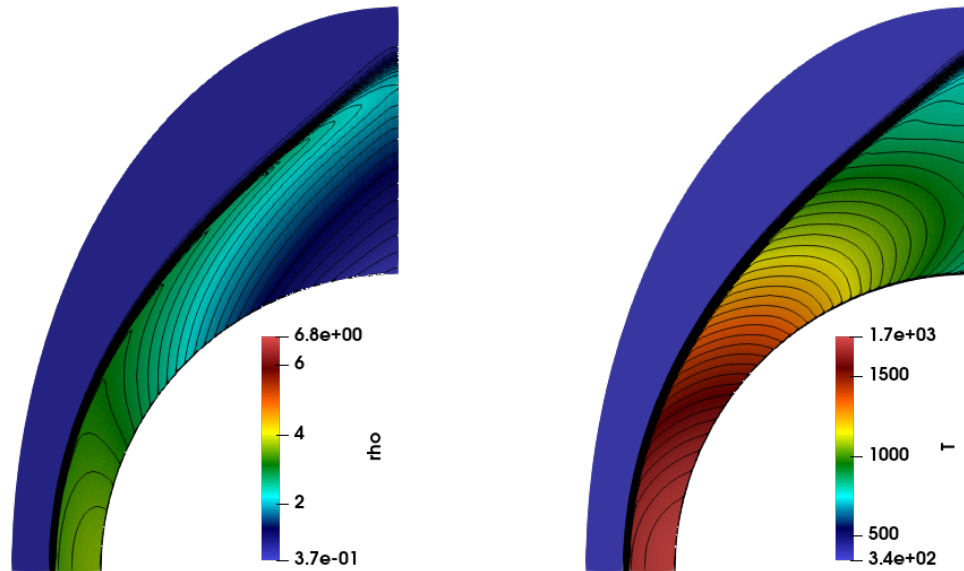


Fig. 9.9. Simulation d'un écoulement axisymétrique autour d'une bille : profil de la densité (à gauche) et de la température (à droite).

(o2). L'ordre un est suffisant sur **l'étape Lagrange** dans la mesure où la correction centrée permet d'être d'ordre deux dans les zones subsoniques. De plus, cette stratégie permet de ne pas avoir de processus itératif à résoudre et est donc moins chère en temps de calcul.

Sur la [Fig. 9.10](#), on trace le profil de la vitesse proche de la paroi autour de $\theta = 60^\circ$ pour les schémas d'ordre un et deux. La position de l'interface liquide/gaz est représentée par l'isoligne rouge $z = 0.5$.

Le profil de vitesse dans la couche limite est différent du profil type pour un écoulement monophasique. En effet, la viscosité du liquide étant beaucoup plus grande que celle du gaz, sa vitesse dans la couche limite visqueuse est beaucoup plus faible. Le profil de vitesse est quasi linéaire dans cette zone, ce qui valide l'hypothèse du régime de lubrification dans le liquide. Le liquide joue pour le gaz comme une paroi entraînée. Le profil de vitesse du gaz est caractéristique d'une couche limite. On remarque également sur la [Fig. 9.10](#) que la paroi n'est pas positionnée au même endroit. A cet endroit précis, l'ablation est plus importante pour le schéma d'ordre deux. Ce n'est pas le cas sur le reste de la paroi. On trace sur la [Fig. 9.11](#) les profils d'ablation en le comparant au profil initial. De manière générale, ceux-ci sont très proches. L'ablation est d'autant plus importante que la surface est proche du point d'arrêt, là où le flux thermique est le plus grand. La température dans la couche de liquide ne varie quasiment pas, est restée à $T_l = 933$ K. Ainsi, le flux thermique est assez constant au cours du temps.

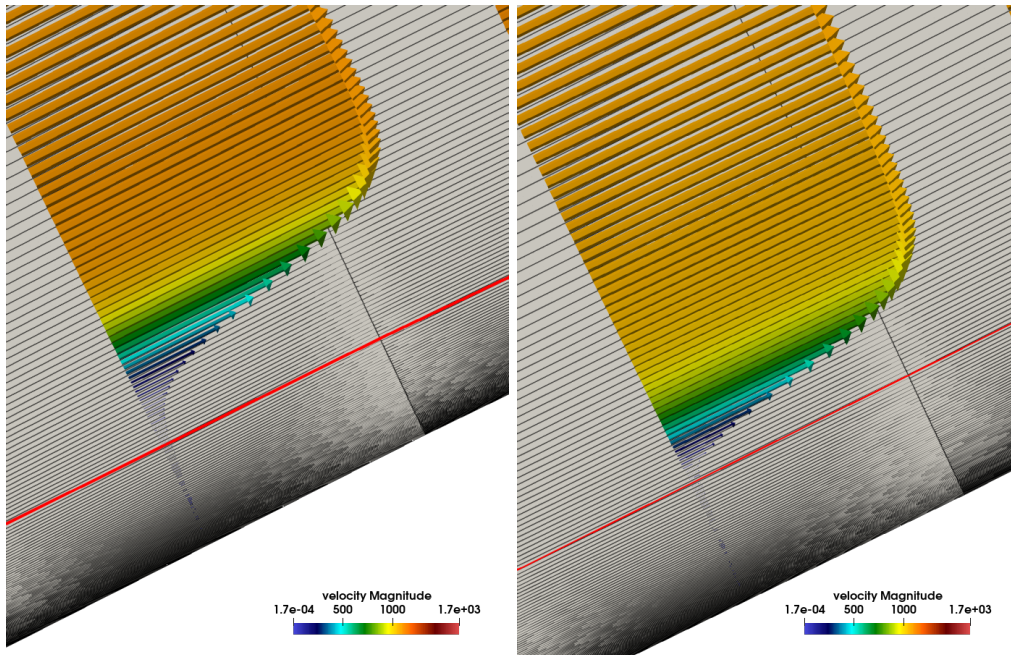


Fig. 9.10. Simulation d'un écoulement axisymétrique autour d'une bille : comparaison à $t = 0.4$ ms du profil de vitesse proche paroi de la bille (à gauche) à l'ordre un sur l'étape de Transport (o1) et (à droite) à l'ordre deux sur l'étape de Transport (o2).

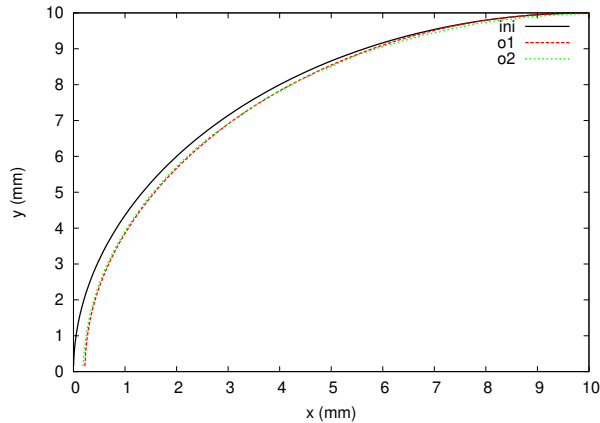


Fig. 9.11. Simulation d'un écoulement axisymétrique autour d'une bille : comparaison des profils d'ablation à l'ordre un et à l'ordre deux au temps final $t_f = 1$ ms.

9.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons pu soumettre nos méthodes numériques au problème de l'ablation liquide. Nous avons d'abord étudié le cas monophasique de l'ablation d'une cavité entraînée remplie d'aluminium liquide. Les schémas unidimensionnel et multidimensionnel avec correction bas-Mach permettent tous les deux de simuler ce type d'écoulement. Ensuite, nous avons choisi le schéma unidimensionnel pour traiter la fusion d'un bloc d'aluminium par une cavité entraînée remplie d'air.

Sur ce cas, nous avons montré l'influence des forces de tension de surface sur le processus d'ablation et la régression de la paroi. Enfin, nous avons pu mener une étude préliminaire de la fusion d'une bille d'aluminium soumise à un écoulement hypersonique. Après avoir mené successivement des calculs Euler puis Navier-Stokes, nous avons utilisé ce dernier comme initialisation du processus de fusion de la bille. L'approche de décomposition Lagrange-Transport utilisée dans ces travaux s'est montrée assez robuste pour traiter cet écoulement diphasique complexe.

Conclusion

Chapitre 10

Conclusion générale et perspectives

Cette thèse avait pour objectif de mettre en place de nouvelles méthodes permettant d'étudier numériquement le phénomène de l'ablation liquide d'une pièce partiellement métallique soumise à un écoulement hypersonique. Ce problème multi-physique a nécessité de considérer trois phases distinctes : une phase gazeuse provenant de l'écoulement hypersonique, une phase solide, ainsi qu'une phase liquide provenant de la fusion du solide. La simulation numérique d'une telle configuration est complexe ; il faut être capable de gérer les grands ratios de densité entre les deux fluides, de pouvoir calculer avec précision la position des interfaces liquide/gaz et liquide/solide, de gérer la déformation du maillage due à l'ablation du matériau, de prendre en compte les effets de dissipation visqueuse et de conduction thermique ainsi que la force de tension de surface, ou encore d'avoir un schéma numérique multi-régime, pouvant aussi bien traiter les écoulements à grand nombre de Mach que ceux à faible nombre de Mach.

La modélisation retenue pour l'écoulement diphasique liquide/gaz est basée sur un modèle à interface diffuse à deux phases. Celui-ci permet entre autres de gérer naturellement les changements de topologie ainsi que la création de nouvelles interfaces. Il existe toute une hiérarchie de modèles à interface diffuse issus du modèle à sept équations de Baer & Nunziato [BN86], présentant tous des avantages et des inconvénients. Le modèle retenu est le modèle à cinq équations réduit [ACK02, MSNA02]. Ce modèle, à une vitesse et une pression, est suffisant pour traiter des écoulements diphasique où les deux phases sont supposées non miscibles, ce qui est supposé vrai dans notre application où l'on considère du métal fondu et de l'air. Il permet de définir une fermeture thermodynamique consistante dans les zones de mélange, considérées comme purement numérique dues à la diffusion des schémas utilisés. Les effets liés à la présence d'une phase multi-espèces ainsi que l'ajout de la dissipation visqueuse et thermique ayant été traités dans [Lat13, Pel17], nous avons ajouté la prise en compte des forces de tension de surface, sous la forme non-conservative CSF [BKZ92] et sous la forme conservative CSS [GLN⁺99]. Le domaine solide, quant à lui, est régi par une équation de conduction thermique. Les effets de pyrolyse, entre autres, sont négligés. Le déplacement de l'interface entre les deux domaines fluide et solide est calculé grâce à une approche ALE. A l'aide de ces modélisations, il nous est possible de calculer le taux de fusion à partir du saut du flux de chaleur entre les domaines fluide et solide. Une étude des équations adimensionnées a permis de montrer que, sous certaines hypothèses, le domaine solide et le domaine fluide peuvent être résolus simultanément en instationnaire. Un algorithme de couplage adéquat a alors été mis au point.

Une partie importante des travaux de cette thèse ont porté sur le développement de méthodes

numériques pouvant traiter de telles configurations. Tout d’abord, le schéma numérique utilisé pour la résolution du domaine solide, ainsi que pour la partie parabolique des équations du domaine fluide, a été dérivé en prenant soin de prendre en compte le déplacement du maillage et la préservation de la GCL. Ensuite, nous avons présenté l’approche générale de résolution de l’écoulement diphasique. Celle-ci est basée sur la décomposition Lagrange-Transport de [CGK16, CGK17], qui consiste à résoudre successivement une **étape Lagrange** puis une **étape de Transport**. Cette méthode permet notamment, par l’utilisation d’un schéma implicite sur l’**étape Lagrange**, d’utiliser des pas de temps plus grands tout en maintenant la précision et la robustesse d’une approche directe classique.

Bien que conservative, la modélisation des forces de tension de surface sous la forme CSS ne permet pas de construire un schéma équilibré, capable de préserver les solutions stationnaires. Cette approche produit des courants parasites, pouvant être d’une amplitude significative lorsque la vitesse de l’écoulement est faible. Dans les applications visées, ce n’est pas forcément le cas. Cette observation nous a mené à construire un schéma numérique adapté à la forme CSF non-conservative. Ainsi, nous avons présenté dans un cadre le plus général possible les schémas de type Godunov non-conservatifs. Grâce aux récents travaux de [GCLM22], nous avons étendu la notion de schéma de type Godunov non-conservatif du cadre unidimensionnel au cadre multidimensionnel. On parle de schéma multidimensionnel car le calcul des flux ne dépend pas seulement des voisins par les faces, mais de tous les voisins par les nœuds. Ce cadre a alors été appliqué au système à cinq équations avec tension de surface sous la forme CSF, en utilisant la théorie des solveurs simples de Gallice [Gal02a, Gal00, Gal03, Gal23]. Deux schémas positifs et équilibrés ont alors été mis au point : un schéma unidimensionnel et son extension en un schéma multidimensionnel. Une correction bas Mach a aussi été proposée pour chacun des deux schémas.

Concernant l’extension à l’ordre 2 des différents schémas proposés, l’approche MUSCL adaptée aux maillages non-réguliers a été employée. Afin de réduire le plus possible l’étalement de l’interface liquide/gaz, nous avons étudié et appliqué un limiteur compressif sur la fraction volumique en nous inspirant de [QCM106, Bla15, CSN17, DFM+21]. Nous avons également construit l’extension à l’ordre deux des schémas de type Godunov non-conservatifs, en montrant la nécessité de prendre un compte un terme centré d’ordre deux lors de la discrétisation du produit non-conservatif.

Enfin, l’ensemble des méthodes numériques développées dans ces travaux a été soumis à une série de cas test académiques. L’intérêt d’avoir une correction bas mach, d’utiliser un schéma multidimensionnel, où encore d’utiliser un limiteur compressif sur l’équation de transport de la fraction volumique a ainsi été discuté. De plus, l’approche CSF, aussi précise que l’approche CSS, a été confirmée comme produisant moins de courants parasites. A la suite de ces validations numériques, différents cas applicatifs ont été étudiés. L’étude préliminaire de la fusion d’une bille d’aluminium soumise à un écoulement supersonique a pu être menée, après une succession de calculs Euler et Navier-Stokes. La méthode de décomposition Lagrange-Transport a ainsi prouvé sa robustesse sur ce type d’écoulement diphasique complexe.

Les perspectives de ces travaux sont nombreuses. A propos des schémas de type Godunov multidimensionnels, un travail intéressant serait de construire un schéma multidimensionnel basé sur un solveur de Riemann simple, définissant une pression nodale unique pour laquelle les écoulements à faible nombre de Mach n’ont pas besoin d’être corrigés. En ce qui concerne le traitement des effets capillaires par la méthode CSF, le calcul de la courbure est largement perfectible. Dans le mesure où le maillage employé est curviligne, une méthode de type *Height-function* peut être envisagée

[CFK05]. Il serait également intéressant de comparer d'autres approches permettant de limiter la diffusion numérique de la fraction volumique avec la méthode utilisée ici, comme les méthodes de type *Phase-Field* [Jai22]. Aussi, pour l'étude de l'ablation liquide dans un écoulement hypersonique, l'approche implicite de l'étape Lagrange-Transport peut s'avérer contraignante vis-à-vis du pas de temps. En effet, la stabilité de la méthode dépend de la vitesse matérielle qui est très grande dans ce type d'écoulement. Un algorithme de couplage avec une résolution stationnaire de l'écoulement fluide peut être envisagé. Ensuite, pour une simulation réaliste de l'ablation d'un bouclier thermique fait d'un matériau composite, il est nécessaire de gérer l'ablation différentielle, entre les fibres de carbone et la matrice métallique, avec un modèle plus complexe pouvant prendre en compte le phénomène de pyrolyse, tout en couplant l'écoulement gazeux multi-espèces à la phase liquide dans le modèle diphasique [Lat13]. Enfin, en vue de valider la méthodologie, c'est-à-dire, les hypothèses de simulation ainsi que les méthodes numériques développées, une comparaison avec des résultats expérimentaux, du type de ceux obtenus dans [DHB⁺22], permettrait de valider la méthodologie et de vérifier que la tension de surface peut jouer un rôle important dans certaines configurations d'étude de l'ablation d'une protection thermique pendant la phase de rentrée.

Annexes

Annexe A

Méthodes des moindres carrés

A.1 Méthodes des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret

A.1.1 Modèle linéaire

La méthode des moindres carrés utilisée pour calculer le gradient local est décrite dans cette annexe. Nous considérons la solution u_c dans \mathbf{x}_c , le centre de la cellule c . Nous définissons alors le modèle linéaire suivant

$$\hat{u}_c(\mathbf{x}) = u_c + \nabla u_c \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c).$$

La méthode consiste à trouver le minimum de la somme

$$S_c = \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} (\hat{u}_c(\mathbf{x}_d) - u_d)^2, \quad (\text{A.1.1.1})$$

où $\mathcal{V}(c)$ est un ensemble de voisins de la cellule c . Le problème de minimisation (A.1.1.1) peut être écrit sous la forme

$$S_c = \|\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{b}\|^2, \quad (\text{A.1.1.2})$$

avec

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_c}{\partial x} \\ \frac{\partial u_c}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} x_{d_1} - x_c & y_{d_1} - y_c \\ x_{d_2} - x_c & y_{d_2} - y_c \\ \vdots & \vdots \\ x_{d_N} - x_c & y_{d_N} - y_c \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} u_{d_1} - u_c \\ u_{d_2} - u_c \\ \vdots \\ u_{d_N} - u_c \end{pmatrix}.$$

où N est le nombre de cellules voisines.

A.1.2 Modèle quadratique

On reprend les notations précédentes. Cette fois, on définit le modèle quadratique

$$\hat{u}_c(\mathbf{x}) = u_c + \nabla u_c \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)^t \nabla^2 u_c (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c).$$

Pour s'assurer que le modèle quadratique est conservatif dans le sens où

$$\frac{1}{|\Omega_c|} \int_{\Omega_c} \hat{u}_c(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = u_c,$$

il est nécessaire de rajouter la correction suivante

$$\hat{u}_c(\mathbf{x}) = u_c + \nabla u_c \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) + \frac{1}{2} \left((\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)^t \nabla^2 u_c (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) - \frac{1}{|\Omega_c|} \int_{\Omega_c} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)^t \nabla^2 u_c (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) d\mathbf{x} \right).$$

Dans le cas du modèle linéaire, on a choisit de définir le centre des cellules \mathbf{x}_c comme le centre de masse, ce qui permet d'avoir naturellement un modèle linéaire conservatif. Dans le cas du modèle quadratique, on ne peut pas faire disparaître les moments d'ordre 2 : ils doivent être calculés et stockés. Le problème de minimisation devient

$$S_c = \|\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{b}\|^2, \quad (\text{A.1.2.1})$$

avec cette fois

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_c}{\partial x} \\ \frac{\partial u_c}{\partial y} \\ \frac{\partial^2 u_c}{\partial^2 x} \\ \frac{\partial^2 u_c}{\partial^2 y} \\ \frac{\partial x \partial y}{\partial^2 u_c} \\ \frac{\partial^2 y}{\partial^2 u_c} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \delta\mathbf{X}_{c,d_1}^{(1,0)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_1}^{(0,1)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_1}^{(2,0)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_1}^{(1,1)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_1}^{(0,2)} \\ \delta\mathbf{X}_{c,d_2}^{(1,0)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_2}^{(0,1)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_2}^{(2,0)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_2}^{(1,1)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_2}^{(0,2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \delta\mathbf{X}_{c,d_N}^{(1,0)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_N}^{(0,1)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_N}^{(2,0)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_N}^{(1,1)} & \delta\mathbf{X}_{c,d_N}^{(0,2)} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} u_{d_1} - u_c \\ u_{d_2} - u_c \\ \vdots \\ u_{d_N} - u_c \end{pmatrix}.$$

et la notation

$$\delta\mathbf{X}_{c,d}^\alpha = \frac{1}{|\Omega_d|} \int_{\Omega_d} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)^\alpha d\mathbf{x} - \frac{1}{|\Omega_c|} \int_{\Omega_c} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)^\alpha d\mathbf{x}, \quad \alpha = (\alpha_1, \alpha_2) \in \{0, 1, 2\}^2.$$

Ces coefficients $\delta\mathbf{X}_{c,d}^\alpha$ composés des moments d'ordre 1 et 2, peuvent être calculés numériquement [Ste96].

A.2 Méthodes des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret au nœud

Pour calculer un gradient discret au nœud, il est nécessaire d'interpoler la grandeur considérée. En effet les inconnues sont situées aux centres des cellules, donc nous n'avons pas accès à leur valeur aux nœuds. Le problème de minimisation s'écrit alors

$$S_c = \|\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{b}\|^2, \quad (\text{A.2.0.1})$$

avec

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} u_c \\ \frac{\partial u_c}{\partial x} \\ \frac{\partial u_c}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_{d_1} - x_c & y_{d_1} - y_c \\ 1 & x_{d_2} - x_c & y_{d_2} - y_c \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{d_N} - x_c & y_{d_N} - y_c \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} u_{d_1} \\ u_{d_2} \\ \vdots \\ u_{d_N} \end{pmatrix}.$$

A.3 Résolution du problème des moindres carrés

Trouver le minimum de (A.1.1.2), (A.1.2.1) et (A.2.0.1) consiste à trouver le minimum de la fonction $f(\mathbf{X}) = \|\mathbf{AX} - \mathbf{b}\|^2$. Son gradient est nul lorsque $\mathbf{AX} = \mathbf{b}$. La méthode des moindres carrés nécessite de résoudre un problème surdéterminé de la forme

$$\mathbf{AX} = \mathbf{b}.$$

Il est évidemment possible d'utiliser des poids dans la procédure des moindres carrés. Il suffit pour cela de transformer le problème par

$$\mathbf{WAX} = \mathbf{Wb}.$$

Ce système surdéterminé est résolu en passant par les équations normales, c'est-à-dire en multipliant le système par $(\mathbf{WA})^T$, et la solution est la suivante

$$\mathbf{X} = (\mathbf{A}^T \mathbf{W}^T \mathbf{WA})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{W}^T \mathbf{Wb}.$$

Dans le cas où la matrice est mal conditionnée, le calcul du gradient peut être imprécis. Une autre approche pour éviter ce problème consiste à utiliser la décomposition QR. La matrice \mathbf{WA} peut être décomposée comme $\mathbf{WA} = \mathbf{QR}$ où \mathbf{Q} est une matrice orthogonale et \mathbf{R} une matrice triangulaire supérieure. La solution s'écrit alors

$$\mathbf{X} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Q}^T \mathbf{Wb}.$$

La deuxième méthode est donc préférable. La décomposition QR est effectuée avec l'algorithme de Gram-Schmidt modifié [Gan80]. Notons que la matrice $\mathbf{R}^{-1} \mathbf{Q}^T \mathbf{W}$ n'est constituée que de paramètres géométriques. Lorsque le maillage ne bouge pas, il suffit alors de la calculer une fois lors de l'initialisation des calculs et de la stocker.

Remarque 23

La méthode des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret en utilisant un modèle linéaire avec une matrice de poids \mathbf{W} diagonale telle que

$$w_{kk} = \|\mathbf{x}_{d_k} - \mathbf{x}_c\|^{-q},$$

avec $q \in [0, 2]$ est généralement utilisé. Dans [SVD⁺17], les auteurs montrent que le choix $q = 3/2$ permet d'avoir une reconstruction de gradient précise au second ordre pour des maillages curvilignes lisses ou sur des maillages de parallélogrammes identiques. Cette propriété est prouvée dans [Nis21b] pour des maillages non uniformes unidimensionnels.

Annexe B

Décomposition Lagrange-Transport : version axisymétrique

On s'intéresse ici au développement d'une version axisymétrique de l'approche de décomposition Lagrange-Transport pour la résolution du système à cinq équations avec force de tension de surface et effets dissipatifs. Nous allons d'abord étudier la version axisymétrique des équations du système sans aucun autre effet que les ondes acoustiques, puis nous étendrons la schéma numérique obtenu à la formulation complète.

B.1 Le système à cinq équations

B.1.1 Formulation continue

On rappelle que le système à cinq équations (5.1.0.1) est donné par

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t (\rho y) + \nabla \cdot (\rho y \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \mathbf{0}, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z & = 0. \end{cases}$$

L'approche de décomposition Lagrange-Transport utilisée ici et largement détaillée dans les chapitres précédents nous mène à considérer deux sous-systèmes, un premier sous-système résolu lors de l'étape **Lagrange**

$$\begin{cases} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t y & = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p & = \mathbf{0}, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t z & = 0, \end{cases}$$

ainsi qu'un second sous-système de **l'étape de Transport**, donné sous sa forme compacte par

$$\partial_t \mathbf{U} + \nabla \cdot (\mathbf{uU}) - \mathbf{U} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{B.1.1.1})$$

où \mathbf{U} correspond au vecteur $(\rho, \rho y, \rho \mathbf{u}, \rho E, z)^t$ des variables du système. Jusqu'ici, les coordonnées du système sont données implicitement dans l'opérateur $\nabla \cdot$. Nous avons déjà étudié le système en géométrie plane, nous allons maintenant l'étudier en géométrie cylindrique.

On se place maintenant dans un repère cylindrique 3D, où un point quelconque de l'espace est repéré par ses coordonnées (x, θ, z) dans la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_r)$. On considère notamment que l'écoulement étudié est axisymétrique, ce qui revient à dire qu'aucune grandeur ne dépend de θ . Le repère pseudo-2D d'un point à partir de (x, r) où x est la projection du point sur l'axe de symétrie et r sa distance avec l'axe de symétrie, est maintenant considéré. Le champ de vitesse est alors donné par $\mathbf{u} = (u_x, u_r)$. Dans un repère cylindrique, seul l'opérateur divergence est modifié. Nous allons voir ainsi deux formulations différentes du systèmes Lagrange. **L'étape de Transport**, elle, n'est pas impactée.

Première formulation

La première formulation du système Lagrange est la suivante

$$\begin{cases} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} &= \vartheta u_r / r, \\ \partial_t y &= 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p &= \mathbf{0}, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p\mathbf{u}) &= -\vartheta u_r p / r, \\ \partial_t z &= 0, \end{cases}$$

Le repère axisymétrique introduit alors un terme source ponctuel sur l'équation du volume et de l'énergie. Bien que facile à implémenter, cette formulation est non conservative sur l'équation sur le volume, ce qui est un élément ne permettant pas de construire un schéma numérique adapté à l'approche de décomposition Lagrange-Transport. En effet, cette approche nécessite d'utiliser, lors de **l'étape de Transport**, une vitesse de transport égale à l'opposé de la première composante du flux numérique de **l'étape Lagrange**, dans le but d'avoir un schéma globalement conservatif. Sous cette forme, il n'est pas possible de déterminer une telle vitesse de transport. Ainsi, on s'intéresse à une deuxième formulation.

Seconde formulation

En remarquant que lors de **l'étape Lagrange**, le maillage est statique, on a $\partial_t r = \partial_x r = 0$. Le système précédent peut alors s'écrire sous sa seconde forme

$$\begin{cases} \partial_t(r\vartheta) - \vartheta \nabla \cdot (r\mathbf{u}) &= 0, \\ \partial_t y &= 0, \\ \partial_t(r\mathbf{u}) + \vartheta \nabla(rp) &= \mathbf{0}, \\ \partial_t(rE) + \vartheta \nabla \cdot (rp\mathbf{u}) &= 0, \\ \partial_t z &= 0, \end{cases}$$

Cette forme possède l'avantage d'être conservative. Ainsi, il sera possible, lors de la construction du schéma numérique global, de déterminer une vitesse matérielle pour **l'étape de Transport** permettant d'être globalement conservatif.

B.1.2 Formulation discrète

Première formulation

La discrétisation de la première formulation est classique. Il suffit pour cela d'évaluer de manière ponctuelle les termes sources au sein des cellules. En pratique, la méthode des volumes finis *Cell-Centred* d'ordre un donne

$$\int_{\Omega_c} \int_{\Delta t} \phi(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x} = \Delta t |\Omega_c| \phi_c^n, \quad (\text{B.1.2.1})$$

pour toute quantité $\phi(\mathbf{x}, t)$. Il suffit alors de rajouter au second membre du schéma numérique la discrétisation des termes sources par (B.1.2.1). Notons que lors de la formulation implicite, lors de **l'étape Lagrange**, on résout le système vitesse pression

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p &= \mathbf{0}, \\ \partial_t p + a^2 \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} &= -\frac{a^2 \vartheta u_r}{r}. \end{cases}$$

Le terme source sur l'équation de la pression peut directement être intégré de manière implicite lors de la résolution du système linéaire.

En ce qui concerne **l'étape de Transport**, on ne peut pas déterminer de vitesse matérielle permettant d'avoir un schéma globalement conservatif. On se contente alors de l'opposé de la première composante du flux de **l'étape Lagrange**, sans tenir compte du terme source.

Seconde formulation

Pour la seconde formulation, sa forme conservative la rend plus facile à traiter. Le schéma numérique global de la résolution de **l'étape Lagrange** devient

$$\mathbf{V}_c^\dagger = \mathbf{V}_c^n - \vartheta_c^n \frac{\Delta t}{|\Omega_c|} \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \overline{\mathbf{G}}_{cd}$$

avec

$$\mathbf{V}_c = (r\vartheta, y, r\mathbf{u}, rE, z)_c^t,$$

et

$$\overline{\mathbf{G}}_{cd} = r_f/r_c (-\bar{u}, 0, \bar{p}\mathbf{n}, \bar{p}\bar{u}, 0)_{cd}^t,$$

où r_{cd} le rayon au centre de la face cd et r_c le rayon au centre de la cellule c . Cette écriture est valable aussi bien pour le schéma unidimensionnel que pour le schéma multidimensionnel. Pour **l'étape de Transport**, il suffit alors de prendre comme vitesse matérielle \bar{u}_{axi} pour avoir un schéma globalement conservatif.

B.1.3 Validation numérique

Nous allons illustrer la différence majeure entre les deux formulations axisymétriques pour la partie hyperbolique à l'aide d'un tube à choc monophasique. Pour cela, on se place sur un domaine $\Omega = [0, 1]$ m. L'état initial est composé de deux états constants séparés par une discontinuité, tels que

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1, 0, 1) & \text{si } x \leq 0.5 \text{ m,} \\ (0.125, 0, 0.1) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le gaz suit la loi d'état des gaz parfaits avec le coefficient adiabatique $\gamma = 1.4$. Le temps final de la simulation est $t_f = 0.2$ s. Le maillage est composé de 500 cellules. La résolution de l'**étape Lagrange** est explicite en temps, le schéma numérique est d'ordre un et le nombre CFL est de 0.4. La solution de référence est obtenue par résolution directe des équations d'Euler axisymétrique avec 10000 mailles. On trace sur la Fig. B.1 la densité, la vitesse, ainsi que la pression au temps final. Le

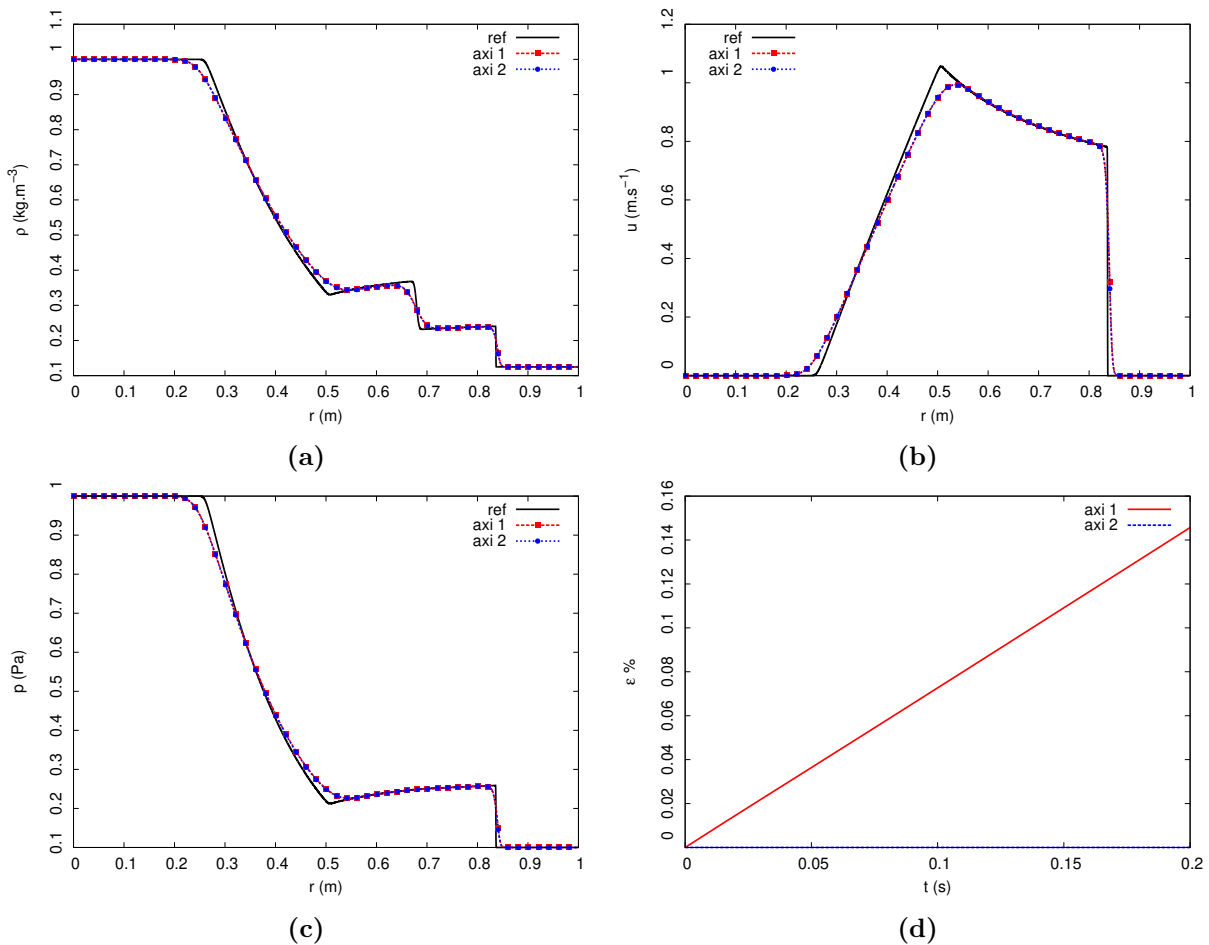


Fig. B.1. Tube à choc unidimensionnel axisymétrique. La densité (en haut à gauche), la vitesse (en haut à droite), la pression (en bas à gauche) sont comparés au temps final $t_f = 240\mu\text{s}$ avec une solution de référence pour les formulations non-conservative (axi 1) et conservative (axi 2). Évolution de la conservation de la masse (en bas à droite)

profil usuel du tube à choc de Sod en géométrie plane, est retrouvé, à ceci-près que les "plateaux" ne sont plus constants, du fait de la nature cylindrique de l'écoulement. Par ailleurs, les profils de densité, de vitesse et de pression des deux formulations sont indiscernables. Toutefois, à cet instant de la simulation, les ondes n'ont pas atteint les bords du domaine. De fait, on s'attend à ce que la quantité totale de masse dans le domaine demeure inchangée de $t = 0$ à $t = t_f$. Considérons alors l'écart relatif entre la masse totale à l'instant t

$$\rho_{tot}(t) = \int_{\Omega} \rho(r, t) dr,$$

et la masse totale initiale $\rho_0 = \rho_{tot}(t = 0)$. Notons cet écart, évalué en pourcentage

$$\varepsilon(t) = 100 \frac{|\rho_{tot}(t) - \rho_0|}{\rho_0}.$$

Lorsque l'on trace l'évolution de cet écart relatif ε au cours du temps, on obtient la fig [Fig. B.1.d](#). On constate la différence fondamentale entre les deux formulations. L'écart relatif reste nul (à l'erreur numérique près) pour la formulation conservative, tandis qu'il croît linéairement avec le temps pour la formulation non-conservative.

B.2 Le système à cinq équations avec termes dissipatifs

B.2.1 Formulation continue

On rappelle que le modèle à cinq équations avec termes dissipatifs s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t (\rho y) + \nabla \cdot (\rho y \mathbf{u}) & = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p & = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + p \mathbf{u}) & = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q}, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z & = 0. \end{cases}$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses et \mathbf{q} le flux thermique, modélisé par la loi de Fourier. La décomposition Lagrange-Transport nécessite de traiter lors de **l'étape Lagrange** le sous-système

$$\begin{cases} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} & = 0, \\ \partial_t y & = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p & = \vartheta \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p \mathbf{u}) & = \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}) - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{q}, \\ \partial_t z & = 0. \end{cases}$$

Comme précédemment, nous allons voir deux formulations de ce système Lagrange en coordonnées cylindrique sous l'hypothèse d'un écoulement axisymétrique.

Première formulation

La première formulation du système Lagrange est la suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \vartheta - \vartheta \nabla \cdot \mathbf{u} = \vartheta u_r / r, \\ \partial_t y = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \vartheta \nabla p = \vartheta \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \vartheta \mathbf{S}_{\boldsymbol{\tau}} / r, \\ \partial_t E + \vartheta \nabla \cdot (p\mathbf{u}) = \vartheta \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}\mathbf{u} - \mathbf{q}) - \vartheta u_r p / r + \vartheta \mathbf{S}_{\boldsymbol{\tau}} / r, \\ \partial_t z = 0, \end{array} \right.$$

où

$$\mathbf{S}_{\boldsymbol{\tau}} = (\tau_{xr}, \tau_{rr} - \tau_{\theta\theta}), \quad \text{et} \quad \mathbf{S}_{\boldsymbol{\tau}} = \tau_{xr} u_x + \tau_{rr} u_r - q_r,$$

avec

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2\partial_x u_x - \frac{2}{3} \left(\partial_x u_x + \partial_r u_r + \frac{u_r}{r} \right), \\ \tau_{rr} &= 2\partial_r u_r - \frac{2}{3} \left(\partial_x u_x + \partial_r u_r + \frac{u_r}{r} \right), \\ \tau_{xr} &= \partial_r u_x + \partial_x u_r, \\ \tau_{\theta\theta} &= \frac{2u_r}{r} - \frac{2}{3} \left(\partial_x u_x + \partial_r u_r + \frac{u_r}{r} \right). \end{aligned}$$

Cette formulation est facile à mettre en œuvre, mais elle possède les mêmes problème lié à la non conservation de l'équation du volume quant à la conservation du schéma global. Ainsi, nous allons voir une seconde formulation.

Seconde formulation

La seconde formulation du système Lagrange est la suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(r\vartheta) - \vartheta \nabla \cdot (r\mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t y = 0, \\ \partial_t(r\mathbf{u}) + \vartheta \nabla(rp) = \vartheta \nabla \cdot (r\boldsymbol{\tau}) - \vartheta \tau_{\theta\theta}, \\ \partial_t(rE) + \vartheta \nabla \cdot (r p \mathbf{u}) = \vartheta \nabla \cdot (r\boldsymbol{\tau}\mathbf{u}) - \vartheta \nabla \cdot (r\mathbf{q}), \\ \partial_t z = 0, \end{array} \right.$$

où cette fois, on écrit $\tau_{\theta\theta}$ sous la forme

$$\tau_{\theta\theta} = \frac{4}{3} \frac{u_r}{r} - \frac{2}{3r} (\partial_x(ru_x) + \partial_r(ru_r)).$$

Ce système est quasi-conservatif. En effet, malgré l'absence de vitesse orthoradiale, la quantité $\tau_{\theta\theta}$ reste présente comme un terme non conservatif et doit être traité comme tel. Cependant, puisque ce terme ne joue que sur l'équation de la vitesse, il est toujours possible de déterminer une vitesse matérielle pour **l'étape de Transport** permettant d'avoir un schéma globalement conservatif.

La dérivation de schémas numériques adaptés à ces deux formulations se fait de manière analogue au cas sans terme dissipatif.

B.3 Prise en compte du mouvement de maillage

Nous avons vu dans les chapitres précédents que le mouvement de maillage de la zone fluide est pris en compte lors de l'**étape de Transport**. Ainsi, il est nécessaire de prendre en compte le rayon r dans (B.1.1.1). On a l'équation de transport en axisymétrique sur maillage mobile

$$\partial_t(r\mathbf{U}) + \nabla \cdot (r\mathbf{u}\mathbf{U}) - \mathbf{U}\nabla \cdot r\mathbf{u} = 0.$$

En reprenant les notations du Chapitre 5, le schéma numérique de l'étape de transport est ainsi modifié

$$r_c^{n+1}|\Omega_c^{n+1}|\phi_c^{n+1} = r_c^n|\Omega_c^n|\phi_c^\dagger - \Delta t \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| \phi_{cd}^\dagger r_{cd}^n (\tilde{u}_{cd} - \bar{w}_{cd}) + \Delta t \phi_i^\dagger \sum_{d \in \mathcal{V}(c)} |\Gamma_{cd}| r_{cd}^n \bar{u}_{cd},$$

avec r_c^n le rayon de la cellule c au temps t^n et r_{cd}^n le rayon de la face cd au temps t^n .

Annexe C

Conditions de positivité

Nous allons ici détailler la preuve de la [Prop. 16](#) énoncée dans le [Chapitre 6](#). Celle-ci donne des conditions exactes sur les pentes du solveur de Riemann unidimensionnel afin de garantir la positivité du schéma numérique.

C.1 Conditions de positivité des états intermédiaires gauches

Tout d'abord, nous verrons les conditions de positivité de l'état intermédiaire gauche. Nous avons

$$\begin{aligned} \vartheta_l^* &= \vartheta_l - \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z - r\lambda^- \Delta u}{(1+r)(\lambda^-)^2}, \\ y_l^* &= y_l, \\ u_l^* &= u_l - \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z - r\lambda^- \Delta u}{(1+r)\lambda^-}, \\ E_l^* &= E_l + \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z - r\lambda^- \Delta u}{(1+r)(\lambda^-)^2} (p_{1-\alpha} - \lambda^- u_\alpha), \\ z_l^* &= z_l, \end{aligned} \tag{C.1.0.1}$$

où $r = \lambda^+/\lambda^-$, $\alpha = \lambda^-/(\lambda^+ + \lambda^-)$ et la notation $x_\alpha = (1-\alpha)x_r + \alpha x_l$.

Positivité du volume spécifique

La première équation de [\(C.1.0.1\)](#) donne directement une équation du second degré en λ^-

$$(1+r)(\lambda^-)^2 \vartheta_l^* = (1+r)(\lambda^-)^2 \vartheta_l + r\lambda^- \Delta u - \Delta p + \bar{\kappa}\Delta z.$$

Puisque les pentes ainsi que le volume spécifique de l'état gauche sont positifs, nous concluons que le volume spécifique intermédiaire gauche est positif si le discriminant d_{ϑ_l} de l'équation précédente est négatif, ou si

$$\lambda^- \geq \frac{-r\Delta u + \sqrt{d_{\vartheta_l}}}{2(1+r)\vartheta_l}.$$

Positivité de l'énergie interne

En combinant les troisième et quatrième équations de (C.1.0.1), on obtient $\varepsilon_l^* = E_l^* - u_l^*/2$ soit

$$\varepsilon_l^* = \varepsilon_l + \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z - r\lambda^- \Delta u}{2(1+r)^2(\lambda^-)^2} (\Pi_l - r\lambda^- \Delta u),$$

ce qui donne

$$2(1+r)^2(\lambda^-)^2 \varepsilon_l^* = (2(1+r)^2 \varepsilon_l + r^2 \Delta u^2) (\lambda^-)^2 - r\Delta u (\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z + \Pi_l) \lambda^- + \Pi_l (\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z),$$

avec $\Pi_l = 2(p_r + rp_l) - \Delta p + \bar{\kappa}\Delta z$. Avec les mêmes arguments que précédemment, nous déduisons les conditions de positivité de l'énergie interne de l'état intermédiaire gauche.

Positivité de la vitesse du son

Pour un mélange de deux gaz raides, la vitesse du son est donnée par

$$c^2 = \vartheta \frac{p + \pi}{\gamma - 1}.$$

Ainsi, la positivité de $p + \pi$ assure la positivité de la vitesse du son. La pression est donnée par l'équation d'état

$$p = \rho\varepsilon(\gamma - 1) - \gamma\pi,$$

soit

$$\vartheta(p + \pi) = (\varepsilon - \vartheta\pi)(\gamma - 1).$$

Ainsi, déterminer les conditions de positivité de la vitesse du son revient à trouver ces conditions sur $\hat{\varepsilon} = \varepsilon - \vartheta\pi$. D'après la dernière équation de (C.1.0.1), les paramètres de mélange pour l'état intermédiaire gauche γ_l^* et π_l^* sont γ_l et π_l . Cela permet d'écrire

$$\hat{\varepsilon}_l^* = \hat{\varepsilon}_l + \frac{(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z - r\lambda^- \Delta u) (\Pi_l - r\lambda^- \Delta u)}{2(1+r)^2(\lambda^-)^2} + \pi_l \frac{\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z - r\lambda^- \Delta u}{(1+r)(\lambda^-)^2}.$$

Les mêmes arguments permettent de déduire une condition de positivité sur la vitesse du son.

C.2 Conditions de positivité des états intermédiaires droits

De la même manière que pour l'état gauche, avec les mêmes notations, nous avons

$$\begin{aligned} \vartheta_r^* &= \vartheta_r + \frac{r(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z) + \lambda^+ \Delta u}{(1+r)(\lambda^+)^2}, \\ y_r^* &= y_r, \\ u_r^* &= u_r - \frac{r(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z) + \lambda^+ \Delta u}{(1+r)\lambda^+}, \\ E_r^* &= E_r - \frac{r(\Delta p - \bar{\kappa}\Delta z) + \lambda^+ \Delta u}{(1+r)(\lambda^+)^2} (p_{1-\alpha} + \lambda^+ u_\alpha), \\ z_r^* &= z_r. \end{aligned} \tag{C.2.0.1}$$

Positivité du volume spécifique

La première équation de (C.2.0.1) donne

$$(1+r)(\lambda^+)^2 \vartheta_r^* = (1+r)(\lambda^+)^2 \vartheta_r + \lambda^+ \Delta u + r(\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z),$$

ce qui permet encore de se ramener à une équation du second degré et de déterminer des conditions de positivité en fonction du discriminant.

Positivité de l'énergie interne

Des troisième et quatrième équations de (C.2.0.1), on déduit l'énergie interne de l'état intermédiaire droit

$$\varepsilon_r^* = \varepsilon_r - \frac{r(\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z) + \lambda^+ \Delta u}{2(1+r)^2(\lambda^+)^2} (\Pi_r - \lambda^+ \Delta u),$$

donc

$$2(1+r)^2(\lambda^+)^2 \varepsilon_r^* = (2(1+r)^2 \varepsilon_r + \Delta u^2) (\lambda^+)^2 - \lambda^+ \Delta u (\Pi_r - r(\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z)) - r \Pi_r (\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z), \quad (\text{C.2.0.2})$$

avec $\Pi_r = 2(p_r + r p_l) + r(\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z)$.

Positivité de la vitesse du son

De la même manière, nous recherchons des conditions sur $\hat{\varepsilon}_r^* = \varepsilon_r^* - \vartheta_r^* \pi_r$. En combinant (C.2.0.2) et la première équation de (C.2.0.1), nous avons

$$\hat{\varepsilon}_r^* = \hat{\varepsilon}_r - \frac{(r(\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z) + \lambda^+ \Delta u) (\Pi_r - \lambda^+ \Delta u)}{2(1+r)^2(\lambda^+)^2} - \pi_r \frac{r(\Delta p - \bar{\kappa} \Delta z) + \lambda^+ \Delta u}{(1+r)(\lambda^+)^2}.$$

Les mêmes arguments que précédemment permettent de conclure.

Bibliographie

Bibliographie

- [AAKM⁺23] K. Ait-Ameur, S. Kokh, M. Massot, M. Pelanti, and T. Pichard. An acoustic-transport splitting method for the barotropic Baer-Nunziato two-phase flow model. *ESAIM : ProcS*, 72 :93–116, 2023. (Cité page [80](#))
- [AB04] E. Audusse and M.-O. Bristeau. A 2d Well-balanced Positivity Preserving Second Order Scheme for Shallow Water Flows on Unstructured Meshes. Research Report RR-5260, INRIA, 2004. (Cité page [160](#))
- [ABB⁺04] E. Audusse, F. Bouchut, M.-O. Bristeau, R. Klein, and B. Perthame. A Fast and Stable Well-Balanced Scheme with Hydrostatic Reconstruction for Shallow Water Flows. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(6) :2050–2065, 2004. (Cité page [160](#))
- [Abg94] R. Abgrall. On Essentially Non-oscillatory Schemes on Unstructured Meshes : Analysis and Implementation. *J. Comput. Phys.*, 114(1) :45–58, 1994. (Cité page [138](#))
- [ACK02] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *J. Comput. Phys.*, 181 :577–616, 2002. (Cité pages [24](#), [32](#), [33](#), [34](#), [45](#), [46](#), [48](#), [50](#), [54](#), [57](#), [79](#), et [213](#))
- [ACR12] A. Ambroso, C. Chalons, and P.-A. Raviart. A godunov-type method for the seven-equation model of compressible two-phase flow. *Computers & Fluids*, 54 :67–91, 2012. (Cité page [117](#))
- [AK10] R. Abgrall and S. Karni. A comment on the computation of non-conservative products. *J. Comput. Phys.*, 229(8) :2759–2763, 2010. (Cité pages [94](#) et [95](#))
- [AMW98] D. M. Anderson, G. B. McFadden, and A. A. Wheeler. Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1) :139–165, 1998. (Cité page [32](#))
- [AS03] R. Abgrall and R. Saurel. Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures. *J. Comput. Phys.*, 186(2) :361–396, 2003. (Cité page [33](#))
- [AS07] H. Ahn and M. Shashkov. Multi-material interface reconstruction on generalized polyhedral meshes. *J. Comput. Phys.*, 226 :2096–2132, 2007. (Cité page [32](#))
- [Bal10] D.S. Balsara. Multidimensional HLLC Riemann solver : Application to Euler and magnetohydrodynamic flows. *J. Comput. Phys.*, 229(6) :1970–1993, 2010. (Cité page [94](#))

- [Bar21] W. Barsukow. Truly multi-dimensional all-speed schemes for the Euler equations on Cartesian grids. *J. Comput. Phys.*, 435 :110216, 2021. (Cité page 135)
- [BC10] Th. Buffard and S. Clain. Monoslope and multislope MUSCL methods for unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 229(10) :3745–3776, 2010. (Cité page 143)
- [Ben92] D.J. Benson. Computational methods in lagrangian and eulerian hydrocodes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 99(2) :235–394, 1992. (Cité page 80)
- [BH05] Th. Barberon and Ph. Helluy. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers & Fluids*, 34(7) :832–858, 2005. (Cité page 34)
- [BHO17] T. Barth, R. Herbin, and M. Ohlberger. *Finite Volume Methods : Foundation and Analysis*, pages 1–60. John Wiley & Sons, Ltd, 2017. (Cité pages 139, 142, 143, et 148)
- [BJ89] T. Barth and D. C. Jespersen. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. *AIAA Paper 89-0366*, 1989. (Cité pages 144 et 151)
- [BKZ92] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100, 1992. (Cité pages 24, 34, 38, 79, 85, 128, et 213)
- [BL14] X. Blanc and E. Labourasse. A positive scheme for diffusion problems on deformed meshes. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 2014. (Cité page 77)
- [Bla15] Gh. Blanchard. *Modélisation et simulation multi-échelles de l’atomisation d’une nappe liquide cisailée*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse, 2015. (Cité pages 26, 32, 79, 138, 148, 150, 153, 154, 193, et 214)
- [BN86] M.R. Baer and J.W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *Int. J. Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986. (Cité pages 24, 32, 33, 95, et 213)
- [BN09] B. Braconnier and B. Nkonga. An all-speed relaxation scheme for interface flows with surface tension. *J. Comput. Phys.*, 228(16) :5722–5739, 2009. (Cité pages 34 et 79)
- [Bou04] F. Bouchut. *Nonlinear Stability of Finite Volume Methods for Hyperbolic Conservation Laws and Well-Balanced Schemes for Sources*, volume 2/2004 of *Frontiers in Mathematics*. Birkhäuser Basel, 2004. (Cité pages 46, 99, 103, et 159)
- [Bra07] B. Braconnier. *Modélisation numérique d’écoulements multiphasiques pour des fluides compressibles, non miscibles et soumis aux effets capillaires*. Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2007. (Cité pages 35, 93, et 94)
- [BTKP23] R. Bourgeois, P. Tremblin, D. Kokh, and T. Padioleau. An all-regime, well-balanced, positive and entropy satisfying one-step finite volume scheme for the Euler’s equations of gas dynamics with gravity. *Soumis à J. Comput. Phys.*, 2023. (Cité page 80)

-
- [Bur05] C. Burg. Higher Order Variable Extrapolation for Unstructured Finite Volume RANS Flow Solvers. *17th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, 2005. (Cité page [144](#))
- [CC17] C. Chalons and F. Coquel. A new comment on the computation of non-conservative products using Roe-type path conservative schemes. *J. Comput. Phys.*, 335 :592–604, 2017. (Cité pages [94](#) et [95](#))
- [CDL11] S. Clain, S. Diot, and R. Loubère. A high-order finite volume method for systems of conservation laws – Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD). *J. Comput. Phys.*, 230(10) :4028–4050, 2011. (Cité page [146](#))
- [CDX⁺20] L. Cheng, X. Deng, B. Xie, Y. Jiang, and F. Xiao. Discontinuity-resolving shock-capturing schemes on unstructured grids. *Computational Physics*, 2020. (Cité page [138](#))
- [CFK05] S.J. Cummins, M.M. Francois, and D.B. Kothe. Estimating curvature from volume fractions. *Computers & Structures*, 83(6) :425–434, 2005. Frontier of Multi-Phase Flow Analysis and Fluid-Structure. (Cité page [215](#))
- [CGHS02] F. Coquel, Th. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série I*, 334(10) :927–932, 2002. (Cité page [33](#))
- [CGK16] C. Chalons, M. Girardin, and S. Kokh. An All-Regime Lagrange-Projection Like Scheme for the Gas Dynamics Equations on Unstructured Meshes. *Comm. Comput. Phys.*, 20(1) :188–233, 2016. (Cité pages [25](#), [80](#), [83](#), [86](#), [89](#), [90](#), [91](#), [94](#), [129](#), [131](#), [132](#), et [214](#))
- [CGK17] C. Chalons, M. Girardin, and S. Kokh. An all-regime Lagrange-Projection like scheme for 2D homogeneous models for two-phase flows on unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 335 :885–904, 2017. (Cité pages [25](#), [80](#), [83](#), [86](#), [129](#), [131](#), [132](#), et [214](#))
- [CGLM21] A. Chan, G. Gallice, R. Loubère, and P.-H. Maire. Positivity preserving and entropy consistent approximate Riemann solvers dedicated to the high-order MOOD-based Finite Volume discretization of Lagrangian and Eulerian gas dynamics. *Computers & Fluids*, 229 :105056, 2021. (Cité pages [117](#) et [121](#))
- [CGP06] M.J. Castro, J.M. Gallardo, and C. Parés. High Order Finite Volume Schemes Based on Reconstruction of States for Solving Hyperbolic Systems with Nonconservative Products. Applications to Shallow-Water Systems. *Mathematics of Computation*, 75(255) :1103–1134, 2006. (Cité pages [94](#) et [95](#))
- [Cha04] Gh. Chantepedrix. *Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques à surface libre. Application à l'étude des mouvements de liquides dans les réservoirs de véhicules spatiaux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2004. (Cité pages [38](#) et [76](#))
- [Cha22] A. Chan. *Innovative numerical schemes for 3D supersonic aerodynamics on unstructure mesh*. Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2022. (Cité pages [94](#), [117](#), et [128](#))
-

- [CHL20] T. Corot, Ph. Hoch, and E. Labourasse. Surface tension for compressible fluids in ALE framework. *J. Comput. Phys.*, 407 :109247, 2020. (Cité pages [80](#), [94](#), [133](#), [134](#), [135](#), [190](#), et [191](#))
- [CKDBM19] P. Cordesse, S. Kokh, R. Di Battista, and M. Massot. Derivation of a two-phase flow model with two-scale kinematics and surface tension by means of variational calculus. In *10th International Conference on Multiphase Flow (ICMF 2019)*, Rio de Janeiro, Brazil, 2019. (Cité page [32](#))
- [CKKS16] C. Chalons, P. Kestener, S. Kokh, and M. Stauffert. A large time-step and well-balanced Lagrange-Projection type scheme for the shallow-water equations. *Communications in Mathematical Sciences*, 15, 2016. (Cité page [80](#))
- [CKMdL19] M.J. Castro, A. Kurganov, and T. Morales de Luna. Path-Conservative Central-Upwind Schemes for Nonconservative Hyperbolic Systems. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 53, 2019. (Cité page [94](#))
- [CL07] C.-H. Chang and M.-S. Liou. A robust and accurate approach to computing compressible multiphase flow : Stratified flow model and AUSM+-up scheme. *J. Comput. Phys.*, 225(1) :840–873, 2007. (Cité page [33](#))
- [CLMRP08] M.J. Castro, Ph.G. LeFloch, M.L. Muñoz-Ruiz, and C. Parés. Why many theories of shock waves are necessary : Convergence error in formally path-consistent schemes. *J. Comput. Phys.*, 227(17) :8107–8129, 2008. (Cité pages [94](#) et [95](#))
- [CM18] T. Corot and B. Mercier. A new nodal solver for the two dimensional lagrangian hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 353 :1–25, 2018. (Cité pages [25](#), [81](#), [84](#), [94](#), et [135](#))
- [Cor20] P. Cordesse. *Contribution to the study of combustion instabilities in cryotechnic rocket engines : coupling diffuse interface models with kinetic-based moment methods for primary atomization simulations*. Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2020. (Cité pages [32](#), [39](#), [50](#), [51](#), [190](#), et [191](#))
- [CS98] E.J. Caramana and M.J. Shashkov. Elimination of Artificial Grid Distortion and Hourglass-Type Motions by Means of Lagrangian Subzonal Masses and Pressures. *J. Comput. Phys.*, 142(2) :521–561, 1998. (Cité page [32](#))
- [CSN17] A. Chiapolino, R. Saurel, and B. Nkonga. Sharpening diffuse interfaces with compressible fluids on unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 340 :389–417, 2017. (Cité pages [26](#), [138](#), [153](#), [154](#), et [214](#))
- [CVV99] Y. Coudière, J.-P. Vila, and Ph. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM : M2AN*, 33(3) :493–516, 1999. (Cité page [77](#))
- [CVV02] Gh. Chantepedrix, Ph. Villedieu, and J.-P. Vila. A Compressible Model for Separated Two-Phase Flows Computations. In *Proceedings of the ASME 2002 Joint U.S.-European Fluids Engineering Division Conference*, volume 1 : Fora, Parts A and B of *Fluids Engineering Division Summer Meeting*, pages 809–816, 2002. (Cité page [32](#))

-
- [DCL12] S. Diot, S. Clain, and R. Loubère. Improved detection criteria for the Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD) on unstructured meshes with very high-order polynomials. *Computers & Fluids*, 64 :43–63, 2012. (Cité page [146](#))
- [Del10] S. Dellacherie. Analysis of Godunov type schemes applied to the compressible Euler system at low Mach number. *J. Comput. Phys.*, 229(4) :978–1016, 2010. (Cité pages [94](#) et [129](#))
- [Des10a] B. Després. *Lois de Conservations Eulériennes, Lagrangiennes et Méthodes Numériques*. Mathématiques et Applications. Springer Berlin, Heidelberg, 2010. (Cité page [80](#))
- [Des10b] B. Després. Weak consistency of the cell-centered Lagrangian GLACE scheme on general meshes in any dimension. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(41) :2669–2679, 2010. (Cité page [134](#))
- [DFM⁺21] F. De Vuyst, C. Fochesato, V. Mahy, R. Motte, and M. Peybernes. A geometrically accurate low-diffusive conservative interface capturing method suitable for multimaterial flows. *Computers & Fluids*, page 104897, 2021. (Cité pages [26](#), [138](#), [152](#), [153](#), [154](#), [155](#), et [214](#))
- [DGCC⁺23] A. Del Grosso, M.J. Castro, A. Chan, G. Gallice, R. Loubère, and P.-H. Maire. A Well-Balanced, Positive, Entropy-Stable, and Multi-Dimensional-Aware Finite Volume Scheme for 2d Shallow-Water Equations with Unstructured Grids. *Soumis à J. Comput. Phys.*, 2023. (Cité pages [25](#), [94](#), [97](#), et [117](#))
- [DHB⁺22] F. Denis, R. Hruschka, M. Bastide, B. Sauerwein, Y. Hoarau, and R. Mose. Experimental investigation of thermal ablation by melting in a hypersonic shock tunnel. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 59 :1–6, 2022. (Cité pages [26](#), [203](#), et [215](#))
- [DIX⁺18] X. Deng, S. Inaba, B. Xie, K.M. Shyue, and F. Xiao. High fidelity discontinuity-resolving reconstruction for compressible multiphase flows with moving interfaces. *J. Comput. Phys.*, 371 :945–966, 2018. (Cité page [138](#))
- [DJOR16] S. Dellacherie, J. Jung, P. Omnes, and P.-A. Raviart. Construction of modified Godunov-type schemes accurate at any Mach number for the compressible Euler system. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 26(13) :2525–2615, 2016. (Cité pages [83](#), [91](#), [94](#), et [129](#))
- [DL02] B. Després and F. Lagoutière. Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics. *J. Sci. Comput*, 16 :16–479, 2002. (Cité pages [137](#) et [142](#))
- [DM05] B. Després and C. Mazeran. Lagrangian Gas Dynamics in Two Dimensions and Lagrangian systems. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 178 :327–372, 2005. (Cité pages [25](#), [81](#), [84](#), [87](#), [91](#), [94](#), [104](#), [109](#), [125](#), et [135](#))
- [DMLM95] G. Dal Maso, Ph. LeFloch, and F. Murat. Definition and weak stability of nonconservative products. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 74 :483–548, 1995. (Cité pages [47](#), [94](#), et [95](#))
-

- [DO05] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume method for the laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *ESAIM : M2AN*, 39(6) :1203–1249, 2005. (Cité page [77](#))
- [DS07] H. Ding and D. M. Spelt. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion. *Physical Review E*, 2007. (Cité page [170](#))
- [EO81] B. Engquist and S. Osher. One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 36 :321–351, 1981. NR 20140805. (Cité page [112](#))
- [FAA20] N. Fleischmann, S. Adami, and N.A. Adams. A shock-stable modification of the HLLC Riemann solver with reduced numerical dissipation. *J. Comput. Phys.*, 423 :109762, 2020. (Cité pages [203](#) et [204](#))
- [FBC⁺11] M. Billaud Friess, B. Boutin, F. Caetano, G. Faccanoni, S. Kokh, F. Lagoutière, and L. Navoret. A second order anti-diffusive Lagrange-remap scheme for two-component flows. In *ESAIM : Proceedings*, volume 32, pages 149–162. EDP Sciences, 2011. (Cité page [176](#))
- [FL11] T. Flatten and H. Lund. Relaxation two-phase flow models and the subcharacteristic condition. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 21(12) :2379–2407, 2011. (Cité page [32](#))
- [FOF88] D.E. Fyfe, E.S. Oran, and M.J. Fritts. Surface tension and viscosity with lagrangian hydrodynamics on a triangular mesh. *J. Comput. Phys.*, 76(2) :349–384, 1988. (Cité page [191](#))
- [Gal00] G. Gallice. Schémas de type Godunov entropiques et positifs préservant les discontinuités de contact. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série I*, 331(2) :149–152, 2000. (Cité pages [25](#), [26](#), [81](#), [94](#), [112](#), [116](#), [117](#), [135](#), et [214](#))
- [Gal02a] G. Gallice. *Numerical Approximation of conservative or nonconservative non-linear hyperbolic systems*. Habilitation à diriger des recherches, Université de Bordeaux I, 2002. (Cité pages [26](#), [81](#), [94](#), [100](#), [102](#), [103](#), [112](#), [113](#), [114](#), [116](#), [135](#), et [214](#))
- [Gal02b] G. Gallice. Solveurs simples positifs et entropiques pour les systèmes hyperboliques avec terme source. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série I*, 334(8) :713–716, 2002. (Cité pages [94](#), [102](#), [112](#), [114](#), [117](#), et [135](#))
- [Gal03] G. Gallice. Positive and entropy stable Godunov-type schemes for gas dynamics and MHD equations in Lagrangian or Eulerian coordinates. *Numerische Mathematik*, 94 :673–713, 2003. (Cité pages [25](#), [26](#), [80](#), [81](#), [94](#), [112](#), [116](#), [117](#), [120](#), [122](#), [135](#), et [214](#))
- [Gal23] G. Gallice. Entropy stable and positivity preserving Godunov-type schemes for multidimensional hyperbolic systems with source terms on unstructured grid. *A paraître sous HAL*, 2023. (Cité pages [25](#), [26](#), [94](#), [97](#), [117](#), et [214](#))
- [Gan80] W. Gander. Algorithms for the QR-Decomposition. Tech. Rep. 90-02, Eidgenössische Technische Hochschule, 1980. (Cité page [221](#))

-
- [GCLM22] G. Gallice, A. Chan, R. Loubère, and P.-H. Maire. Entropy stable and positivity preserving godunov-type schemes for multidimensional hyperbolic systems on unstructured grid. *J. Comput. Phys.*, 468 :111493, 2022. (Cité pages [25](#), [26](#), [81](#), [94](#), [97](#), [104](#), [109](#), [117](#), [125](#), [127](#), [135](#), [196](#), [203](#), et [214](#))
- [GGS82] U. Ghia, K.N. Ghia, and C.T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *J. Comput. Phys.*, 48(3) :387–411, 1982. (Cité page [186](#))
- [GHS04] Th. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical modelling of two-phase flow using the two-fluid two-pressure approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14 :663–700, 2004. (Cité page [33](#))
- [GL85] J.B. Goodman and R.J. LeVeque. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Mathematics of Computation*, 45(171) :15–21, 1985. (Cité page [146](#))
- [GLN⁺99] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. *J. Comput. Phys.*, 1999. (Cité pages [24](#), [34](#), [38](#), [79](#), [90](#), et [213](#))
- [GM04] H. Guillard and A. Murrone. On the behavior of upwind schemes in the low Mach number limit : II. Godunov type schemes. *Computers & Fluids*, 33(4) :655–675, 2004. (Cité pages [94](#) et [129](#))
- [God59] S. K. Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Mat. Sbornik. Novaya Seriya*, 47 :271–306, 1959. (Cité pages [55](#), [138](#), et [140](#))
- [GOR17] D. P. Garrick, M. Owkes, and J. D. Regele. A finite-volume HLLC-based scheme for compressible interfacial flows with surface tension. *J. Comput. Phys.*, 339 :46–67, 2017. (Cité pages [93](#) et [94](#))
- [GR21] E. Godlewski and P.-A. Raviart. *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, volume 118 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer New York, 2021. (Cité page [46](#))
- [GV99] H. Guillard and C. Viozat. On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit. *Computers & Fluids*, 28(1) :63–86, 1999. (Cité pages [94](#) et [129](#))
- [GVV13] N. Grenier, J.-P. Vila, and Ph. Villedieu. An accurate low-Mach scheme for a compressible two-fluid model applied to free-surface flows. *J. Comput. Phys.*, 252 :1–19, 2013. (Cité page [32](#))
- [Har83] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 49(3) :357–393, 1983. (Cité pages [96](#) et [140](#))
- [HC89] D. Holmes and S. Connell. Solution of the 2D Navier-Stokes equations on unstructured adaptive grids. In *9th Computational Fluid Dynamics Conference*, 1989. (Cité page [146](#))
-

- [HEOC87] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, and S.R. Chakravarthy. Uniformly High Order Accurate Essentially Non-oscillatory Schemes, III. *J. Comp Phys.*, 71(2) :231–303, 1987. (Cité page [138](#))
- [Hir07] Charles Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows, The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, volume Vol. 2. Butterworth-Heinemann, 2007. (Cité pages [139](#) et [142](#))
- [HJ14] Ph. Helluy and J. Jung. Two-fluid compressible simulations on GPU cluster. *ESAIM : Proceedings and Surveys*, pages 349 – 358, 2014. (Cité page [137](#))
- [HLvL83] A. Harten, P. Lax, and B. van Leer. On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Rev*, 25 :35–61, 1983. (Cité pages [81](#), [100](#), [101](#), [110](#), et [112](#))
- [HN81] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39(1) :201–225, 1981. (Cité page [32](#))
- [HRC⁺20] D. Hebert, J.-L. Rullier, J.-M. Chevalier, I. Bertron, E. Lescoute, F. Virot, and H. El-Rabii. Investigation of mechanisms leading to water drop breakup at mach 4.4 and weber numbers above 10^5 . *SN Applied Sciences*, 2 :69, 2020. (Cité pages [179](#), [182](#), et [184](#))
- [Jai22] S.S. Jain. Accurate conservative phase-field method for simulation of two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 469 :111529, 2022. (Cité page [215](#))
- [Jun13] J. Jung. *Schémas numériques adaptés aux accélérateurs multicœurs pour les écoulements bifluide*. Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, 2013. (Cité page [176](#))
- [KK05] K.H. Kim and C. Kim. Accurate, efficient and monotonic numerical methods for multi-dimensional compressible flows : Part II : Multi-dimensional limiting process. *J. Comput. Phys.*, 208(2) :570–615, 2005. (Cité page [152](#))
- [KK10] J.J. Kreeft and B. Koren. A new formulation of Kapila’s five-equation model for compressible two-fluid flow, and its numerical treatment. *J. Comput. Phys.*, 229(18) :6220–6242, 2010. (Cité pages [32](#) et [33](#))
- [KL10] S. Kokh and F. Lagoutière. An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of five-equation model. *J. Comput. Phys.*, 229 :2773–2809, 2010. (Cité pages [46](#), [79](#), [80](#), [137](#), [142](#), et [176](#))
- [KMB⁺01] A.K. Kapila, R. Menikoff, J.B. Bdzil, S.F. Son, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations. *Phys. Fluids*, 13(10) :3002–3024, 2001. (Cité pages [32](#), [33](#), [34](#), [54](#), [79](#), et [95](#))
- [Kol72] V.P. Kolgan. Application of the minimum-derivative principle in the construction of finite-difference schemes for numerical analysis of discontinuous solutions in gas dynamics. *Uchenye Zapiski TsaGI [Sci. Notes Central Inst. Aerodyn]*, 3(6) :68–77, 1972. (Cité pages [26](#) et [139](#))

-
- [Kol11] V.P. Kolgan. Application of the principle of minimizing the derivative to the construction of finite-difference schemes for computing discontinuous solutions of gas dynamics. *J. Comput. Phys.*, 230 :2384–2390, 2011. (Cité pages 26 et 139)
- [Lab19] E. Labourasse. A low-Mach correction for multi-dimensional finite volume shock capturing schemes with application in lagrangian frame. *Comput. Fluids*, 179 :372–393, 2019. (Cité pages 84, 91, 133, 134, et 135)
- [Lag00] F. Lagoutière. *Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides à plusieurs constituants*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2000. (Cité page 142)
- [Lat13] M. Latige. *Simulation numérique de l'ablation liquide*. Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2013. (Cité pages 19, 34, 43, 54, 59, 79, 80, 179, 213, et 215)
- [Lau04] B. Laud. Tutorial of ablative TPS. NASA Ames Conference Center, Moffett Field, California USA, 2004. (Cité page 20)
- [LCM10] J. Lachaud, I. Cozmuta, and N.N. Mansour. Multiscale Approach to Ablation Modeling of Phenolic Impregnated Carbon Ablators. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 47(6) :910–921, 2010. (Cité page 21)
- [LeV98] R.J. LeVeque. Balancing Source Terms and Flux Gradients in High-Resolution Godunov Methods : The Quasi-Steady Wave-Propagation Algorithm. *J. Comput. Phys.*, 146(1) :346–365, 1998. (Cité page 158)
- [LF96] M. Lesoinne and C. Farhat. Geometric conservation laws for flow problems with moving boundaries and deformable meshes, and their impact on aeroelastic computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 134(1) :71–90, 1996. (Cité page 71)
- [LL21] X. Lei and J. Li. A staggered-projection Godunov-type method for the Baer-Nunziato two-phase model. *J. Comput. Phys.*, 437 :110312, 2021. (Cité page 33)
- [LMG15] C. Le Touze, A. Murrone, and H. Guillard. Multislope MUSCL method for general unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 284 :389–418, 2015. (Cité pages 143 et 144)
- [LMSN14] S. Le Martelot, R. Saurel, and B. Nkonga. Towards the direct numerical simulation of nucleate boiling flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 66 :62–78, 2014. (Cité pages 34 et 79)
- [LOC94] X.-D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *J. Comput. Phys.*, 115(1) :200–212, 1994. (Cité page 138)
- [LP09] Ch. Le Potier. A nonlinear finite volume scheme satisfying maximum and minimum principles for diffusion operators. *International Journal on Finite Volumes*, pages 1–20, 2009. (Cité page 77)
-

- [LTR22] C. Le Touze and N. Rutard. Numerical methods for diffuse interface multifluid models. In *ECCOMAS 2022 - 8th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, Oslo, Norway, 2022. (Cité pages [179](#) et [184](#))
- [Lun12] H. Lund. A hierarchy of relaxation models for two-phase flow. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 72(6) :1713–1741, 2012. (Cité page [32](#))
- [MABO07] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, and J. Ovadia. A cell-centered lagrangian scheme for two-dimensional compressible flow problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 29(4) :1781–1824, 2007. (Cité pages [25](#), [81](#), [84](#), [87](#), [91](#), [94](#), [104](#), [109](#), [125](#), [126](#), et [135](#))
- [Mas09] K. Masatsuka. *I do like CFD, VOL.1, Second Edition*. K. Masatsuka, 2009. (Cité page [184](#))
- [MB12] P.-H. Maire and J. Breil. A nominally second-order accurate finite volume cell-centered scheme for anisotropic diffusion on two-dimensional unstructured grids. *J. Comput. Phys.*, 231(5) :2259–2299, 2012. (Cité page [77](#))
- [Men16] R. Menikoff. Complete Mie-Grüneisen Equation of State (update). Tech. rep., Los Alamos National Lab. (LANL), Los Alamos, NM (United States), 2016. (Cité page [43](#))
- [MG05] A. Murrone and H. Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *J. Comput. Phys.*, 202(2) :664 – 698, 2005. (Cité pages [32](#), [50](#), et [54](#))
- [MOG07] K. Michalak and C. Ollivier-Gooch. Matrix-explicit gmres for a higher-order accurate inviscid compressible flow solver. *18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, 2007. (Cité page [167](#))
- [MOG09] C. Michalak and C. Ollivier-Gooch. Accuracy preserving limiter for the high-order accurate solution of the euler equations. *J. Comput. Phys.*, 228(23) :8693–8711, 2009. (Cité pages [146](#), [154](#), [167](#), et [168](#))
- [MP89] R. Menikoff and B.J. Plohr. The Riemann problem for fluid flow of real materials. *Rev. Mod. Phys.*, 61 :75–130, 1989. (Cité page [39](#))
- [MSNA02] J. Massoni, R. Saurel, B. Nkonga, and R. Abgrall. Proposition de méthodes et modèles Eulériens pour les problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur : Some models and Eulerian methods for interface problems between compressible fluids with heat transfer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 45(6) :1287–1307, 2002. (Cité pages [24](#), [32](#), [33](#), [34](#), [57](#), [79](#), et [213](#))
- [ND15] T.N. Nguyen and M. Dumbser. A path-conservative finite volume scheme for compressible multi-phase flows with surface tension. *Applied Mathematics and Computation*, 271 :959–978, 2015. (Cité pages [93](#), [94](#), [190](#), et [191](#))
- [ND22] H. Nishikawa and B. Diskin. Arithmetic Averages of Viscosity Coefficient are Sufficient for Second-Order Finite-Volume Viscous Discretization on Unstructured Grids, 2022. (Cité page [84](#))

-
- [Nis20] H. Nishikawa. On the loss and recovery of second-order accuracy with U-MUSCL. *J. Comput. Phys.*, 417 :109600, 2020. (Cité pages 144 et 145)
- [Nis21a] H. Nishikawa. On False Accuracy Verification of UMUSCL Scheme. *Communications in Computational Physics*, 30(4) :1037–1060, 2021. (Cité pages 145 et 184)
- [Nis21b] H. Nishikawa. Weighted Least-Squares Gradients for Non-Uniform Grid in One Dimension, 2021. (Cité page 221)
- [Nis22] H. Nishikawa. New Unstructured-Grid Limiter Functions. *AIAA SCITECH 2022 Forum*, 2022. (Cité page 154)
- [NW20] H. Nishikawa and J.A. White. An efficient cell-centered finite-volume method with face-averaged nodal-gradients for triangular grids. *J. Comput. Phys.*, 411 :109423, 2020. (Cité page 146)
- [OS88] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79(1) :12–49, 1988. (Cité page 32)
- [Par06] C. Parés. Numerical methods for nonconservative hyperbolic systems : a theoretical framework. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 44(1) :300–321, 2006. (Cité pages 94 et 95)
- [PBM23] A. Panchal, S.H. Bryngelson, and S. Menon. A seven-equation diffused interface method for resolved multiphase flows. *J. Comput. Phys.*, 475 :111870, 2023. (Cité pages 33, 190, et 191)
- [PdPD23] A. Plessier, S. del Pino, and B. Després. Implicit discretization of Lagrangian gas dynamics. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 57(2) :717–743, 2023. (Cité page 123)
- [Pel17] S. Peluchon. *Approximation numérique et modélisation de l’ablation liquide*. Thèse de doctorat, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2017. (Cité pages 56, 57, 117, 179, 203, et 213)
- [PGM17] S. Peluchon, G. Gallice, and L. Mieussens. A robust implicit–explicit acoustic-transport splitting scheme for two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 339 :328–355, 2017. (Cité pages 25, 79, 80, 81, 83, 86, 91, 119, 122, 123, 129, 176, 196, et 203)
- [PGM21] S. Peluchon, G. Gallice, and L. Mieussens. Development of numerical methods to simulate the melting of a thermal protection system. *J. Comput. Phys.*, page 110753, 2021. (Cité pages 25, 35, 36, 71, 79, 80, 81, 83, 84, 86, 129, et 142)
- [PN22] E. Padway and H. Nishikawa. Resolving Confusions over Third-Order Accuracy of Unstructured MUSCL. *AIAA Journal*, 60(3) :1415–1439, 2022. (Cité page 145)
- [Pro81] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Phys. Fluids*, 1981. (Cité page 193)
-

- [PS05] G. Périgaud and R. Saurel. A compressible flow model with capillary effects. *J. Comput. Phys.*, 209(1) :139–178, 2005. (Cité pages [34](#), [38](#), [50](#), [51](#), [53](#), [54](#), [79](#), [84](#), [90](#), [93](#), [94](#), [190](#), et [191](#))
- [PYK10] J.S. Park, S.-H. Yoon, and C. Kim. Multi-dimensional limiting process for hyperbolic conservation laws on unstructured grids. *J. Comput. Phys.*, 229(3) :788–812, 2010. (Cité page [152](#))
- [PZ99] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1999. (Cité pages [193](#) et [194](#))
- [Pé03] G. Périgaud. *Elaboration et résolution de modèles d'écoulements compressibles à interfaces en présence de capillarité et de viscosité*. Thèse de doctorat, Université Provence (Aix-Marseille 1), 2003. (Cité pages [35](#), [56](#), et [79](#))
- [QCM106] L. Qian, D.M. Causon, C.G. Mingham, and D. Ingram. A free-surface capturing method for two fluid flows with moving bodies. *Proc. R. Soc. A.*, 462 :21–42, 2006. (Cité pages [138](#), [153](#), et [214](#))
- [RA15] M.G. Rodio and R. Abgrall. An innovative phase transition modeling for reproducing cavitation through a five-equation model and theoretical generalization to six and seven-equation models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 89 :1386–1401, 2015. (Cité page [34](#))
- [Ray79] L. Rayleigh. On the capillary phenomena of jets. *Proceedings of the Royal Society of London*, 29(196-199) :71–97, 1879. (Cité page [191](#))
- [RBY91] R. Rausch, J. Batina, and H. Yang. Spatial adaption procedures on unstructured meshes for accurate unsteady aerodynamic flow computation. *AIAA Paper*, 91-1106, 1991. (Cité page [146](#))
- [Rie11] F. Rieper. A low-Mach number fix for Roe's approximate Riemann solver. *J. Comput. Phys.*, 230(13) :5263–5287, 2011. (Cité pages [94](#) et [129](#))
- [RK98] W.J. Rider and D.B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *J. Comput. Phys.*, 141 :112–152, 1998. (Cité page [175](#))
- [Roe81] P.L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 43(2) :357–372, 1981. (Cité pages [81](#) et [112](#))
- [SA99a] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *J. Comput. Phys.*, 150(2) :425–467, 1999. (Cité pages [33](#) et [176](#))
- [SA99b] R. Saurel and R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21 (3) :1115–1145, 1999. (Cité page [32](#))
- [Shu88] C.-W. Shu. Total-Variation-Diminishing Time Discretizations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(6) :1073–1084, 1988. (Cité page [155](#))

-
- [SIX16] Z. Sun, S. Inaba, and F. Xiao. Boundary variation diminishing (BVD) reconstruction : A new approach to improve Godunov schemes. *J. Comput. Phys.*, 322 :309–325, 2016. (Cité page [138](#))
- [SO88] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J. Comput. Phys.*, 77(2) :439–471, 1988. (Cité pages [138](#) et [155](#))
- [SPA08] R. Saurel, F. Petitpas, and R. Abgrall. Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607 :313–350, 2008. (Cité pages [34](#) et [79](#))
- [SPB09] R. Saurel, F. Petitpas, and R.A. Berry. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures. *J. Comput. Phys.*, 228(5) :1678–1712, 2009. (Cité pages [24](#) et [33](#))
- [SPD⁺17] K. Schmidmayer, F. Petitpas, E. Daniel, N. Favrie, and S. Gavrilyuk. A model and numerical method for compressible flows with capillary effects. *J. Comput. Phys.*, 2017. (Cité pages [39](#), [50](#), [51](#), [53](#), [79](#), [84](#), et [90](#))
- [Spe87] S. Spekreijse. Multigrid Solution of Monotone Second-Order Discretizations of Hyperbolic Conservation Laws. *Mathematics of Computation*, 49(179) :135–155, 1987. (Cité pages [146](#) et [151](#))
- [Ste96] C. Steger. On the calculation of arbitrary moments of polygons. Technical report, Technical University Munich, 1996. (Cité page [220](#))
- [SVD⁺17] A. Syrakos, S. Varchanis, Y. Dimakopoulos, A. Goulas, and J. Tsamopoulos. A critical analysis of some popular methods for the discretisation of the gradient operator in finite volume methods. *Phys. Fluids*, 29(12) :127103, 2017. (Cité pages [146](#) et [221](#))
- [Swe84] P.K. Sweby. High resolution schemes using limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal in Numerical Analysis*, 21 :995–1011, 1984. (Cité page [141](#))
- [SX14] K. Shyue and F. Xiao. An Eulerian interface sharpening algorithm for compressible two-phase flow : The algebraic THINC approach. *J. Comput. Phys.*, 268 :326–354, 2014. (Cité page [137](#))
- [SYY14] Z. Shen, W. Yan, and G. Yuan. A robust and contact resolving Riemann solver on unstructured mesh, Part I, Euler method. *J. Comput. Phys.*, 268 :432–455, 2014. (Cité page [94](#))
- [THR⁺20] G. Tymen, D. Hebert, J.-L Rullier, T. Bridel-Bertomeu, I. Bertron, S. Peluchon, E. Lescoute, and F. Virot. Numerical investigation of the interactions between a low-hypersonic shock wave and a water droplet : VOF and DI methods comparison. *International Journal of Computational Methods and Experimental Measurements*, 8 :341–354, 2020. (Cité pages [179](#) et [184](#))
- [Tor97] E.F. Toro. *Riemann solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1997. (Cité pages [112](#), [138](#), [139](#), et [142](#))
-

- [Tou92] I. Toumi. A weak formulation of Roe’s approximate Riemann solver. *J. Comput. Phys.*, 102(2) :360–373, 1992. (Cité pages [94](#) et [95](#))
- [TPV22] L. Tallois, S. Peluchon, and Ph. Villedieu. A second-order extension of a robust implicit–explicit acoustic-transport splitting scheme for two-phase flows. *Computers & Fluids*, 244 :105531, 2022. (Cité pages [27](#), [153](#), et [157](#))
- [Tso18] P. Tsoutsanis. Extended bounds limiter for high-order finite-volume schemes on unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 362 :69–94, 2018. (Cité page [146](#))
- [TSS94] E.F. Toro, M. Spruce, and W. Speares. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves*, 4(1) :25 – 34, 1994. (Cité pages [81](#), [94](#), et [112](#))
- [TT10] S.A. Tokareva and E.F. Toro. HLLC-type Riemann solver for the Baer–Nunziato equations of compressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 229(10) :3573–3604, 2010. (Cité page [33](#))
- [Tur87] E. Turkel. Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. *J. Comput. Phys.*, 72(2) :277–298, 1987. (Cité page [129](#))
- [Tur93] E. Turkel. Review of preconditioning methods for fluid dynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 12(1) :257–284, 1993. (Cité page [129](#))
- [Ven95] V. Venkatakrishnan. Convergence to Steady State Solutions of the Euler Equations on Unstructured Grids with Limiters. *J. Comput. Phys.*, 118(1) :120–130, 1995. (Cité page [154](#))
- [vL73] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme I. The quest of monotonicity. In Henri Cabannes and Roger Temam, editors, *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, pages 163–168, Berlin, Heidelberg, 1973. Springer Berlin Heidelberg. (Cité pages [26](#) et [139](#))
- [vL74] B. van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-order Scheme. *J. Comput. Phys.*, 14 :361–370, 1974. (Cité pages [26](#) et [139](#))
- [vL77a] B. van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme III. Upstream-centered Finite-difference Schemes for Ideal Compressible Flow. *J. Comput. Phys.*, 23 :263–275, 1977. (Cité pages [26](#) et [139](#))
- [vL77b] B. van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection. *J. Comput. Phys.*, 23 :276–299, 1977. (Cité pages [26](#) et [139](#))
- [vL79] B. van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A second-order sequel to Godunov’s method. *J. Comput. Phys.*, 32(1) :101–136, 1979. (Cité pages [26](#), [138](#), et [139](#))
- [VSM16] F. Vilar, C.W. Shu, and P.-H. Maire. Positivity-preserving cell-centered lagrangian schemes for multi-material compressible flows : From first-order to high-order. Part I : The one-dimensional case. *J. Comput. Phys.*, 2016. (Cité page [176](#))

- [VZ02] M. Velarde and R. Zeytounian. *Interfacial Phenomena and the Marangoni Effect*. Springer Vienna, 2002. (Cité pages [37](#) et [38](#))
- [XHK05] F. Xiao, Y. Honma, and T. Kono. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48 :1023 – 1040, 2005. (Cité page [137](#))
- [YZX⁺09] J. Yin, H. Zhang, X. Xiong, B. Huang, and J. Zuo. Ablation properties of carbon/carbon composites with tungsten carbide. *Applied Surface Science*, 255(9) :5036–5040, 2009. (Cité page [20](#))
- [ZAGT20] Z. Zou, E. Audit, N. Grenier, and C. Tenaud. An Accurate Sharp Interface Method for Two-Phase Compressible Flows at Low-Mach Regime. *Flow, Turbulence and Combustion*, 105, 2020. (Cité pages [25](#), [80](#), [93](#), [94](#), et [129](#))
- [Zal79] S.T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, 31(3) :335–362, 1979. (Cité page [174](#))
- [ZGK⁺21] Z. Zou, N. Grenier, S. Kokh, C. Tenaud, and E. Audit. Compressible solver for two-phase flows with sharp interface and capillary effects preserving accuracy in the low Mach regime. *J. Comput. Phys.*, 448 :110735, 2021. (Cité pages [25](#), [80](#), [94](#), et [129](#))