



HAL
open science

Simulation numérique des écoulements multiphasiques: de la théorie aux applications

Philippe Helluy

► **To cite this version:**

Philippe Helluy. Simulation numérique des écoulements multiphasiques: de la théorie aux applications. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université du Sud Toulon Var, 2005. tel-00657839

HAL Id: tel-00657839

<https://theses.hal.science/tel-00657839>

Submitted on 9 Jan 2012

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

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

Habilitation à Diriger des Recherches
"Simulation numérique des écoulements
multiphasiques : de la théorie aux applications."

Philippe HELLUY

6 janvier 2005

Table des matières

1	Introduction	3
1.1	Les Systèmes Hyperboliques de Lois de Conservation et leur approximation	3
1.2	Application aux écoulements multiphasiques	4
1.3	Quelques recettes pour une simulation réussie	5
2	Généralités	6
2.1	Modèles d'écoulements multifluides	7
2.2	Méthode des volumes finis	8
3	Précision du schéma de Godunov	12
3.1	Exemple	12
3.2	Montée en ordre MUSCL	13
3.3	Autres approches	20
3.4	Projections entropiques	20
3.5	Second order entropy diminishing scheme for the Euler equations	22
4	Instabilité numérique des discontinuités de contact	23
4.1	Exemple	23
4.2	Méthodes non-conservatives	24
4.3	Montée en ordre	28
4.4	Practical computation of axisymmetrical multifluid flows	32
5	Entropie et changement de phase	33
5.1	Thermodynamique d'un fluide simple	34
5.2	Mélanges	37
5.3	Exemple	42
5.4	Dépendance en CFL	43
5.5	Finite volume simulation of cavitating flows	47
6	Écoulements à faible Mach	48
6.1	Exemple	48
6.2	Résultats numériques	50
6.3	Modification de la loi d'état	53
7	Perspectives	53
8	Notice individuelle	62

1 Introduction

1.1 Les Systèmes Hyperboliques de Lois de Conservation et leur approximation

Les Systèmes Hyperboliques de Lois de Conservation (SHLC) permettent de modéliser de nombreux phénomènes physiques. Voici une liste, non exhaustive, de quelques domaines d'application :

- mécanique des fluides : écoulements de gaz inertes ou réactifs, écoulements multiphasiques, équations des eaux peu profondes ;
- acoustique : propagation d'ondes dans les gaz, liquides ou solides, sismique ;
- électromagnétisme : discrétion RADAR, impulsion électromagnétique ;
- chimie : chromatographie ;
- physique des plasmas : tokamak, vent solaire, relativité générale ;
- autres : trafic automobile, *etc.*

Un modèle mathématique à base de SHLC repose en général sur deux principes :

- un principe de conservation de certaines quantités comme la masse, l'énergie, l'impulsion ;
- un principe de propagation à vitesse finie des perturbations ou d'hyperbolicité.

Mathématiquement, le principe de conservation se traduit par l'annulation de la divergence du flux des quantités conservées. La propagation à vitesse finie implique que la jacobienne du flux a des valeurs propres réelles, ces valeurs propres étant justement les vitesses de propagation.

Sur le plan théorique, l'étude mathématique du problème de Cauchy pour les SHLC est loin d'être aboutie. En dimension un d'espace, si la donnée initiale est constante par morceaux, le problème de Cauchy est appelé problème de Riemann. Son étude est alors nettement plus simple. Il admet en général plusieurs solutions. Pour que le problème de Riemann soit bien posé, il faut donc lui adjoindre un moyen de sélectionner une unique solution. Le critère de sélection peut se présenter sous diverses formes : croissance de l'entropie, critère caractéristique, *etc.*

Sur le plan pratique, il est important de disposer de méthodes numériques fiables pour le calcul des solutions sur ordinateur. L'une de ces méthodes, la méthode des volumes finis, est une technique efficace, robuste et élégante d'approximation des SHLC issues de la physique. Un schéma de volumes finis est caractérisé par son flux numérique. Dans la plupart des cas, le flux numérique permet de traduire, au niveau discret, le principe de conservation. Il est alors dit conservatif. D'autre part, pour la stabilité du schéma, le flux numérique doit tenir compte des directions et vitesses des perturbations. Il est alors dit décentré ou dissipatif.

Dans les années 50, Godunov a proposé un schéma de volumes finis dont le flux numérique repose sur la résolution exacte du problème de Riemann. La résolution du problème de Riemann peut s'avérer délicate, en terme de programmation et de temps de calcul. De

nombreux auteurs, à travers une vaste littérature, ont donc proposé des méthodes de résolution approchées du problème de Riemann. Les schémas résultants sont appelés schémas de type Godunov.

Les schémas de type Godunov se sont montrés très efficaces et utiles dans de nombreuses situations. Des codes de calcul commerciaux les utilisent. Cependant, à cause de la grande variété des applications possibles, certaines limitations ont fini par apparaître. Ainsi, dans certains cas, on observe : manque de précision, oscillations, convergence vers différentes solutions suivant les paramètres du calcul. Ce genre de phénomènes est très difficile à étudier à cause du manque de bases théoriques. Souvent, une astuce ou une compréhension partielle permet d'apporter un correctif satisfaisant au schéma d'origine. Cependant, il reste de nombreuses zones d'ombre. Le sujet reste donc passionnant et susceptible de découvertes. Avant de proposer un calcul fiable, le chercheur ou l'ingénieur doit faire preuve de la plus grande rigueur possible. Il ne doit pas hésiter à aborder la question sous tous les angles possibles : physique, mathématique, numérique et heuristique, puisque aucune théorie complète n'existe. Enfin, il doit faire preuve de la plus grande prudence dans l'interprétation des résultats et ne pas hésiter à valider le code final sur le plus grand nombre de cas test possibles, puis de comparer avec des résultats obtenus avec d'autres méthodes.

1.2 Application aux écoulements multiphasiques

J'ai commencé à travailler sur la simulation des écoulements multiphasiques compressibles en 1997, à l'occasion du démarrage de la thèse de Sandra ROUY dans le laboratoire MNC (Modélisation Numérique et Couplages). La Direction des Constructions Navales (DCN) de Toulon nous a proposé de travailler à la simulation des cinquante premières millisecondes du fonctionnement d'un générateur de gaz. Au sein de la chambre de refroidissement de ce générateur, on observe un écoulement violent d'air et d'eau. Les pressions sont de l'ordre de la centaine de fois la pression atmosphérique, les vitesses de l'ordre de cent mètres par seconde. Il était donc indispensable d'utiliser un modèle d'écoulement multifluide compressible. Le modèle que nous avons retenu pour la thèse, un des plus simples possibles, n'est pas très "exotique" puisqu'il est parfaitement conservatif et hyperbolique. Du point de vue théorique, l'étude du problème de Riemann ne présente pas de difficulté. On démontre sans peine l'existence et l'unicité d'une solution globale satisfaisant un critère de croissance de l'entropie. C'est au moment du passage au numérique que nous avons commencé à rencontrer des difficultés. Certaines de ces difficultés sont liées à la mise en oeuvre pratique d'une méthode numérique :

- nécessité d'utiliser des maillages très fins,
- prise en compte correcte des conditions aux limites,
- passage à une géométrie axisymétrique.

Mais d'autres difficultés sont de nature plus profonde :

- oscillations numériques de la pression au niveau de l'interface air-eau,
- apparition de pressions négatives (cavitation) dans certaines zones de l'écoulement.

Ensuite, à partir de 1999, en dirigeant la thèse de Thomas Barberon, je me suis intéressé au cas des écoulements multiphasiques avec changement de phase. L'application visée était la simulation du phénomène de cavitation. Là aussi, le modèle mathématique est relativement propre. Il suffit d'ajouter au modèle précédent un terme d'échange de masse entre les phases. Moyennant quelques précautions, il est possible de proposer des termes d'échange compatibles avec la physique, en terme d'entropie, et assurant un principe du maximum sur les fractions de masse. Cependant, quand ce terme source devient très grand, il est connu que le système limite peut admettre plusieurs solutions vérifiant le critère de croissance de l'entropie. Il faut donc être prudent dans l'élaboration des schémas numériques afin de capturer la solution correspond au critère de sélection choisi (en général, celle pour laquelle la production d'entropie est la plus grande).

Depuis quelques mois, j'ai commencé à m'intéresser au calcul des écoulements à faible Mach. En effet, dans de nombreuses applications, les écoulements à simuler présentent de grandes variations de vitesses. Lorsque la vitesse de la matière devient petite devant la vitesse du son, les schémas de type Godunov présentent une précision fortement dégradée. Il est là aussi indispensable d'apporter un correctif supplémentaire afin de réaliser une simulation fiable.

1.3 Quelques recettes pour une simulation réussie

Lorsqu'il s'agit de mettre en oeuvre le schéma de Godunov pour une simulation issue du monde réel, il est donc indispensable d'amener certains correctifs aux schémas usuels. Dans ce document, nous partons d'une telle situation : le calcul d'un écoulement compressible d'air et d'eau dans lequel l'eau est susceptible de subir une vaporisation sous l'effet de chutes locales de pression. Nous verrons de quelles limitations il faut s'affranchir avant d'obtenir un calcul fiable. Nous aborderons successivement :

1. Les défauts de précision du schéma de Godunov,
2. Les oscillations de pression dans le calcul des discontinuités de contact,
3. Les défauts d'unicité du problème de Riemann pour certaines lois de pression,
4. Les pertes de précision à faible Mach.

Les trois premiers points sont des domaines de recherche sur lesquels j'ai publié. Le dernier correspond à des travaux en cours. Trois articles traitant des trois premiers sujets sont reproduits dans la suite de ce mémoire. J'ai essayé d'adopter une présentation relativement autonome pour que ce document puisse être lu par des numériciens non-spécialistes des volumes finis.

Le plan de ce mémoire est alors le suivant :

À la suite de cette Introduction (Section 1), je propose quelques généralités sur la modélisation des écoulements multiphasiques et la méthode des volumes finis (Section 2).

La Section 3 est consacrée à la précision du schéma de Godunov et à des rappels sur la méthode MUSCL de van Leer. Dans cette méthode, un limiteur permet de réduire les oscillations des schémas d'ordre deux. Ce limiteur est basé sur un critère de variation totale

décroissante de la solution numérique (schéma TVD pour "Total Variation Diminishing"). Dans un travail avec Frédéric Coquel et Jacques Schneider, nous avons étudié la possibilité de remplacer le critère TVD par un critère d'entropie discrète. Un article sur ce sujet est proposé à la fin de la section.

La Section 4 est plus spécifique à l'étude numérique des écoulements multifiuides. Elle concerne le problème des oscillations non physiques de pression aux interfaces. Ces oscillations doivent être supprimées pour un calcul fiable. Le phénomène n'est pas encore bien compris mais il existe plusieurs astuces pour améliorer les résultats. La section se termine par un article écrit avec Thomas Barberon et Sandra Rouy. Nous y détaillons la mise en oeuvre pratique de ce genre de méthodes pour la simulation d'un écoulement d'air et d'eau dans la chambre de refroidissement d'un générateur de gaz.

La Section 5 est consacrée à l'étude du changement de phase. Je commence par des rappels sur le lien entre les lois de pression et la thermodynamique. Je propose ensuite une formalisation de la notion d'entropie d'équilibre en terme d'optimisation d'une entropie hors équilibre. Ce formalisme est intéressant car il permet de retrouver naturellement la loi de Dalton pour les mélanges de gaz ou la loi de pression isobare pour les mélanges de fluides immiscibles à petite échelle. Avec ce formalisme, l'entropie d'un mélange à l'équilibre se trouve être l'inf-convolution des entropies hors équilibre de chaque phase. Quelques expériences numériques permettent alors de mettre en évidence le phénomène de non-unicité des solutions entropiques. La section se termine par un article écrit avec Thomas Barberon sur la simulation d'écoulement cavitant par un schéma de relaxation.

Dans la Section 6, je présente quelques résultats numériques mettant en évidence les pertes de précision du schéma de Godunov à faible Mach, puis des applications au calcul du déferlement d'une vague. Il s'agit d'un travail en cours, en collaboration avec Frédéric Golay.

Dans la Section 7, je propose des perspectives de recherche.

La Section 8 est constituée d'un CV et d'une liste de travaux.

2 Généralités

Cette section est d'abord consacrée à la présentation d'un modèle simple d'écoulement multifiuide. Sa simplicité ne l'empêche pas d'être réaliste pour certains types d'écoulement. Il a ainsi été possible de simuler avec succès, au moyen de ce modèle, l'écoulement d'un mélange d'air et d'eau dans la chambre de refroidissement d'un générateur de gaz.

Le modèle proposé tombe dans la catégorie des Systèmes de Lois de Conservation Hyperboliques (SHLC). La méthode des volumes finis, que nous rappelons ensuite, est la technique la plus répandue pour approcher ce genre de système. Nous ne présentons ici que la méthode classique des volumes finis à l'ordre un. Nous verrons dans la suite du document les améliorations qu'il faut apporter à cette méthode élémentaire pour un calcul plus précis.

2.1 Modèles d'écoulements multifluides

Un écoulement multifluide est un écoulement où plusieurs fluides de caractéristiques physiques différentes sont en présence. Pour alléger les écritures, nous nous plaçons en deux dimensions d'espace (x, y) . Le temps est noté t . Le mélange des deux fluides est considéré comme un milieu continu dont on peut définir la masse volumique $\rho(x, y, t)$, les deux composantes de la vitesse $u(x, y, t)$, $v(x, y, t)$, l'énergie interne $\varepsilon(x, y, t)$ et la pression $p(x, y, t)$. Lorsque l'on néglige la viscosité du milieu, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie constituent les équations d'Euler qui s'écrivent

$$\begin{aligned}\rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y &= 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y &= 0, \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y &= 0, \\ (\rho E)_t + ((\rho E + p)u)_x + ((\rho E + p)v)_y &= 0,\end{aligned}\tag{1}$$

où l'énergie totale E est la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique

$$E = \varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2}.\tag{2}$$

Pour simplifier, nous supposons que seules deux phases (ou fluides) sont en présence. Pour fixer les idées, nous appellerons "gaz" la phase (a) et "liquide" la phase (b). Il faut donc ajouter une inconnue, notée $\varphi(x, y, t)$ permettant de repérer les phases. Selon les auteurs et les modélisations, cette fonction est appelée fonction level-set, fonction de couleur, fraction de masse, de volume, *etc.* Nous l'appellerons fraction de gaz. Par convention, si en un point (x, y, t) , le mélange des deux fluides est constitué uniquement de liquide, $\varphi(x, y, t) = 0$. Si le mélange est constitué uniquement de gaz, $\varphi(x, y, t) = 1$. La fonction fraction de gaz doit de plus satisfaire

$$\forall(x, y, t), \quad 0 \leq \varphi(x, y, t) \leq 1.\tag{3}$$

S'il n'y a pas de transfert entre les deux phases, la fraction est transportée à la vitesse commune des deux fluides, donc

$$\varphi_t + u\varphi_x + v\varphi_y = 0.\tag{4}$$

Un transfert, comme le changement de phases, est modélisé par un terme source

$$\varphi_t + u\varphi_x + v\varphi_y = \mu.\tag{5}$$

En combinant l'équation de convection (5) et l'équation de conservation de la masse, on obtient l'équation sous forme conservative

$$(\rho\varphi)_t + (\rho u\varphi)_x + (\rho v\varphi)_y = \rho\mu.\tag{6}$$

Afin de fermer le système d'équations, il faut fournir une loi de pression. Cette loi de pression sera de la forme

$$p = p_0(\rho, \varepsilon, \varphi).\tag{7}$$

Pour résumer, nous devons donc trouver 5 fonctions de l'espace et du temps, $\rho, u, v, \varepsilon, \varphi$ solutions du problème d'évolution

$$\begin{aligned}
\rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y &= 0, \\
(\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y &= 0, \\
(\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y &= 0, \\
(\rho E)_t + ((\rho E + p)u)_x + ((\rho E + p)v)_y &= 0, \\
(\rho \varphi)_t + (\rho u \varphi)_x + (\rho v \varphi)_y &= \rho \mu, \\
E &= \varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2}, \\
p &= p_0(\rho, \varepsilon, \varphi).
\end{aligned} \tag{8}$$

De plus, sans transfert de masse entre les phases, $\mu = 0$. En cas d'un transfert de masse, le terme source μ n'est plus nul et il faut alors lui donner une forme compatible avec la physique. Entre autres conditions, l'entropie doit croître et la fraction doit rester comprise entre 0 et 1.

Nous pouvons réécrire le système (8) sous la forme générale d'un système de lois de conservation

$$\begin{aligned}
w &= (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \varphi)^T, \\
f^1(w) &= (\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, \rho \varphi u)^T, \\
f^2(w) &= (\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, \rho \varphi v)^T, \\
s(w) &= (0, 0, 0, 0, \rho \mu)^T, \\
w_t + f^1(w)_x + f^2(w)_y &= s(w).
\end{aligned} \tag{9}$$

2.2 Méthode des volumes finis

Dans cette section, nous rappelons brièvement les grands principes de la méthode des volumes finis. Nous nous restreignons à son application aux SHLC. Ce rappel est indispensable, ne serait-ce que pour poser les notations.

Soit à résoudre, dans un domaine Ω de R^d ($d = 1, 2$ ou 3) le système de lois de conservation

$$w_t + \sum_{i=1}^d f^i(w)_{x_i} = 0, \quad t \in [0, T], \quad x \in \Omega, \tag{10}$$

où l'inconnue $w(t, x) \in R^m$ est un vecteur, appelé vecteur des variables conservatives, qui dépend du temps t et de l'espace $x = (x_1, \dots, x_d)$. Le flux $f = (f^1, \dots, f^d)$ est une application de R^m dans R^d . La notation w_{x_i} signifie $\partial w / \partial x_i$. Il est parfois commode, selon le contexte, de poser $x_0 = t$. En définissant $f^0(w) = w$, le flux devient alors une application de R^m dans R^{d+1} , et le système de lois de conservation peut s'écrire sous la forme d'une divergence spatio-temporelle

$$\sum_{i=0}^d f^i(w)_{x_i} = 0, \quad x \in [0, T] \times \Omega.$$

Au système (10), il faut adjoindre une condition initiale

$$w(0, x) = w_{\text{ini}}(x), \quad x \in \Omega, \quad (11)$$

et des conditions au bord du domaine Ω

$$w(t, x) = w_{\text{bord}}(x), \quad t \in [0, T], \quad x \in \partial\Omega. \quad (12)$$

Nous ne détaillons pas le sens de ces conditions au bord. En pratique, seule une partie du vecteur w_{bord} est utilisée pour le calcul de la solution. Voir à ce sujet les travaux de Dubois [38], [37] pour une théorie générale, et [11] pour un exemple d'application.

Pour des problèmes issus de la physique, le système (10) a la propriété d'être de plus hyperbolique pour un ensemble de variables conservatives admissibles.

Définition 1 *Le système (10) est dit hyperbolique sur $W_{ad} \subset R^m$, ssi pour tout $w \in W_{ad}$ et pour tout vecteur $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_d)$, la matrice $m \times m$*

$$A(w, \nu) := \sum_{i=1}^d f_w^i \nu_i, \quad (13)$$

a des valeurs propres réelles.

Il est bien connu que (10), (11), (12) admet en général une infinité de solutions faibles. La sélection d'une seule solution peut se faire au moyen de divers critères, dont certains sont détaillés plus bas.

Afin d'approcher les solutions du problème (10), (11), (12), la méthode des volumes finis consiste dans un premier temps à découper le domaine de calcul Ω en des ouverts C_k , $k \in I = \{1, \dots, N\}$, appelés cellules ou volumes finis, tels que

1. $\bigcup_{k \in I} \overline{C_k} = \overline{\Omega}$,
2. $\forall (k, l) \in I \times I, k \neq l \Rightarrow C_k \cap C_l = \emptyset$.

Le domaine temporel est découpé de même en une suite d'intervalles $]t_n, t_{n+1}[$ tels que $t_0 = 0, t_P = T, t_n < t_{n+1}$. Le pas de temps est noté $\tau_n = t_{n+1} - t_n$. Les solutions w de (10) sont approchées dans chaque cellule C_k et à chaque instant t_n par un vecteur constant

$$w_k^n \simeq w(t_n, x), \quad x \in C_k. \quad (14)$$

Ces inconnues satisfont la relation de récurrence

$$\int_{C_k} w_k^{n+1} = \int_{C_k} w_k^n - \tau_n \int_{\partial C_k} f(w_k^n, w_l^n, \nu_{kl}) = 0. \quad (15)$$

Dans le second membre de (15), $f(u, v, \nu)$ est la fonction flux numérique. Ce flux numérique est propre au schéma de volumes finis considéré. L'indice l est relatif aux cellules C_l voisines de la cellule C_k le long du bord ∂C_k . Dans l'intégration sur ∂C_k , l'indice l est donc une

fonction constante par morceaux. Si le bord de la cellule C_k a une intersection avec $\partial\Omega$, la condition au bord (12) sert à calculer le vecteur frontière w_l^n . La condition initiale (11) permet d'initialiser le calcul

$$\int_{C_k} w_k^0 = \int_{C_k} w_{\text{ini}}. \quad (16)$$

Le vecteur ν_{kl} est le vecteur normal unitaire sur ∂C_k orienté de C_k vers C_l .

Dans les cas les plus simples, le flux numérique doit vérifier les propriétés

1. Propriété de conservation : $\forall (w_L, w_R, \nu), \quad f(w_L, w_R, \nu) = -f(w_R, w_L, -\nu)$,
2. Propriété de consistance : $\forall (w, \nu), \quad f(w, w, \nu) = f(w) \cdot \nu$.

Dans les années 50, Godunov [46] a proposé un schéma de volumes finis dont le flux numérique est calculé à partir de solutions exactes du problème de Riemann. Le calcul du flux $f(w_L, w_R, \nu)$ est basé sur le calcul d'une solution exacte constante dans les directions orthogonales à ν . Le problème de Riemann dans la direction ν consiste à trouver une fonction de deux variables $(t, \xi) \rightarrow v(t, \xi) \in R^m$ solution de

$$\begin{aligned} v_t + \frac{\partial}{\partial \xi} f(v) \cdot \nu &= 0, \quad \xi \in R, \quad t > 0, \\ v(0, \xi) &= \begin{cases} w_L & \text{si } \xi < 0, \\ w_R & \text{si } \xi > 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

Dans ce système, les variations de la solution dans la direction tangentielle à l'arête sont donc négligées. Il y a en général une infinité de solutions faibles autosimilaires¹ au problème (17). Notons

$$R(\xi/t, w_L, w_R) = v(t, \xi), \quad (18)$$

l'une d'entre elle, sélectionnée au moyen d'un critère d'entropie par exemple. Le flux de Godunov est alors donné par

$$f(w_L, w_R, \nu) = f(R(0^+ \text{ ou } -, w_L, w_R)) \cdot \nu. \quad (19)$$

Dans le cas de la dimension $d = 1$, le schéma de Godunov admet une interprétation intéressante. Notons (x_k) , $k \in Z$, les points d'une subdivision de R . Posons $x_{k+1/2} = 1/2(x_k + x_{k+1})$. La cellule C_k , centrée sur x_k est l'intervalle $]x_{k-1/2}, x_{k+1/2}[$ de longueur $h_k = x_{k+1/2} - x_{k-1/2}$. Le schéma de Godunov s'écrit dans ce cas

$$w_k^{n+1} = w_k^n - \frac{\tau_n}{h_k} (f_n^{k+1/2} - f_n^{k-1/2}), \quad (20)$$

avec

$$f_n^{k+1/2} = f(R(0, w_k, w_{k+1})). \quad (21)$$

Si l'on considère la fonction constante par morceaux

$$v(x) = w_k^n, \quad x \in C_k, \quad (22)$$

il est possible de résoudre exactement le problème

$$\begin{aligned} u_t + f(u)_x &= 0, \\ u(0, x) &= v(x), \quad x \in R. \end{aligned} \quad (23)$$

¹solution autosimilaire : solution qui ne dépend que du rapport ξ/t

La solution est la superposition de solutions de problèmes de Riemann aux interfaces $x_{k+1/2}$ des cellules. Cette résolution est plus simple tant que les solutions des problèmes de Riemann n'interagissent pas. Classiquement, on impose que les perturbations issues des interfaces n'atteignent pas les milieux des cellules. Ceci conduit à une condition de type CFL sur le pas de temps τ_n

$$\tau_n < \max_k \frac{h_k}{2\lambda}, \quad (24)$$

où λ est la vitesse d'onde maximale dans tous les problèmes de Riemann².

La solution numérique à l'instant t_{n+1} peut alors s'interpréter comme la moyenne dans chaque cellule de la solution exacte u à l'instant τ_n

$$w_k^{n+1} = \frac{1}{h_k} \int_{C_k} u(\tau_n, x) dx. \quad (27)$$

C'est pour cette raison que le schéma de Godunov est souvent appelé le "meilleur" schéma possible pour résoudre des systèmes de lois de conservation en dimension un d'espace [46]. La seule erreur est commise, à chaque pas de temps lors de la projection L^2 de la solution exacte sur l'espace des fonctions constantes dans chaque cellule.

En dimension supérieure d'espace, cette propriété n'est plus vraie. La généralisation naturelle serait de résoudre un problème de Riemann à chaque sommet du maillage, avec une donnée initiale constante dans des secteurs angulaires d'origine ce sommet. De très nombreux auteurs se sont penchés sur la résolution du problème de Riemann multidimensionnel. Il se trouve que la résolution est beaucoup plus complexe qu'en une dimension. L'application à un schéma de volumes finis est donc hasardeuse. On pourra trouver un aperçu des difficultés dans les travaux d'Abgrall [4], [5] ou de Lax et Liu [69].

La résolution du problème de Riemann peut être délicate et coûteuse sur le plan informatique, en terme de programmation et de temps de calcul. De nombreux auteurs, à travers une vaste littérature, ont donc proposé d'autres flux numériques ou des méthodes de résolution approchées du problème de Riemann. On renvoie par exemple aux livres de Raviart et Godlewski [45], de Toro [90] et aux références incluses. Il est aussi intéressant de donner quelques jalons : la résolution locale du problème de Riemann est abordée dans un cadre général par Lax dans [68]. Un des schémas les plus utilisés dans les codes de volumes finis industriels est le schéma de Roe [83]. Il admet de nombreuses variantes comme le schéma VFRoe [42]. Dans un article de synthèse très complet, Harten, Lax et van Leer [49] formalisent la notion de schéma de type Godunov, cadre dans lequel nous nous sommes placés, font le lien entre les notions de solveur de Riemann approché, viscosité numérique

²Pour un système hyperbolique linéaire, la condition de CFL est moins restrictive. Elle s'écrit

$$\tau_n < \max_k \frac{h_k}{\lambda}. \quad (25)$$

En pratique, même pour des systèmes non-linéaires, c'est la condition (25) qu'il faut absolument respecter, sinon, le schéma est instable. En dimension supérieure d'espace la condition de stabilité est de la forme

$$\tau_n < \max_k \frac{\text{volume}(C_k)}{\text{aire}(\partial C_k)\lambda}. \quad (26)$$

et schéma décentré. Ils introduisent aussi un nouveau schéma, le schéma HLL (pour Harten, Lax, van Leer) très général, robuste et simple à programmer. Dans le cadre de la dynamique des fluides compressibles, il est impossible de citer tous les schémas de volumes finis développés par divers auteurs : donnons cependant pour mémoire le schéma de Steger et Warming [88], les schémas cinétiques de Perthame [80] particulièrement simples et robustes. Plus récemment, les schémas de type AUSM, ont de bonnes propriétés [71].

3 Précision du schéma de Godunov

Armés d'un modèle élémentaire d'écoulement multiphasique ainsi que d'une méthode d'approximation, nous allons voir qu'il reste encore quelques efforts à fournir avant de proposer un résultat de calcul fiable. La première amélioration indispensable consiste en une augmentation de la précision.

Cette section est donc consacrée à quelques expériences numériques pour évaluer la précision du schéma classique de Godunov. Nous nous limitons au cas de la dynamique d'un seul gaz parfait, le cas vraiment diphasique n'étant abordé que plus tard. Quelques rappels et expériences sur la méthode MUSCL de van Leer sont proposés.

À la fin de la section, se trouve reproduit un article, écrit avec Frédéric Coquel et Jacques Schneider, sur une analyse théorique d'une technique de montée en ordre avec un limiteur basé sur un critère entropique.

3.1 Exemple

Un des premiers défauts auquel on est confronté lorsque l'on met en oeuvre le schéma de Godunov est sa précision décevante. Afin d'illustrer ce fait, considérons en dimension un d'espace l'équation de transport linéaire scalaire

$$w_t + \frac{1}{2}w_x = 0, \quad (28)$$

et l'équation de Burgers

$$w_t + \frac{1}{2}(w^2)_x = 0. \quad (29)$$

Ces deux équations admettent pour solution

$$w(t, x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x/t < 1/2, \\ 0 & \text{si } x/t > 1/2. \end{cases} \quad (30)$$

Dans le cas de l'équation de Burgers, cette dernière solution satisfait aux critères usuels d'entropie.

Soit un maillage régulier de pas h de l'intervalle $[0, 1]$, un pas de temps $\tau = \theta h$, où le nombre de CFL $\theta = 0.9$. Après résolution par volumes finis, on peut tracer l'erreur en

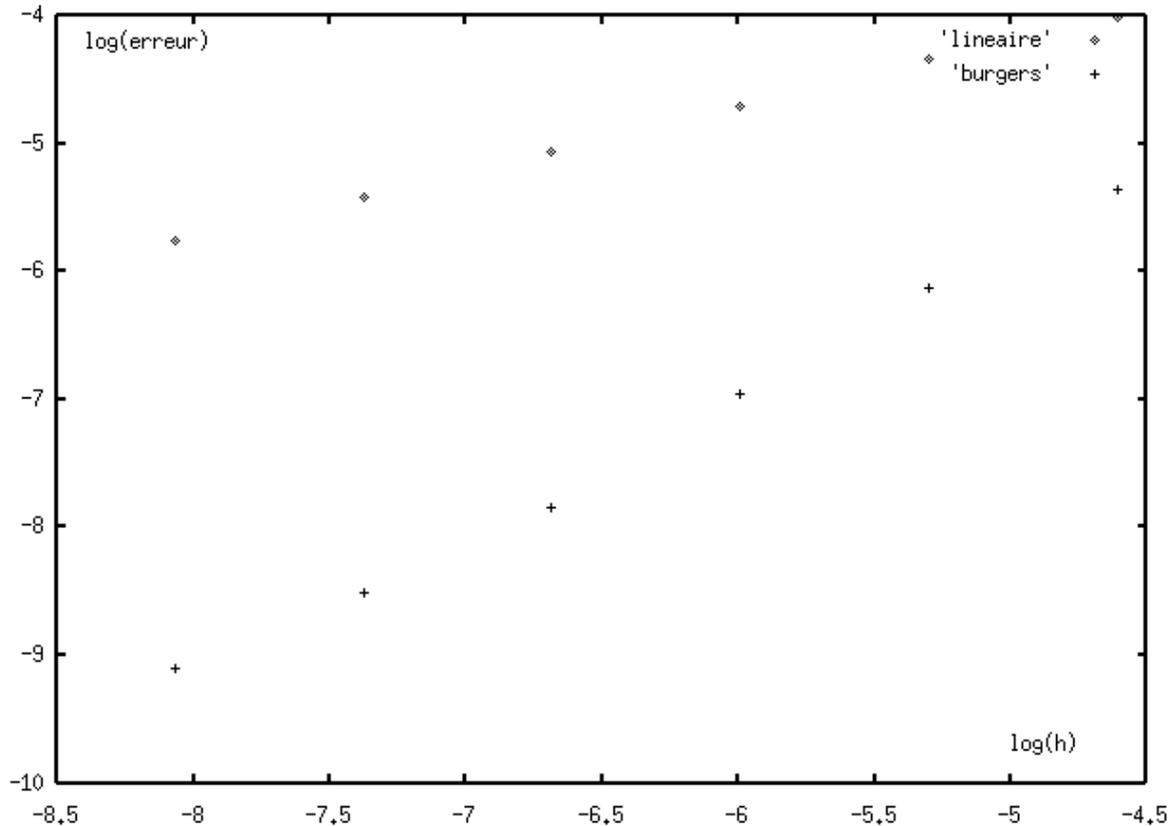


FIG. 1 – Convergence du schéma de Godunov pour l'équation de transport linéaire et l'équation de Burgers

norme L^1 entre la solution exacte w et la solution approchée w_h à l'instant $t = 1$. En échelle logarithmique, ces tracés sont représentés Figure 1. Bien que les solutions des deux équations soient identiques, on observe numériquement des taux de convergence différents. Le taux est d'un demi (erreur en \sqrt{h}) pour l'équation linéaire et de 1 pour l'équation non-linéaire. Ainsi, la non-linéarité a tendance à améliorer la précision. Dans le cas d'un système de loi de conservation général, ce sont les champs linéairement dégénérés qui dégradent le plus souvent les solutions numériques.

3.2 Montée en ordre MUSCL

Pour les applications, il était donc indispensable d'imaginer un moyen d'améliorer la précision du schéma de Godunov. Le cas des équations scalaires, pour lesquelles il existe une théorie complète d'existence et d'unicité des solutions entropiques est décrit dans de nombreux travaux, synthétisés dans le livre de Godlewski et Raviart [44]. En particulier, il est montré par Goodman et LeVeque dans [48] qu'il n'existe pas, pour une équation de transport linéaire, de schéma de différences finies lui aussi linéaire, à trois points, d'ordre deux et à variation totale décroissante (TVD). Ce résultat impose de chercher des schémas non-linéaires car la propriété TVD est importante pour assurer que la solution numérique reste dans l'ensemble des états admissibles. Van Leer a proposé dans [92] une

méthode très simple pour améliorer la précision du schéma de Godunov. Cette méthode, aujourd'hui baptisée MUSCL, pour Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws, est couramment employée dans de nombreux codes industriels ou de recherche. Chaque programmeur a sa façon de la mettre en oeuvre, mais le principe est toujours le même. Une des présentations les plus claires en dimension un est celle de Harten que nous reprenons ici. Cette présentation est détaillée dans [44] et dans de nombreux articles de Harten dont [50].

Comme indiquée précédemment en (23), au pas de temps $n + 1$, dans chaque cellule la solution numérique est la valeur moyenne de la solution exacte du problème d'évolution initialisé par la solution constante par morceaux du pas de temps précédent. Le fait de connaître exactement ces valeurs moyennes peut permettre de reconstruire, au moyen de développements de Taylor, la solution exacte à n'importe quel ordre (en fonction de h), lorsque celle-ci est régulière. Commençons par décrire la méthode en dimension un d'espace. Cette fois-ci la solution numérique est affine dans chaque cellule

$$w(t_n, x) \simeq w^n(x) = w_k^n + s_k^n(x - x_k), \quad x \in C_k. \quad (31)$$

La nouvelle valeur moyenne w_k^{n+1} est calculée comme en (20), mais contrairement à (21) le calcul de flux tient compte des pentes s_k^n

$$f_n^{k+1/2} = f\left(R(0, w_k^n + \frac{h_k}{2}s_k^n, w_{k+1}^n - \frac{h_{k+1}}{2}s_{k+1}^n)\right). \quad (32)$$

Le schéma est entièrement décrit si les pentes sont connues. La pente s_k^n dans la cellule C_k va être déterminée à partir des valeurs moyennes w_{k-1}^n , w_k^n et w_{k+1}^n . En effet, si ces valeurs moyennes sont précises à l'ordre 2, elles sont aussi des approximations à l'ordre 2 de w aux milieux des cellules. En revanche elles n'approchent la solution qu'à l'ordre 1 au bord des cellules. Notons α , la pente décentrée à gauche, β , la pente centrée et γ , la pente décentrée à droite, calculées par différences finies

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 \frac{w_k^n - w_{k-1}^n}{h_{k-1} + h_k}, \\ \beta &= 2 \frac{w_{k+1}^n - w_{k-1}^n}{h_{k-1} + 2h_k + h_{k+1}}, \\ \gamma &= 2 \frac{w_{k+1}^n - w_k^n}{h_k + h_{k+1}}. \end{aligned} \quad (33)$$

Il est bien connu qu'aucune de ces pentes n'est un bon candidat pour s_k^n , car alors, le calcul des pentes serait linéaire par rapport à w . Il faut limiter ces pentes de façon non-linéaire. Introduisons par exemple le limiteur "minmod". Soit E un ensemble non vide de réels

$$\text{minmod}(E) = \begin{cases} \inf E & \text{si } E \subset R^+, \\ \sup E & \text{si } E \subset R^-, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (34)$$

Le choix

$$s_k^n = \text{minmod}(\{\alpha, \beta, \gamma\}), \quad (35)$$

conduit à un schéma stable, d'ordre 2 en espace, qui possède de plus la propriété TVD pour des nombres de CFL $< 1/2$. Pour obtenir un schéma d'ordre 2 aussi en temps, il est

possible par exemple d'utiliser une méthode d'intégration d'ordre 2 en temps de Runge-Kutta, comme la méthode de Heuhn ou d'Euler améliorée. Cette montée en ordre en temps améliore le schéma pour des solutions régulières mais peut parfois lisser la solution dans les discontinuités. La stabilité est également améliorée.

Une alternative intéressante à la montée en ordre en temps par méthode de Runge-Kutta est une méthode attribuée à Hancock, décrite dans le livre de Toro [90], qui consiste à calculer une estimation des flux numériques à l'instant $n + 1/2$ au lieu de l'instant n . À cette fin, une fois les pentes en espace estimées par (33) et limitées par (35), il est possible d'estimer aussi la dérivée en temps à l'instant n de la solution au centre de la cellule C_k en utilisant tout simplement le système de lois de conservation (23). Cette dérivée en temps est notée r_k^n et s'obtient par exemple avec la formule

$$r_k^n = -f'(w_k^n) s_k^n. \quad (36)$$

Ensuite, le schéma de volumes finis est amélioré en considérant la loi de conservation discrète tenant compte des flux à l'instant $n + 1/2$

$$w_k^{n+1} = w_k^n - \frac{\tau_n}{h_k} \left(f_{k+1/2}^{n+1/2} - f_{k-1/2}^{n+1/2} \right), \quad (37)$$

le flux étant calculé en tenant compte de la dérivée en temps

$$f_{n+1/2}^{k+1/2} = f\left(R(0, w_k^n + \frac{h_k}{2} s_k^n + \frac{\tau_n}{2} r_k^n, w_{k+1}^n - \frac{h_{k+1}}{2} s_{k+1}^n + \frac{\tau_n}{2} r_{k+1}^n)\right). \quad (38)$$

En pratique, les résultats sont meilleurs lorsque la montée en ordre est effectuée non pas sur les variables conservatives w mais sur un autre jeu de variables non-conservatives bien choisies $y = y(w)$ que l'on sait plus régulières que w . En dynamique des gaz, il est souvent intéressant de prendre $y = (\rho, u, p)$ où ρ est la densité du gaz, u , sa vitesse et p sa pression. En effet, la vitesse et la pression sont continues à la traversée d'une discontinuité de contact. Dans chaque cellule, la variable non-conservative approchée y^n est affine

$$y^n(x) = y(w_k^n) + d_k^n(x - x_k), \quad x \in C_k, \quad (39)$$

et permet de calculer le flux grâce à

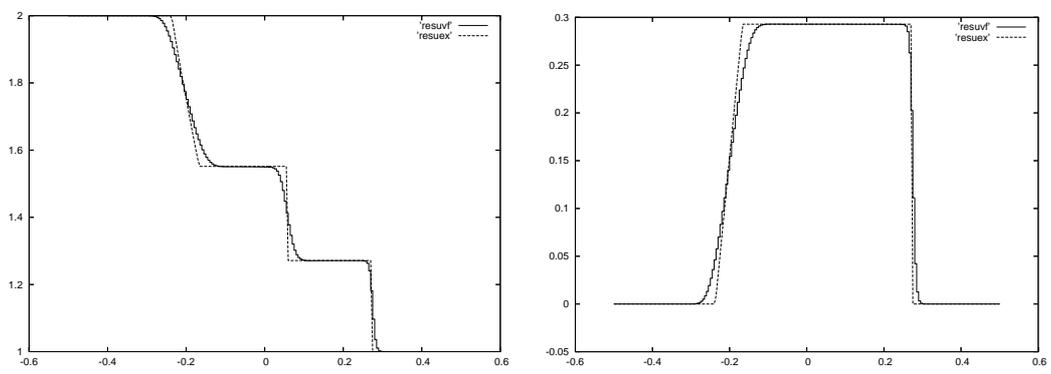
$$f_n^{k+1/2} = f\left(R(0, y^{-1}(y^n(x_{i+1/2}^-)), y^{-1}(y^n(x_{i+1/2}^+))\right). \quad (40)$$

Bien sûr, la montée en ordre en temps est aussi possible sur ce jeu de variables, soit par une technique de Runge-Kutta soit par la méthode de MUSCL Hancock.

Pour illustrer le propos, nous proposons maintenant quelques expériences numériques. Le système hyperbolique retenu est celui des équations d'Euler pour un gaz parfait avec une loi de pression de gaz parfait $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$ avec $\gamma = 1.4$. La condition initiale est celle d'un problème de Riemann dont les données sont indiquées sur le Tableau 1. Les caractéristiques (CFL, nombre de mailles, etc.) des différents calculs sont indiquées Tableau 2

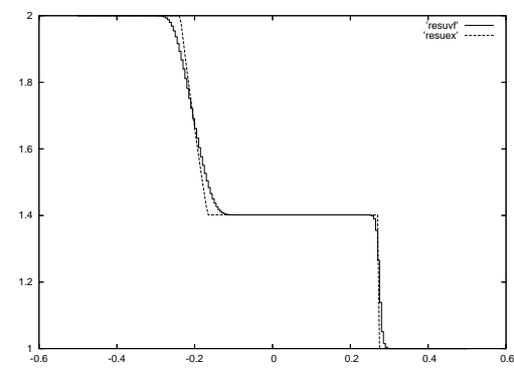
À l'ordre 1, la solution du schéma de Godunov est comparée à la solution exacte sur la Figure 2. Sur la Figure 3, sont représentés les résultats obtenus avec le schéma MUSCL,

FIG. 2 – Schéma de Godunov, ordre 1.



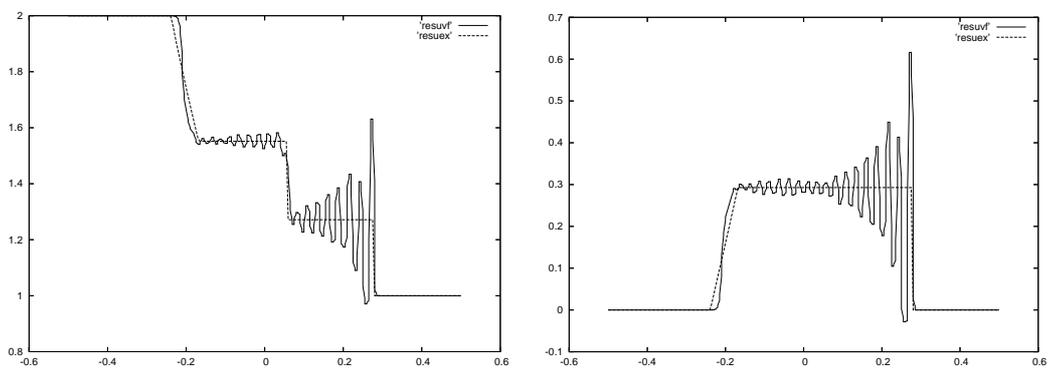
(a) Densité

(b) Vitesse



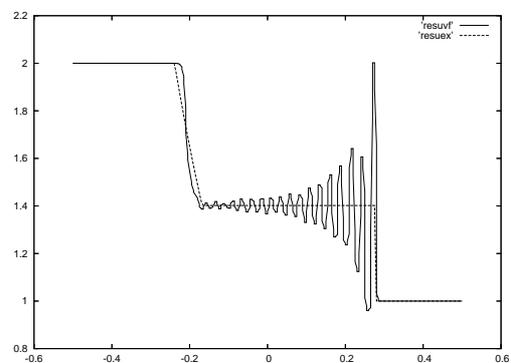
(c) Pression

FIG. 3 – Schéma de Godunov, ordre 2 en espace.



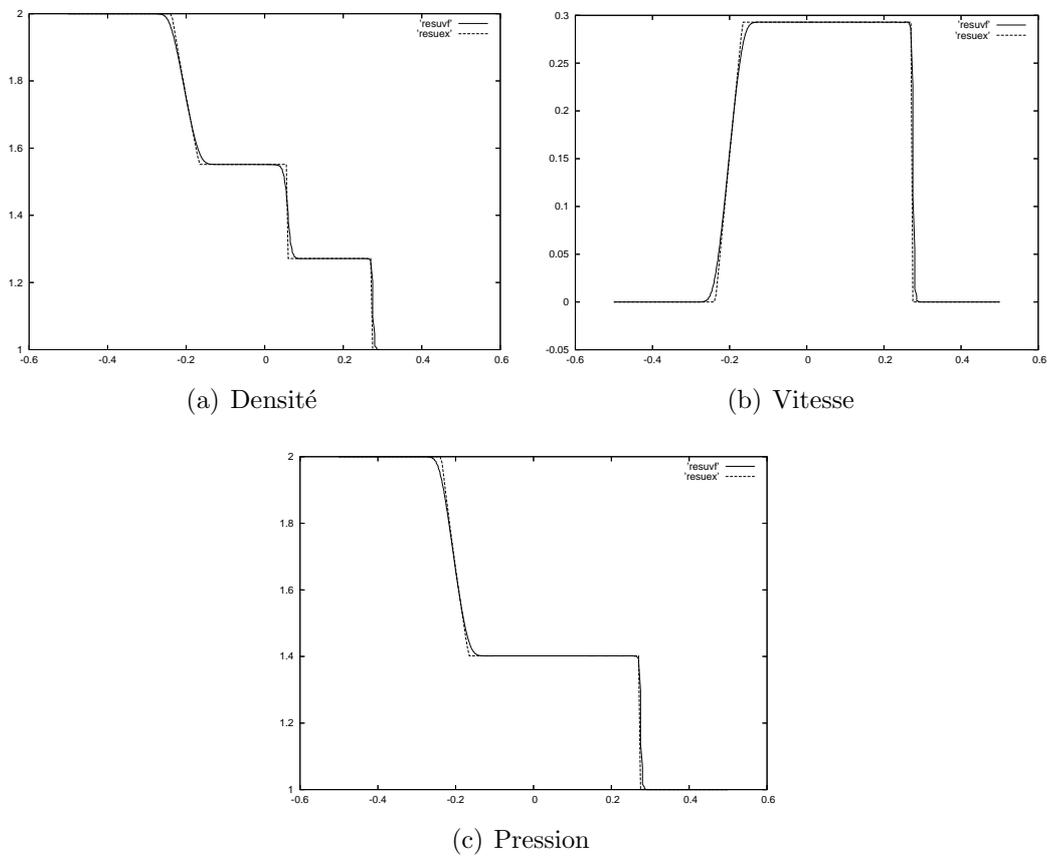
(a) Densité

(b) Vitesse



(c) Pression

FIG. 4 – Schéma de Godunov-Hancock, ordre 2 en espace et en temps.



Variable	État gauche	État droit
Densité	$\rho_L = 2$	$\rho_R = 1$
Vitesse	$u_L = 0$	$u_R = 0$
Pression	$p_L = 2$	$p_R = 1$

TAB. 1 – Jeu de données initiales pour tester la montée en ordre.

CFL	0.9
Nombre de mailles	200
Intervalle	$[-1/2, 1/2]$
Instant final	$t = 0.2$

TAB. 2 – Variables des calculs pour tester la montée en ordre.

d'ordre 1 en temps et 2 en espace. Le nombre de CFL étant de 0.9, on observe des oscillations. Enfin, sur la Figure 4, on peut constater l'amélioration apportée par la montée en ordre en temps de Hancock.

Pour une dimension d'espace supérieure, une généralisation très simple est la suivante, attribuée à Barth et détaillée dans [45]. Il s'agit d'abord d'évaluer une approximation du gradient notée ∇w_k^n au barycentre x_k de chaque cellule C_k . Ce calcul peut par exemple s'effectuer en discrétisant la formule de Green

$$\int_{C_k} \nabla w = \int_{\partial C_k} w \nu, \quad (41)$$

conduisant à

$$\int_{C_k} \tilde{\nabla} w_k^n = \int_{\partial C_k} \frac{1}{2} (w_k^n + w_l^n) \nu. \quad (42)$$

Le coefficient 1/2 peut être remplacé par une combinaison linéaire plus adaptée afin d'améliorer la précision. Bien sûr, ce calcul de gradient linéaire doit être limité de façon non-linéaire pour que le schéma soit exempt d'oscillation. On pose donc

$$\nabla w_k^n = \alpha \tilde{\nabla} w_k^n, \quad (43)$$

où $\alpha \in [0, 1]$ est le limiteur. Le limiteur est alors le plus grand réel compris entre 0 et 1, tel que pour toute face l de la cellule C_k

$$w_k^n \leq w_k^n + \nabla w_k^n (x_l - x_k) \leq w_l^n. \quad (44)$$

Dans cette inégalité, x_k désigne le barycentre de la cellule k . Le calcul précédent peut être effectué séparément sur chaque composante de w (un limiteur par composante) ou sur un autre jeu de variables non-conservatives, comme en dimension 1. Une fois le gradient limité, le calcul des flux numériques se fait comme en (19) mais en utilisant les pentes pour extrapoler les valeurs de w sur les faces, le flux numérique $f(w_k^n, w_l^n, \nu)$ est donc remplacé par

$$f(w_k^n + \nabla w_k^n (x_{kl} - x_k), w_l^n + \nabla w_l^n (x_{lk} - x_l), \nu), \quad (45)$$

où x_{kl} désigne le barycentre de la face $\partial C_k \cap \partial C_l$. Là aussi, l'ordre deux en temps peut-être obtenu soit par une technique de Runge-Kutta, soit par la méthode de MUSCL Hancock. Et bien sûr, un autre jeu de variables que les variables conservatives peut-être reconstruit pour une meilleure précision.

3.3 Autres approches

L'augmentation de la précision du schéma de Godunov a suscité de nombreux travaux et plusieurs familles de méthodes. Pour mémoire nous en évoquons quelques-unes :

1. les méthodes de Galerkin discontinu,
2. les méthodes multiniveaux,
3. les schémas distribués.

Les méthodes de type Galerkin discontinu font le lien entre la méthode des éléments finis et la méthode des volumes finis. Introduites par Lesaint et Raviart [70] dans le cas des systèmes hyperboliques linéaires, elles consistent à approcher les inconnues par des fonctions polynomiales dans chaque cellule comme pour les éléments finis, mais sans supposer de continuité aux interfaces. La formulation faible est restreinte à cet espace de fonctions continues par morceaux et nécessite donc l'évaluation d'un flux numérique aux interfaces, comme dans le cas des volumes finis. Voir Paragraphe 4.3 pour un exemple. La méthode de Galerkin discontinu conduit à un calcul naturel des dérivés, mais celles-ci doivent être limitées, comme dans le cas des méthodes MUSCL. La technique Galerkin discontinu doit donc être considérée comme une méthode d'évaluation des pentes, alternative de la reconstruction à partir des valeurs moyennes. Liée à une intégration en temps de type Runge-Kutta, cette méthode, bien que coûteuse, donne de bons résultats [26], [41].

L'idée de raffiner le maillage dans les voisinages des chocs est une idée naturelle, qui a été expérimentée dans de nombreux travaux [18], [41]. Informatiquement, le raffinement se fait à travers une structure d'arbre. Une étude systématique a conduit à la notion de schéma multiniveaux d'Harten [15], [6]. Analysé dans [27]. Les résultats obtenus (voir par exemple Müller [28]) sont parmi les plus précis.

Citons enfin une approche développée par Deconinck, Roe, Abgrall [7], [33], celle des schémas distribués. Dans cette approche, les inconnues sont situées aux noeuds du maillage au lieu des cellules. Apparemment, à maillage égal, la précision est meilleure que pour les schémas de volumes finis.

3.4 Projections entropiques

La technique MUSCL a le mérite d'être particulièrement simple à mettre en oeuvre, et répétons qu'il existe une multitude de variantes de cette même idée. Dans tous ces travaux, le critère TVD joue un rôle fondamental. Or depuis les travaux de Rauch [82], il n'y a plus d'espoir de démontrer un résultat d'existence et d'unicité de la solution de (10) dans

les espaces BV lorsque la dimension d'espace est > 1 . Il est donc important de trouver d'autres approches plus générales pour limiter les gradients.

Une idée intéressante a été proposée par Bouchut et Perthame dans [16]. Ces auteurs considèrent une équation hyperbolique scalaire en dimension un d'espace. Comme en (31), la solution numérique à l'instant t_n , $w^n(x)$ est affine dans chaque cellule. Comme dans un schéma de Godunov classique, le schéma de Bouchut-Perthame est constitué de deux étapes. Pendant l'étape de résolution exacte, on utilise un solveur de Riemann avec une donnée initiale constituée de deux états gauche et droit affines. A la fin de cette étape, la solution exacte $w^{n+1,-}(x)$ n'est plus affine dans chaque cellule. L'étape de projection a pour but de retrouver une fonction affine. La valeur moyenne dans la cellule est imposée par la condition de conservation

$$w_k^n = \frac{1}{h_k} \int_{\partial C_k} w^{n+1,-}(x) dx. \quad (46)$$

La pente s_n^k est calculée en tenant compte d'un critère d'entropie moyen. Plus précisément, pour toute entropie de Lax $U(w)$, on requiert que l'entropie moyenne de la projection soit inférieure à l'entropie moyenne avant projection

$$\int_{C_k} U(w_k^n + s_n^k(x - x_k)) dx \leq \int_{C_k} U(w^{n+1,-}(x)) dx. \quad (47)$$

Un calcul astucieux permet à Bouchut et Perthame de proposer une pente satisfaisant (47). Cette pente est le minmod de l'ensemble des valeurs prises par une approximation de la dérivée de $w^{n+1,-}(x)$ sur la cellule. Ce résultat est intéressant car il permet de faire un lien clair entre les notions de schéma entropique, de schéma TVD et de limiteur de pente. Le travail de Bouchut et de Perthame ne s'arrête pas là puisqu'ils construisent également un solveur de Riemann approché du second ordre et entropique basé sur l'interprétation cinétique des équations hyperboliques scalaires [20], [21]. Couplée à ce solveur approché, la technique de projection conduit à un schéma du second ordre, entropique pour toute entropie de Lax, complètement explicitable et relativement simple à programmer.

D'autres ont ensuite tenté de généraliser l'approche aux systèmes. Dans [31], Coquel et Lefloch s'attaquent au système de la dynamique des gaz en coordonnées Lagrangiennes. Leur solveur de Riemann est un solveur approché du second ordre du type de ceux construits dans [13], [19], [45].

Dans un article reproduit plus loin, Coquel, Schneider et moi-même avons étendu la méthode au cas de la dynamique des gaz parfaits compressibles en coordonnées eulériennes. Dans ce travail nous calculons explicitement la projection entropique. Puis nous couplons cette projection à un solveur du second ordre approché basé sur l'interprétation cinétique des équations d'Euler. Le schéma résultant est assez complexe mais donne de bons résultats. Ces travaux ont montré, à mon avis, qu'un bon limiteur de pente peut être construit en ne se basant que sur des critères d'entropie. L'approche a le mérite d'être très claire, de généraliser naturellement l'idée initiale de Godunov. Cependant les calculs restent lourds. C'est surtout l'étape de résolution "exacte" qui pénalise la méthode. Il serait intéressant de réussir à développer des solveurs de Riemann "légers" et d'étendre notre approche aux dimensions d'espace supérieures.

3.5 Second order entropy diminishing scheme for the Euler equations

Cet article est soumis à "International Journal of Numerical Methods for Fluids" (en cours de correction). Il s'agit d'un travail en collaboration avec Frédéric Coquel et Jacques Schneider.

Il peut être téléchargé à l'adresse

<http://helluy.univ-tln.fr/PREPRINTS/entropy.pdf>

4 Instabilité numérique des discontinuités de contact

Les sections précédentes nous ont permis de montrer comment mettre en oeuvre la méthode des volumes finis, puis comment améliorer sa précision. Nous avons proposé quelques applications à des cas classiques de dynamique d'un gaz parfait. Dans cette section nous abordons le cas des écoulements multiphasiques proprement dit.

Nous allons commencer par mettre en évidence un phénomène numérique indésirable. Souvent, dans ce type de calcul, apparaissent des oscillations de la pression numérique aux interfaces entre les fluides. Ces oscillations ne sont absolument pas physiques et peuvent conduire, dans les cas les plus défavorables, à des arrêts du calcul, lorsque la vitesse du son devient imaginaire. Nous présenterons quelques correctifs, proposés par divers auteurs, pour corriger ces oscillations.

La section se termine par un article, écrit avec Thomas Barberon et Sandra Rouy, où nous présentons un exemple d'application du correctif d'Abgrall et Saurel pour le calcul pratique d'un écoulement multifluide axisymétrique, dans un contexte industriel. Cet article aborde aussi la possibilité physique d'apparition de pressions négatives (ou tensions) dans un liquide. Nous apportons aussi un soin particulier à l'application de conditions aux limites réalistes.

4.1 Exemple

Dans cette partie, nous nous plaçons dans un cas particulier de système hyperbolique en dimension 1 d'espace. Ce système est le suivant

$$\begin{aligned}\rho_t + (\rho u)_x &= 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x &= 0, \\ (\rho u^2/2 + \rho \varepsilon)_t + ((\rho u^2/2 + \rho \varepsilon + p)u)_x &= 0, \\ (\rho \varphi)_t + (\rho u \varphi)_x &= 0.\end{aligned}\tag{48}$$

La pression p est une fonction de ρ , ε et φ . Le modèle permet de simuler l'écoulement de deux fluides compressibles non miscibles que dans la suite nous désignons par fluides (a) et (b). Si $\varphi = 0$, seul le fluide (b) est présent et si $\varphi = 1$, seul le fluide (a) est présent. Si à l'instant initial φ ne prend que les valeurs 0 ou 1, c'est aussi le cas à tout instant $t > 0$. Le modèle prend donc bien en compte l'absence de mélange. Cependant, pour des raisons numériques, il est nécessaire d'accepter un mélange fictif de ces deux fluides. La variable φ peut alors être interprétée comme la fraction massique du fluide (a) dans le mélange.

Nous supposons que la loi de pression du mélange est une loi de gaz parfait. La constante de gaz parfait γ de mélange étant donnée par

$$\begin{aligned}p &= (\gamma(\varphi) - 1)\rho\varepsilon, \\ \frac{1}{\gamma(\varphi) - 1} &= \frac{\varphi}{\gamma_1 - 1} + \frac{1 - \varphi}{\gamma_2 - 1}.\end{aligned}\tag{49}$$

La dernière équation de (48) est formellement équivalente à

$$\varphi_t + u \cdot \varphi_x = 0. \quad (50)$$

Cette équivalence a également un sens rigoureux. Partant des relations de Rankine-Hugoniot, on démontre en effet que dans une discontinuité, il ne peut y avoir à la fois un saut de u et φ . Le produit $u \cdot \varphi_x$ est donc parfaitement défini.

Variable	État gauche	État droit
Densité	$\rho_L = 10$	$\rho_R = 1$
Vitesse	$u_L = 50$	$u_R = 50$
Pression	$p_L = 10^5$	$p_R = 10^5$
Fraction	$\varphi_L = 1$	$\varphi_R = 0$
Loi de pression	$\gamma_1 = 1.4$	$\gamma_2 = 1.1$

TAB. 3 – *Discontinuité de contact instationnaire. Donnée initiale.*

CFL	0.7
Nombre de mailles	400
Intervalle	$[0, 1]$
Instant final	$t = 0.001$

TAB. 4 – *Discontinuité de contact instationnaire. Donnée du calcul.*

Si l'on applique le schéma de Godunov pour calculer un problème de Riemann dont les données sont décrites Table 3, le profil de pression typique obtenu est tracé Figure 5. La donnée initiale de ce problème de Riemann correspond à une discontinuité de contact, c'est à dire que la pression p et la vitesse u sont des constantes.

Dans le cas d'un écoulement monophasique compressible (si $\gamma_1 = \gamma_2$), il est connu que le schéma de Godunov préserve exactement les discontinuités de contact, au sens où u et p restent constantes. Seule la densité est diffusée.

Ce n'est plus le cas pour un écoulement multifluide (quand $\gamma_1 \neq \gamma_2$). La pression et la vitesse numériques présentent cette fois de grandes variations. On peut cependant vérifier que le schéma converge vers la bonne solution. Mais cela s'observe sur des maillages extrêmement fins [43], [42].

Ces surprenants et mauvais résultats sont typiques de tous les schémas conservatifs de type Godunov. Une montée en ordre de type MUSCL améliore un peu les résultats, mais les oscillations sont toujours visibles.

4.2 Méthodes non-conservatives

Un des premiers articles traitant de l'approximation des écoulements diphasiques compressibles par une méthode de volumes finis est dû à Mulder, Osher et Sethian [77]. Ces

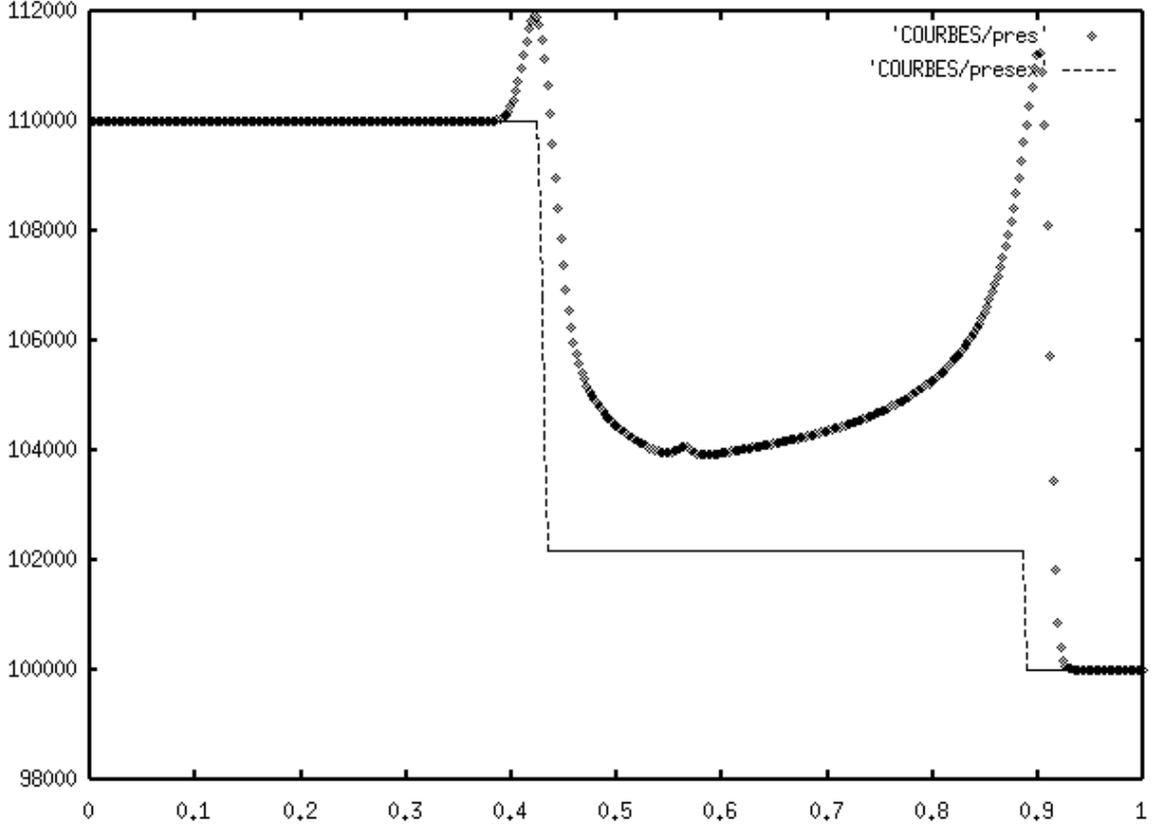


FIG. 5 – *Oscillations en pression du schéma conservatif.*

auteurs ne détaillent pas l'adaptation qu'ils ont dû apporter au schéma de Roe pour obtenir de bons résultats.

Karni dans [65] et [66] soulève la difficulté. Elle montre que les oscillations commencent par des oscillations de pression et propose d'utiliser l'équation d'évolution non-conservative de la pression

$$p_t + up_x + \gamma pu_x = 0. \quad (51)$$

Elle repère aussi l'interface au moyen de la fraction φ . Dans notre cas, l'interface correspondrait à la ligne de niveau $\varphi = 1/2$. Elle propose ensuite la méthode numérique suivante :

- Si à l'étape n , la cellule C_i et ses voisines sont dans le même fluide, c'est à dire si $\varphi_{i-1}^n - 1/2$, $\varphi_i^n - 1/2$ et $\varphi_{i+1}^n - 1/2$ sont de même signe, la pression est mise à jour comme d'habitude, en utilisant le schéma de Godunov.
- En revanche, si la cellule C_i et ses voisines ne sont pas dans le même fluide, alors la pression est mise à jour en utilisant une discrétisation de (51).

On peut montrer, que par cette approche, le schéma préserve les états à vitesse et pression constantes. Cependant, la méthode est non-conservative en énergie sur les deux cellules de part et d'autre de l'interface. Cette méthode, simple et générale, est valable pour d'autres lois de pression que la loi des gaz parfaits.

L'équation (51) étant non-conservative, se pose alors le sens des produits up_x et γpu_x . Karni note que ces produits sont bien définis car u et p sont continus à la traversée d'une

discontinuité de contact.

Numériquement, la méthode semble précise. Il serait intéressant de montrer un résultat de type Lax-Wendroff sur ce genre de schéma. Notons, que selon les travaux de Hou et LeFloch [63], les schémas de volumes finis non-conservatifs ne convergent pas en général vers des solutions faibles du problème de départ.

Dans certains cas particuliers, il est aussi possible d'écrire un schéma conservatif en énergie. Abgrall, dans un cadre différent, celui de la dynamique des mélanges de gaz, a montré dans [1] dès 1988, puis dans [2], que c'était possible en discrétisant de façon non-conservative l'équation sur la fraction φ . Rappelons encore que l'équation de conservation de la masse de chaque constituant

$$(\rho\varphi)_t + (\rho\varphi u)_x = 0, \quad (52)$$

et l'équation de convection

$$\varphi_t + u\varphi_x = 0, \quad (53)$$

sont non seulement formellement, mais aussi rigoureusement équivalentes. En effet, les équations de saut de Rankine-Hugoniot du système (48) permettent de montrer que u et φ ne peuvent présenter une discontinuité simultanée. Par conséquent, le produit non-conservatif $u\varphi_x$ est toujours défini.

D'autre part, même si ces deux équations sont équivalentes, des discrétisations conservatives ou non peuvent conduire à des résultats différents. Abgrall a montré qu'une discrétisation non-conservative classique de l'équation de convection (53) permet de construire un schéma qui préserve les états à pression et vitesse constantes. Cette approche est valable pour des lois de gaz parfaits.

Le problème des oscillations de pression a intrigué plusieurs chercheurs dans le domaine des volumes finis. Nous avons déjà cité le travail de Karni. Abgrall et Saurel, dans [87], ont étendu l'approche d'Abgrall aux mélanges dont les constituants satisfont à la loi des gaz raides. C'est une adaptation de ce schéma que j'ai utilisée pour calculer, avec Sandra Rouy et Thomas Barberon, un écoulement compressible d'air et d'eau dans la chambre de refroidissement d'un générateur de gaz. Cet article [11] est reproduit plus loin. Nous proposons aussi dans cet article un schéma de type Lagrange-projection pour le calcul des écoulements multifluides à lois de pression quelconques.

Chang, Hou, Merriman et Osher ont proposé dans [24] une approche de type "level set". L'idée est de contrôler la diffusion numérique de l'interface pilotée par l'équation (52). Cela est obtenu en calculant à chaque pas de temps la solution stationnaire $\varphi^\infty(\tau = \infty, x)$ de l'équation de Hamilton-Jacobi

$$\varphi_\tau^\infty = \text{sgn}(\varphi - 1/2)(1 - |\nabla\varphi^\infty|), \quad (54)$$

avec la condition initiale

$$\varphi^\infty(\tau = 0, x) = \varphi(t, x). \quad (55)$$

À chaque pas de temps, la fraction φ est réactualisée à $\varphi(t, x) = \varphi^\infty(\tau = \infty, x)$ de telle façon que $\varphi - 1/2$ reste au cours du calcul une distance signée à l'interface. La loi

de pression permet alors de contrôler explicitement l'épaisseur de l'interface. Le schéma obtenu est cependant assez complexe à mettre en oeuvre.

Une autre approche, baptisée "ghost fluid" est proposée par Fedkiw, Aslam, Merriman, et Osher dans [40]. C'est une modification du schéma de Godunov. L'idée est de ne résoudre aux interfaces des cellules que des problèmes de Riemann monofluides. C'est une méthode non-conservative car il faut calculer deux flux numériques distincts à l'interface entre deux cellules dans des fluides différents. Bien qu'assez précise sur maillage grossier, il ne semble pas que cette méthode soit convergente. La méthode a été ensuite simplifiée par Abgrall et Karni dans [3]. Thomas Barberon dans sa thèse [9], propose une adaptation de la technique "ghost fluid" pour pouvoir calculer des cas d'apparition du vide.

Després et Lagoutière ont proposé dans [36] un schéma pour l'équation de transport (53) possédant des propriétés étranges et intéressantes : basé sur le limiteur "Ultra-Bee" il n'est pas TVD, il n'est pas linéairement stable mais il s'avère exact pour un ensemble de conditions initiales dense dans L^1 . Il peut être adapté aux équations d'Euler et en plusieurs dimensions d'espace. Les résultats préliminaires obtenus sont très prometteurs.

Le problème des oscillations de pression dans les interfaces suscite toujours des travaux, comme par exemple ceux de van Brummelen et Koren [91]. Une approche un peu plus systématique est proposée par Gallouët, Hérard et Seguin dans [42].

En conclusion, de nombreux correctifs ont été proposés pour supprimer les oscillations de pression dans les calculs d'écoulements multifluides. Cependant, il n'existe toujours pas de cadre théorique clair pour expliquer ce phénomène. Comme indiqué ci-dessus, le schéma de Godunov conservatif semble converger vers la bonne solution faible. Il s'agit plus d'un problème de précision du schéma de Godunov que d'une instabilité conduisant à la non-convergence.

Notons que ce type d'imprécision peut aussi se rencontrer dans des calculs monofluides bidimensionnels. Dans [14], Berthon et Nkonga s'intéressent à la propagation d'une ligne de glissement bidimensionnelle pour un écoulement de gaz parfait. En supposant l'écoulement constant suivant la direction y , le modèle devient monodimensionnel

$$\begin{aligned}
\rho_t + (\rho u)_x &= 0, \\
(\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x &= 0, \\
(\rho v)_t + (\rho uv)_x &= 0, \\
(\rho E)_t + ((\rho E + p)u)_x &= 0, \\
E &= \varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2}, \\
p &= (\gamma - 1)\rho\varepsilon.
\end{aligned} \tag{56}$$

Considérons la condition initiale particulière

$$\begin{aligned}
\rho(x, 0) &= \begin{cases} \rho_L & \text{si } x < 0, \\ \rho_R & \text{si } x > 0, \end{cases} & u(x, 0) &= u_0, \\
p(x, 0) &= p_0, & v(x, 0) &= \begin{cases} v_L & \text{si } x < 0, \\ v_R & \text{si } x > 0. \end{cases}
\end{aligned} \tag{57}$$

La solution du problème de Cauchy est

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \rho(x - u_0 t, 0), & u(x, t) &= u_0, \\ p(x, t) &= p_0, & v(x, t) &= v(x - u_0 t, 0). \end{aligned} \quad (58)$$

Pour cette solution, les résultats numériques sont également désastreux. Ce phénomène numérique a d'ailleurs une forte incidence sur la confiance que l'on peut accorder à un calcul par schéma de Godunov d'un écoulement comportant des lignes de glissement. Berthon et Nkonga proposent dans [14] un début d'analyse du phénomène.

Le problème (56) peut aussi s'écrire sous une forme similaire à (8). En effet, en considérant $\varphi = v^2/2$ comme une inconnue artificielle supplémentaire et $\epsilon = \varepsilon + \varphi$, on trouve

$$\begin{aligned} \rho_t + (\rho u)_x &= 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x &= 0, \\ (\rho u^2/2 + \rho \epsilon)_t + ((\rho u^2/2 + \rho \epsilon + p)u)_x &= 0, \\ (\rho v)_t + (\rho u v)_x &= 0, \\ \varphi_t + u \varphi_x &= 0, \\ p &= p(\rho, \epsilon, \varphi) = (\gamma - 1)\rho(\epsilon - \varphi). \end{aligned} \quad (59)$$

Une discrétisation du système augmenté (59) permet d'améliorer la précision des résultats. Voir [14] et [42]. Là aussi se pose la question de la convergence du schéma résultant car ce dernier n'est pas conservatif.

4.3 Montée en ordre

Dans ce paragraphe, nous détaillons le schéma de Godunov avec correction d'Abgrall Saurel. Nous proposons une version d'ordre 2 de ce schéma, ce qui présente une petite difficulté car une partie du flux numérique est non-conservatif. La discrétisation à l'ordre 2 des équations non-conservatives est abordée par exemple par Sainsaulieu dans [86].

Commençons par écrire le schéma d'ordre 1. Pour alléger la présentation, nous supposons que le pas du maillage en espace h est constant. Le système conservatif peut s'écrire

$$\begin{aligned} w_t + f(w)_x &= 0, \\ w &= (\rho, \rho u, \rho E, \rho \varphi)^T, \\ f(w) &= (\rho u, \rho u^2 + p, (\rho E + p)u, \rho \varphi u)^T, \\ E &= \varepsilon + \frac{u^2}{2}, \quad \frac{1}{\gamma - 1} = \frac{\varphi}{\gamma_1 - 1} + \frac{1 - \varphi}{\gamma_2 - 1}, \quad p = (\gamma - 1)\rho \varepsilon. \end{aligned} \quad (60)$$

En notant, comme précédemment, R le solveur de Riemann, le schéma conservatif de Godunov s'écrirait

$$\begin{aligned} w_i^{n+1} &= w_i^n - \frac{\tau}{h} (f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n), \\ f_{i+1/2}^n &= f(R(0, w_i^n, w_{i+1}^n)). \end{aligned} \quad (61)$$

C'est effectivement ce schéma qui est utilisé pour les trois premières variables conservatives. En revanche la dernière variable n'est pas actualisée de manière conservative. Appelons W le vecteur des variables conservatives, $W = (\rho, \rho u, \rho E)^T$ et Φ le vecteur des variables non-conservatives. Dans notre cas, $\Phi = \varphi$. Notons également U le vecteur $U = (W^T, \Phi^T)^T$. Le système (60) peut aussi s'écrire

$$\begin{aligned} W_t + F(U)_x &= 0, \\ \Phi_t + B(U)\Phi_x &= 0, \\ F(U) &= (\rho u, \rho u^2 + p, (\rho E + p)u)^T, \\ B(U) &= u. \end{aligned} \tag{62}$$

Le schéma d'ordre 1, non-conservatif en Φ , est

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{h} (G(U_i^n, U_{i+1}^n, +1) - G(U_i^n, U_{i-1}^n, -1)). \tag{63}$$

La non-conservation proviendra du fait que le flux numérique ne vérifie pas forcément la condition de conservation

$$G(U, V, \nu) \neq -G(V, U, -\nu). \tag{64}$$

Il reste donc à détailler le flux numérique $G(U, V, \nu)$. Il est composé de deux parties, $G = (F^T, H^T)^T$. La partie conservative est $F(U, V, \nu)$ et la partie non-conservative est $H(U, V, \nu)$. Soit maintenant w^* la solution du problème de Riemann en $x/t = 0$,

$$w^* = R(0, w(U), w(V)). \tag{65}$$

Comme indiqué précédemment, la partie conservative du flux numérique est celle du schéma classique de Godunov

$$F(U, V, \nu) = F(U^*)\nu. \tag{66}$$

Pour la partie non-conservative, nous utilisons un schéma décentré classique, la vitesse étant celle de l'état intermédiaire w^*

$$H(U, V, \nu) = (u^*\nu)^-(\varphi(V) - \varphi(U)). \tag{67}$$

Le schéma est donc presque aussi simple à mettre en oeuvre que le schéma de Godunov. Il faut résoudre un problème de Riemann par interface. La partie conservative du flux est commune aux deux cellules de part et d'autre de l'interface. En revanche, il faut calculer deux flux différents pour la variable Φ .

Cependant, il n'est plus possible d'interpréter Φ_i^n comme la valeur moyenne d'une solution exacte. Au centre de la cellule, Φ_i^n n'est qu'une approximation d'ordre 1 de la vraie valeur moyenne. Avant d'estimer les pentes et de les limiter, il est indispensable d'améliorer la précision du calcul de la variable Φ au milieu de chaque cellule.

Une façon commode de construire un schéma de volumes finis non-conservatif est d'examiner la résolution numérique de l'équation de transport multidimensionnelle par la méthode de Galerkin discontinu. L'équation de transport s'écrit

$$\varphi_t + \sum_{i=1}^d u^i \cdot \varphi_{x_i} = 0. \tag{68}$$

Ici, le vecteur $u = (u^1 \cdots u^d)$ dépend des variables d'espace $(x_1 \cdots x_d)$. Il est commode de poser $u^0 = 1$, ainsi l'équation de transport s'écrit aussi

$$\sum_{i=0}^d u^i \cdot \varphi_{x_i} = 0. \quad (69)$$

La méthode de Galerkin discontinu a été proposée par Lesaint et Raviart dès 1974. À propos de cette méthode on renvoie à [70], [17], [57], [41]. Nous nous contentons d'en indiquer ici les idées principales.

Soit E l'espace vectoriel des fonctions de l'espace-temps R^{d+1} dans R , de classe C^1 par morceaux. On suppose u et φ dans E . L'inconnue φ peut donc admettre des discontinuités ainsi que le champ de vitesse u . Soit $R\varphi \subset R^{d+1}$ l'ensemble où φ est régulière et $D\varphi$ l'ensemble où φ admet une discontinuité. Une formulation faible possible de l'équation de transport (68) consiste à trouver une fonction $\varphi \in E$ telle que pour toute fonction test $\psi \in E$, on ait

$$\begin{aligned} B(\varphi, \psi) &= \int_{R\varphi \cap R\psi} \sum_i u^i \cdot \varphi_{x_i} \psi + \int_{D\varphi \cup D\psi} (u_g \cdot \nu)^- (\varphi_d - \varphi_g) \psi_g \\ &+ \int_{D\varphi} (u_d \cdot \nu)^+ (\varphi_d - \varphi_g) \psi_d = 0. \end{aligned} \quad (70)$$

Le vecteur normal à la surface de discontinuité $D\varphi \cup D\psi$ est noté ν . L'indice "g" (comme "gauche") est relatif au côté de $-\nu$ sur $D\varphi \cup D\psi$. L'indice "d" (comme "droite") est relatif au côté de ν . La formulation est indépendante de l'orientation de la normale ν sur $D\varphi \cup D\psi$ car $(u \cdot \nu)^- = -(u \cdot (-\nu))^+$.

Pour la justification de cette formulation, on renvoie aux références déjà citées. Notons quand même que si u est régulier et si ψ est C^∞ à support compact, alors $B(\varphi, \psi)$ est le crochet distributionnel habituel

$$B(\varphi, \psi) = \left\langle \sum_i u^i \cdot D_i \varphi, \psi \right\rangle = \left\langle \sum_i u^i \cdot \varphi_{x_i}, \psi \right\rangle + \langle u \cdot \nu [\varphi] \delta_{D\varphi}, \psi \rangle, \quad (71)$$

les notations étant les suivantes :

- la dérivée au sens des distributions est $D_i \varphi$;
- la dérivée au sens des fonctions est φ_{x_i} ;
- la mesure surfacique sur $D\varphi$ est $\delta_{D\varphi}$;
- enfin, le saut de φ à travers $D\varphi$ est $[\varphi]$

Ce lien avec le crochet distributionnel remplace la propriété de consistence des schémas conservatifs.

Enfin, quand la fonction test ψ est discontinue, la forme faible (70) permet d'introduire le bon décentrage. Un schéma de volume finis s'obtient en introduisant un sous-espace de E , E_h . L'espace E_h est par exemple l'ensemble des fonctions constantes par maille spatio-temporelle. En général, la maille spatio-temporelle est le produit de la maille en espace par l'intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$. Le problème discret s'écrit :

Trouver φ dans E_h tel que pour tout ψ dans E_h , la relation (70) est vraie.

Lorsque E_h est l'ensemble des fonctions constantes par maille, le terme φ_{x_i} dans (70) disparaît et on retrouve le schéma non-conservatif (67). En revanche, ce terme ne disparaît pas pour des fonctions affines par mailles. En prenant pour fonction test ψ la fonction indicatrice de la maille $C_k \times [t_n, t_{n+1}]$ dans (70), on voit que la nouvelle valeur moyenne dans la cellule k à l'instant $n + 1$ doit satisfaire à

$$\begin{aligned} \int_{C_k} \varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n + \int_{C_k} \sum_i u^i \cdot \varphi_{x_i} + \\ \int_{\partial C_k} (u \cdot \nu)^- (\varphi_l - \varphi_k) = 0. \end{aligned} \quad (72)$$

Revenons maintenant au cas du système 1D. Les valeurs moyennes U_i^n sont données à l'étape n avec une erreur d'ordre 2. On commence par évaluer les pentes (limitées) en espace, s_i^n comme expliqué au paragraphe 3.2. Ensuite, on calcule les pentes en temps r_i^n . Pour simplifier, nous supposons que les pentes sont calculées dans les variables U , mais en pratique, il est préférable de calculer les pentes dans les variables (ρ, u, p, φ) pour préserver les états à vitesse et pression constantes. Le calcul des valeurs moyennes à l'ordre 2 est donné par

$$\begin{aligned} U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{h} \left(G(U_{i+1/2,-}^{n+1/2}, U_{i+1/2,+}^{n+1/2}, +1) - \right. \\ \left. G(U_{i-1/2,+}^{n+1/2}, U_{i-1/2,-}^{n+1/2}, -1) \right) - \\ \frac{\tau}{h} D(U_i^n). \end{aligned} \quad (73)$$

$$\begin{aligned} U_{i+1/2,-}^{n+1/2} = U_i^n + \frac{h}{2} s_i^n + \frac{\tau}{2} r_i^n, \\ U_{i+1/2,+}^{n+1/2} = U_{i+1}^n - \frac{h}{2} s_{i+1}^n + \frac{\tau}{2} r_{i+1}^n. \end{aligned} \quad (74)$$

Le terme source D est indispensable pour atteindre l'ordre 2 dans les zones régulières

$$D(U_i^n) = (0 \cdots 0, B(U_i^n) s_i^n)^T. \quad (75)$$

4.4 Practical computation of axisymmetrical multifluid flows

Cet article a été publié en 2003 dans "International Journal of Finite Volumes". Il s'agit d'un travail en collaboration avec Thomas BARBERON et Sandra ROUY, que j'ai encadrés en thèse.

Il peut être téléchargé à l'adresse

<http://helluy.univ-tln.fr/PREPRINTS/axigen.pdf>

5 Entropie et changement de phase

Les sections précédentes nous ont permis d'introduire un modèle simple d'écoulement multiphasique. Nous disposons aussi de méthodes de calcul des solutions, d'ordre 2, partiellement non-conservatives pour éviter les oscillations de pression aux interfaces. Nous avons aussi proposé des exemples numériques, académiques, ou plus appliqués. Nous allons nous intéresser maintenant à la modélisation du changement de phase. Pour cela, il est indispensable d'envisager des lois de pressions plus réalistes que la loi de pression des gaz raides, utilisée dans l'article de la section 4.4.

Les propriétés mathématiques du système (8) sont intimement liées au choix de la loi de pression (7). Une loi de pression quelconque ne conduira pas à un système hyperbolique. De plus, même si le système est hyperbolique, certaines lois de pression conduisent à des défauts d'unicité de la solution du problème de Riemann (voir [76]). Il y aura donc des précautions à prendre sur le plan numérique pour sélectionner la bonne solution physique.

La loi de pression est issue de considérations thermodynamiques. Dans cette section, nous commençons donc par quelques rappels de thermodynamique pour un fluide unique. Dans les présentations classiques de la thermodynamique (voir [67], [23], [39], [76], [32]) la donnée de départ est la fonction entropie du fluide. La loi de pression se déduit de l'expression de l'entropie.

Quand deux fluides différents sont mélangés, et si l'on connaît l'expression de leurs entropies, il est possible, en résolvant un problème d'optimisation convexe, de trouver l'expression de l'entropie de mélange. La loi de pression qui dérive de cette nouvelle entropie tient compte d'un possible transfert de masse (changement de phase) entre les deux fluides. Suivant le choix des contraintes dans le problème d'optimisation, on retrouve des lois classiques en théorie des mélanges : loi de Dalton ou loi isobare. Les SHLC qui en découlent ont de bonnes propriétés dont l'existence d'une entropie de Lax, voir par exemple [32], [35].

À travers quelques expériences numériques, nous verrons qu'il est alors possible, dans certains cas, de capturer plusieurs solutions. Ces solutions satisfont toutes à un principe de croissance de l'entropie de mélange. Ce phénomène est étudié par Stéphane Jaouen dans sa thèse [64].

La représentation proposée de l'entropie d'équilibre permet d'écrire un schéma numérique de relaxation très simple, qui permet de capturer à coup sûr la solution physique. Chaque pas de temps est composé de deux demi-pas. Dans une première étape, les variables de mélange sont simplement convectées. Dans la deuxième demi-étape, l'entropie de mélange est optimisée pour retrouver l'entropie d'équilibre. On retrouve cette idée dans de nombreuses méthodes numériques pour les SHLC. Voir par exemple la méthode "Transport and Collapse" de Brenier [20], les schémas cinétiques de Perthame [80], les techniques de relaxation de Coquel et Perthame [30]. Voir aussi [25], [34], [9], *etc.*

La section se termine par un article traitant d'un tel schéma de relaxation, basé sur l'optimisation de l'entropie de mélange.

5.1 Thermodynamique d'un fluide simple

Considérons un fluide simple de masse $M \geq 0$, d'énergie interne $E \geq 0$, occupant un volume $V \geq 0$. Si ce fluide est homogène et au repos, son comportement est entièrement décrit par sa fonction entropie

$$S : (M, V, E) \rightarrow S(M, V, E). \quad (76)$$

Dans la suite, nous noterons souvent $W = (M, V, E)$. Le vecteur W appartient à un cône fermé convexe de R^3 , $C = \{(M, V, E), M \geq 0, V \geq 0, E \geq 0\}$. Selon la thermodynamique, la fonction entropie doit satisfaire

- L'entropie S est positivement homogène de degré 1 (que l'on abrège en "S est PH1")

$$\forall \lambda > 0, \quad S(\lambda W) = \lambda S(W). \quad (77)$$

- L'entropie $S(W)$ est concave par rapport à W .

Pour la justification de cette axiomatique, on renvoie à [23], [39]. Les deux conditions ci-dessus sont équivalentes à

S est sous-linéaire (voir [62]).

Nous définissons l'inverse de la température par

$$\theta = \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}, \quad (78)$$

la pression par

$$p = T \frac{\partial S}{\partial V}, \quad (79)$$

et le potentiel chimique (ou l'énergie spécifique de Gibbs) par

$$\mu = -T \frac{\partial S}{\partial M}. \quad (80)$$

De cette façon, nous retrouvons la relation classique

$$TdS = dE + pdV - \mu dM. \quad (81)$$

Les relations d'Euler pour les fonctions PH1 conduisent à $S(W) = \nabla S(W) \cdot W$, qui n'est rien d'autre que la relation de Gibbs

$$\mu M = E + pV - TS. \quad (82)$$

La quantité $G = \mu M$ est appelée l'énergie libre de Gibbs. En thermodynamique, les fonctions PH1 de W sont dites extensives. Les fonctions PH0 sont dites intensives. Le gradient d'une fonction PH1 étant PH0, la température, la pression et le potentiel chimique sont des variables intensives. Il est aussi usuel de définir l'entropie spécifique s

$$Ms = S(M, V, E). \quad (83)$$

En partant du fait que S est PH1 nous voyons que s est PH0 (intensive), et que

$$s = S\left(1, \frac{V}{M}, \frac{E}{M}\right), \quad (84)$$

ainsi, il est naturel de considérer l'entropie spécifique comme une fonction du volume spécifique $\tau = V/M$ et de l'énergie spécifique $\varepsilon = E/M$. La masse volumique est l'inverse du volume spécifique, $\rho = 1/\tau$. Selon le contexte, nous considérerons les variables intensives comme des fonctions de W ou de (τ, ε) . En posant $M = 1$ dans les formules précédentes, on voit que l'on a aussi

$$Tds = d\varepsilon + pd\tau. \quad (85)$$

La relation de Gibbs (82) s'écrit aussi

$$\mu = \varepsilon + p\tau - Ts. \quad (86)$$

Remarque 1 *Selon les relations d'Euler, la fonction entropie ne peut pas être strictement concave. En effet, le vecteur W est toujours dans le noyau de $S''(W)$, où S'' désigne la matrice Hessienne de S . Pour un fluide simple, loin de la transition de phase, on peut cependant supposer que $(\tau, \varepsilon) \rightarrow s(\tau, \varepsilon)$ est strictement concave.*

Les équations d'Euler (1) pour un fluide monophasique ont pour vitesses caractéristiques $u - c$, u et $u + c$, où u est la vitesse du fluide et c la vitesse du son. Cette vitesse du son dépend de la pression $p = p(\tau, \varepsilon)$

$$c^2/\tau^2 = pp_\varepsilon - p_\tau. \quad (87)$$

La vitesse du son s'exprime aussi en fonction de l'entropie spécifique $s(\tau, \varepsilon)$

$$\rho^2 c^2 = -T(p^2 s_{\varepsilon\varepsilon} - 2ps_{\tau\varepsilon} + s_{\tau\tau}). \quad (88)$$

À la Hessienne de s est associée une forme quadratique négative. On déduit donc de (88) que le système sera hyperbolique si la température $T > 0$.

Remarque 2 *La concavité de s implique l'hyperbolicité du système d'Euler (8), si la température est > 0 , avec la loi de pression correspondante. La concavité de s et la positivité de la température sont donc des propriétés importantes pour une modélisation réussie. En revanche, la positivité de la pression n'est pas indispensable.*

Bien que cela ne soit pas le sujet principal de ce document, il est intéressant de faire la distinction entre température statistique (ou absolue) et température thermodynamique. Selon la physique, l'entropie est parfaitement définie par des considérations de physique statistique. Voir à ce sujet le début du livre de Landau et Lifschitz [67]. Il en est de même pour la température, donnée par la formule (78). Mais en pratique, l'entropie statistique est difficile à calculer ou mesurer. La température absolue est donc aussi difficile à obtenir.

Par conséquent, il existe une autre définition de la température, dite température thermodynamique, utilisée par les expérimentateurs et qui est le résultat d'une convention. La définition complète est longue (voir [81] ou

<http://www.its-90.com>).

Elle a été choisie pour des raisons pratiques. Nous expliquons ici comment l'échelle de température est construite (sans donner tous les détails). Il faut bien comprendre que l'objectif principal est de réaliser de vraies mesures. Les quantités les plus faciles à mesurer sont la masse, le volume et la pression. L'énergie peut aussi être mesurée, à une constante près, grâce à la relation

$$\delta Q = dE + pdV, \quad (89)$$

qui relie la variation d'énergie et de volume du fluide quand il est chauffé d'une énergie δQ à une pression p . Il est plus simple d'utiliser

$$\delta Q = dH - Vdp, \quad (90)$$

où $H = E + pV$ est l'enthalpie, parce qu'il est plus facile, dans un laboratoire, de travailler à pression constante qu'à volume constant.

Ainsi, nous comprenons comment il est possible de tabuler une loi de pression $p = p(\tau, \varepsilon)$.

Ensuite, l'entropie spécifique et la température satisfont

$$Tds = d\varepsilon + pd\tau, \quad (91)$$

donc, l'entropie spécifique est solution de l'Équation aux Dérivées Partielles (EDP) du premier ordre

$$\frac{\partial s}{\partial \tau} = p \frac{\partial s}{\partial \varepsilon}. \quad (92)$$

L'ennui est que ce problème possède en général une infinité de solutions. Soit en effet s_0 l'entropie physique, issue de la physique statistique. Une solution générale de (92) a la forme

$$s(\tau, \varepsilon) = f(s_0(\tau, \varepsilon)). \quad (93)$$

La concavité de s nécessite certaines conditions sur f . Si par exemple, f est concave et croissante, alors $(\tau, \varepsilon) \rightarrow f(s_0(\tau, \varepsilon))$ est aussi concave et la température associée est bien >0 .

A cette entropie spécifique arbitraire s on associe une échelle de température T différente de la température statistique T_0 .

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial s}{\partial \varepsilon}. \quad (94)$$

On peut montrer que T et T_0 sont liées par une fonction croissante :

Proposition 1 *Soit T l'échelle de température associée à l'entropie s . Alors, il existe une fonction croissante g telle que $T = g(T_0)$.*

Maintenant, notre fluide peut être utilisé comme un thermomètre de référence. En partant de l'état liquide pour une pression fixée p_0 , supposons que l'on observe un début de solidification pour une enthalpie h_1 et un début de vaporisation à une enthalpie h_2 . On décide arbitrairement d'associer au premier point une température T_1 et au second une

température T_2 . Les valeurs numériques de T_1 et T_2 sont souvent fixées à partir d'anciennes mesures (avec des thermomètres à gaz, par exemple). Elles deviennent des valeurs exactes, par convention. Entre T_1 et T_2 , la température thermodynamique est une interpolation (linéaire, polynomiale, ou autres) avec d'autres mesures physiques. Aujourd'hui, l'outil principal est la résistance en platine dite "PRT" (pour Platinum Resistor Thermometer). À une pression donnée, on a $T = g_{T_1, T_2}(R)$, où R est la résistance mesurée et g_{T_1, T_2} une fonction donnée (par convention). En définissant ainsi différents points de référence (en utilisant divers matériaux), il est possible de couvrir toute l'échelle de températures. Pour des températures très hautes ou très basses, le procédé d'interpolation est cependant différent (voir [81]). L'échelle de température résultante T est appelée échelle de température thermodynamique par opposition à l'échelle de température absolue T_0 .

Supposons maintenant que la température absolue T_0 est une fonction régulière de τ et p pour un fluide donné. Les températures absolue et thermodynamique sont liées par une fonction croissante g

$$T = g(T_0). \quad (95)$$

Il est clair que g est continue. Mais il n'y a absolument aucune raison qu'elle soit continûment différentiable. Ainsi, $(\tau, p) \rightarrow T(\tau, p)$ est continue mais pas C^1 . Si $T(\tau, p)$ est approchée par des polynômes, un degré élevé est nécessaire pour obtenir une bonne précision. Cela explique probablement les expressions compliquées qui sont données dans la littérature pour approcher les équations d'état. Une illustration est donnée par les formules du comité IAPWS97 qui décrivent le comportement de l'eau. Voir

<http://www.iapws.org>

et

<http://www.iapws.org/relguide/IF97.pdf>

La conclusion de cette digression est que l'échelle de température "International Temperature Scale" de 1990 est certainement un très bon outil pour les expérimentateurs. C'est en revanche un mauvais outil pour les numériciens. Dans les simulations, il serait préférable de choisir une échelle de température plus adaptée et de revenir à l'échelle officielle à la fin du calcul.

Une fois l'échelle de température choisie, il est possible de mesurer l'entropie associée (à une constante près) par la formule

$$ds = \frac{\delta Q}{T}. \quad (96)$$

5.2 Mélanges

Dans ce paragraphe, nous présentons un modèle classique de thermodynamique des mélanges. Nous verrons qu'il est possible avec ce modèle de décrire correctement certaines caractéristiques des fluides miscibles ou immiscibles (loi de Dalton, loi de pression isobare, transition de phase).

Nous considérons deux phases d'un même corps pur. Chacune des phases est caractérisée par sa fonction entropie S_i , $i = 1, 2$. Les entropies ont été estimées à partir de la même échelle de température.

Selon la thermodynamique, l'entropie de mélange est la somme des deux entropies. Ainsi, en dehors de l'équilibre, elle dépend de $W_1 = (M_1, V_1, E_1)$ et $W_2 = (M_2, V_2, E_2)$ dans le cône C

$$\Sigma(W_1, W_2) = S(W_1) + S(W_2). \quad (97)$$

Fixons maintenant la masse, le volume et l'énergie du mélange $W = (M, V, E)$. La conservation de la masse et de l'énergie impliquent $M = M_1 + M_2$ et $E = E_1 + E_2$. Si les deux phases sont immiscibles, nous avons aussi $V_1 + V_2 \leq V$. Mais plus généralement, pour un mélange de gaz par exemple, nous avons seulement $V_1 \leq V$ et $V_2 \leq V$. L'entropie d'équilibre est

$$S(W) = \max_{(W_1, W_2) \in Q} \Sigma(W_1, W_2). \quad (98)$$

Dans cette formule, l'ensemble $Q \subset C \times C$ est l'ensemble des contraintes. Si les deux fluides sont parfaitement immiscibles

$$(M_1, V_1, E_1, M_2, V_2, E_2) \in Q \Leftrightarrow \begin{cases} (M_1, V_1, E_1) \in C, \\ (M_2, V_2, E_2) \in C, \\ M_1 + M_2 = M, \\ V_1 + V_2 \leq V, \\ E_1 + E_2 = E. \end{cases} \quad (99)$$

Si les deux fluides sont parfaitement miscibles, l'ensemble des contraintes est donné par

$$(M_1, V_1, E_1, M_2, V_2, E_2) \in Q \Leftrightarrow \begin{cases} (M_1, V_1, E_1) \in C, \\ (M_2, V_2, E_2) \in C, \\ M_1 + M_2 = M, \\ V_1 \leq V, \\ V_2 \leq V, \\ E_1 + E_2 = E. \end{cases} \quad (100)$$

Commençons par l'optimisation par rapport à E_1 et E_2 . Que le mélange soit miscible ou non, $E_2 = E - E_1$, et donc il suffit d'optimiser $S(W_1) + S(W_2)$ par rapport à E_1 . Or

$$\frac{\partial}{\partial E_1} (S_1(M_1, V_1, E_1) + S_2(M_2, V_2, E - E_1)) = 1/T_1 - 1/T_2, \quad (101)$$

et le maximum sera atteint, en général, pour $T_1 = T_2$.

Considérons maintenant l'optimisation par rapport aux variables de volume V_1 et V_2 dans le cas parfaitement miscible. Les dérivées de Σ par rapport à V_1 et V_2 sont respectivement p_1/T_1 et p_2/T_2 . Dans un modèle où les pressions et les températures sont positives, le maximum sera donc atteint pour une contrainte saturée, c'est à dire $V_1 = V_2 = V$. Après optimisation par rapport à V_1, V_2, E_1, E_2 , l'entropie se présente donc sous la forme

$$\Sigma = S_1(M_1, V, E_1) + S_2(M - M_1, V, E - E_1), \quad (102)$$

l'énergie E_1 dépendant des autres variables

$$E_1 = E_1(M, V, E, M_1). \quad (103)$$

La pression d'équilibre est alors donnée par dérivation de l'entropie d'équilibre

$$\frac{p}{T} = \frac{\partial \Sigma}{\partial V} = \frac{p_1}{T_1} + \frac{1}{T_1} \frac{\partial E_1}{\partial V} + \frac{p_2}{T_2} - \frac{1}{T_2} \frac{\partial E_1}{\partial V} \quad (104)$$

Mais comme à l'équilibre, $T_1 = T_2$, on retrouve ainsi la loi de Dalton qui exprime que la pression du mélange est la somme des pressions partielles de chaque fluide

$$p = p_1 + p_2. \quad (105)$$

Considérons maintenant l'optimisation par rapport aux variables de volume V_1 et V_2 dans le cas parfaitement immiscible. Pour les mêmes raisons que ci-dessus, si les pressions p_1 et p_2 sont > 0 , la contrainte $V_1 + V_2 \leq V$ va devenir $V_1 + V_2 = V$. On peut donc éliminer $V_2 = V - V_1$. L'entropie se présente donc sous la forme

$$\Sigma = S_1(M_1, V_1, E_1) + S_2(M - M_1, V - V_1, E - E_1), \quad (106)$$

La maximisation de cette entropie par rapport à E_1 et V_1 conduit généralement à

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma}{\partial V_1} &= \frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2} = 0, \\ \frac{\partial \Sigma}{\partial E_1} &= \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} = 0. \end{aligned} \quad (107)$$

À l'équilibre on a toujours $T_1 = T_2$, mais on retrouve cette fois-ci la loi de pression isobare

$$p = p_1 = p_2. \quad (108)$$

Nous venons donc de démontrer :

Proposition 2 *Si le mélange est parfaitement immiscible et si les pressions sont > 0 alors, à l'équilibre, $V_1 + V_2 = V$ et la pression de mélange est $p = p_1 = p_2$ (loi de pression isobare).*

De la même façon, si le mélange est parfaitement miscible et si les pressions des deux phases sont > 0 alors, à l'équilibre, $V_1 = V_2 = V$ et la loi de pression est $p = p_1 + p_2$ (loi de Dalton).

Il faut noter que la notion de miscibilité ou d'immiscibilité parfaites ne sont que des approximations. En pratique, quand deux gaz sont mélangés, quand la masse volumique augmente, le nombre de collisions entre molécules augmente et chaque gaz a plus de difficultés à occuper tout l'espace. Le phénomène inverse existe pour l'immiscibilité. Il existe une zone de mélange interfaciale dont l'épaisseur augmente avec la pression et la température. La contrainte $V_1 + V_2 = V$ n'est pas exactement satisfaite.

Nous nous concentrons maintenant sur le modèle parfaitement immiscible. Il est d'abord facile de vérifier que le problème d'optimisation est bien posé. En effet, l'application $(W, W_1) \rightarrow S_1(W_1) + S_2(W - W_1)$ est concave, comme composition d'une fonction concave et d'une fonction affine. Elle est aussi PH1. Le problème reformulé s'écrit

$$\begin{aligned} S(W) &= \max_{W_1 \in Q'} S_1(W_1) + S_2(W - W_1), \\ Q' &= \{(M_1, V_1, E_1), 0 \leq M_1 \leq M, 0 \leq V_1 \leq V, 0 \leq E_1 \leq E\}. \end{aligned} \quad (109)$$

Il est aussi classique d'étendre les entropies S_i en dehors de l'ensemble des contraintes par

$$S_i(W) = \begin{cases} S_i(W) & \text{si } W \in Q', \\ -\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (110)$$

L'entropie d'équilibre s'écrit alors

$$S(W) = S_1 \square S_2(W) := \max_{W_1} (S_1(W_1) + S_2(W - W_1)), \quad (111)$$

où le symbole \square désigne l'inf-convolution de l'analyse convexe³. L'inf-convolution possède de nombreuses propriétés intéressantes (voir [62], [61]), en particulier, on en déduit immédiatement l'existence et la concavité de S .

Proposition 3 *L'entropie $S(W)$ du mélange à l'équilibre (problème (109)) est bien définie (même si plusieurs maxima existent) et concave. Si un maximum W_1 est atteint à l'intérieur du domaine des contraintes Q' , alors les pressions, températures et potentiels chimiques des deux phases sont égaux.*

Nous avons déjà montré que pour le modèle immiscible les pressions et températures des deux phases à l'équilibre sont égales. L'égalité des potentiels chimiques découle de l'annulation de la dérivée de Σ par rapport à M_1 .

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial M_1} = - \left(\frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} \right) = 0. \quad (112)$$

Notons que la plupart du temps, le maximum de Σ est atteint en un point W_1 sur le bord du domaine des contraintes (voir plus bas).

D'autre part, il existe un lien important entre la transformée de Legendre et l'inf-convolution. La transformée de Legendre de l'entropie est définie par

$$S^*(W^*) = \inf_W (W^* \cdot W - S(W)). \quad (113)$$

L'inf-convolution est transformée en addition par transformée de Legendre.

$$(S_1 \square S_2)^* = S_1^* + S_2^*. \quad (114)$$

³Ce n'est pas tout à fait l'inf-convolution car l'entropie est concave au lieu d'être convexe.

De plus, comme la transformée de Legendre est involutive (pour des fonctions convexes semi-continues inférieurement), on a

$$S_1 \square S_2 = (S_1^* + S_2^*)^*. \quad (115)$$

La formule (115) peut avoir un intérêt sur le plan numérique, car il existe des algorithmes très performants pour calculer la transformée de Legendre [22], [73], [74].

Il est souvent plus commode de résoudre le problème d'optimisation en variables intensives. À cette fin, définissons la fraction de volume α , la fraction de masse φ et la fraction d'énergie z , comprises entre 0 et 1 :

$$\alpha = \frac{V_1}{V}, \quad \varphi = \frac{M_1}{M}, \quad z = \frac{E_1}{E}. \quad (116)$$

Nous posons

$$\begin{aligned} s(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z) &= \frac{1}{M} (S_1(M_1, V_1, E_1) + S_2(M_2, V_2, E_2)) \\ &= \varphi s_1\left(\tau \frac{\alpha}{\varphi}, \varepsilon \frac{z}{\varphi}\right) + (1 - \varphi) s_2\left(\tau \frac{1 - \alpha}{1 - \varphi}, \varepsilon \frac{1 - z}{1 - \varphi}\right). \end{aligned} \quad (117)$$

L'entropie spécifique issue de la formule (117) est appelée entropie hors équilibre. L'entropie spécifique à l'équilibre est obtenue en la maximisant par rapport aux fractions (α, φ, z) . Le gradient de s par rapport aux fractions s'écrit

$$\begin{aligned} s_\alpha &= \tau \left(\frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2} \right), \\ s_\varphi &= - \left(\frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} \right), \\ s_z &= \varepsilon \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right). \end{aligned} \quad (118)$$

Si le maximum est atteint à l'intérieur du domaine des contraintes, c'est à dire si toutes les fractions sont strictement comprises entre 0 et 1, le gradient doit s'annuler. L'équilibre correspond donc aux égalités des pressions, températures et potentiels chimiques. Le mélange diphasique est alors physiquement à saturation. En général, le maximum est atteint sur un bord du domaine des contraintes $\alpha = \varphi = z = 0$ ou $\alpha = \varphi = z = 1$ et alors seule une phase est stable.

La dérivation par rapport à τ et ε de l'entropie de mélange hors équilibre (117) permet aussi de définir, au moins formellement, une pression et une température de mélange dépendant du volume τ et de l'énergie ε spécifiques, mais aussi des fractions (α, φ, z) . Cette pression et cette température hors équilibre sont données par

$$\begin{aligned} p &= T \left(\alpha \frac{p_1}{T_1} + (1 - \alpha) \frac{p_2}{T_2} \right), \\ T &= \frac{T_1 T_2}{\alpha T_2 + (1 - \alpha) T_1}. \end{aligned} \quad (119)$$

On peut démontrer le résultat suivant :

Proposition 4 *L'application $(\tau, \varepsilon, \alpha\tau, \varphi, z\varepsilon) \rightarrow s(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z)$ est concave. Par conséquent pour (τ, ε) fixés, $(\alpha, \varphi, z) \rightarrow s(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z)$ est concave. De la même façon, pour (α, φ, z) fixés, $(\tau, \varepsilon) \rightarrow s(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z)$ est concave.*

Notons que généralement, l'application $(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z) \rightarrow s(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z)$ n'est pas concave. Elle n'est concave que dans un voisinage du minimum. Nous obtenons ainsi

Proposition 5 *Considérons le système des équations d'Euler (1) auquel on ajoute la convection des fractions*

$$\begin{aligned}\varphi_t + u \cdot \varphi_x &= 0, \\ \alpha_t + u \cdot \alpha_x &= 0, \\ z_t + u \cdot z_x &= 0,\end{aligned}\tag{120}$$

et l'entropie de mélange $s(\tau, \varepsilon, \alpha, \varphi, z)$, alors, le système résultant est hyperbolique.

5.3 Exemple

Nous traitons maintenant un exemple simple. Nous considérons deux phases non miscibles, chacune obéissant à la loi des gaz parfaits. Plus précisément, nous choisissons comme entropie ($G_i = \gamma_i - 1 > 0$)

$$s_i(\tau, \varepsilon) = \ln \varepsilon + G_i \ln \tau.\tag{121}$$

Après avoir posé

$$G = G(\varphi) = \varphi G_1 + (1 - \varphi) G_2,\tag{122}$$

l'entropie de mélange hors équilibre est donnée par la formule (117) qui devient ici

$$\begin{aligned}s &= \ln \varepsilon + G \ln \tau \\ &+ G_1 \varphi \ln \alpha + G_2 (1 - \varphi) \ln(1 - \alpha) \\ &- (1 + G_1) \varphi \ln \varphi - (1 + G_2) (1 - \varphi) \ln(1 - \varphi) \\ &+ \varphi \ln z + (1 - \varphi) \ln(1 - z).\end{aligned}\tag{123}$$

Nous commençons par optimiser cette entropie par rapport à la fraction d'énergie z . Ce maximum est toujours atteint pour $s_z = 0$ et donne $z = \varphi$. De même, la maximisation par rapport à α donne $\alpha = G_1 \varphi / G$. Avant la maximisation par rapport à la fraction de masse φ , l'entropie se présente donc sous la forme

$$s(\tau, \varepsilon, \varphi) = \ln \varepsilon + G \ln \left(\frac{\tau}{G} \right) + \varphi G_1 \ln G_1 + (1 - \varphi) G_2 \ln G_2,\tag{124}$$

Pour l'optimisation par rapport à la fraction de masse, il est cette fois nécessaire de tenir compte de la contrainte $0 \leq \varphi \leq 1$. En effet,

$$s_\varphi(\tau, \varepsilon, \varphi) = (G_1 - G_2) \ln \left(\frac{\tau}{G} \right) + G_1 (\ln G_1 - 1) - G_2 (\ln G_2 - 1).\tag{125}$$

Si $s_\varphi(\tau, \varepsilon, 0) \leq 0$ alors le maximum est atteint en $\varphi = 0$, si $s_\varphi(\tau, \varepsilon, 1) \geq 0$ alors le maximum est atteint en $\varphi = 1$. Dans tous les autres cas, le maximum est atteint pour l'unique φ_0 ,

$0 < \varphi_0 < 1$, tel que $s_\varphi(\tau, \varepsilon, \varphi_0) = 0$. Cette dernière situation correspond à un mélange diphasique à saturation. La courbe de saturation correspondante a pour équation

$$\frac{p}{T} = \exp\left(\frac{G_1(\ln G_1 - 1) - G_2(\ln G_2 - 1)}{G_1 - G_2}\right) = \kappa. \quad (126)$$

La loi de pression à l'équilibre est alors

$$p(\tau, \varepsilon) = \begin{cases} G_2\varepsilon/\tau & \text{si } \tau \leq \tau_2, \\ \kappa\varepsilon & \text{si } \tau_2 \leq \tau \leq \tau_1, \\ G_1\varepsilon/\tau & \text{si } \tau_1 \leq \tau, \end{cases} \quad (127)$$

$$\tau_i = \frac{G_i}{\kappa}.$$

Jaouen a étudié dans [64] le problème de Riemann pour les équations d'Euler associées à la loi de pression (127). Il a montré qu'il est possible de trouver plusieurs solutions entropiques à ce problème de Riemann. Il est aussi possible de trouver plusieurs solutions vérifiant la condition caractéristique de Lax. Un autre critère de sélection de solution doit donc être retenu. Il est naturel ici de choisir le critère de Liu [72], qui revient *grosso modo* à choisir la solution entropique pour laquelle la production d'entropie est la plus grande. Ce critère de production maximale revient dans divers travaux dont ceux de Mazet [75].

5.4 Dépendance en CFL

Dans cette section, nous présentons quelques expériences numériques d'approximation des équations d'Euler, avec la loi de pression (127). Le schéma retenu est le schéma de Harten-Lax-van Leer [49], à l'ordre 1, particulièrement simple à mettre en oeuvre. Les variables initiales du problème de Riemann sont celles de Jaouen [64], que j'ai reprises aussi dans [10]. Elles sont résumées Tableau 5. Un premier calcul, dont les caractéristiques

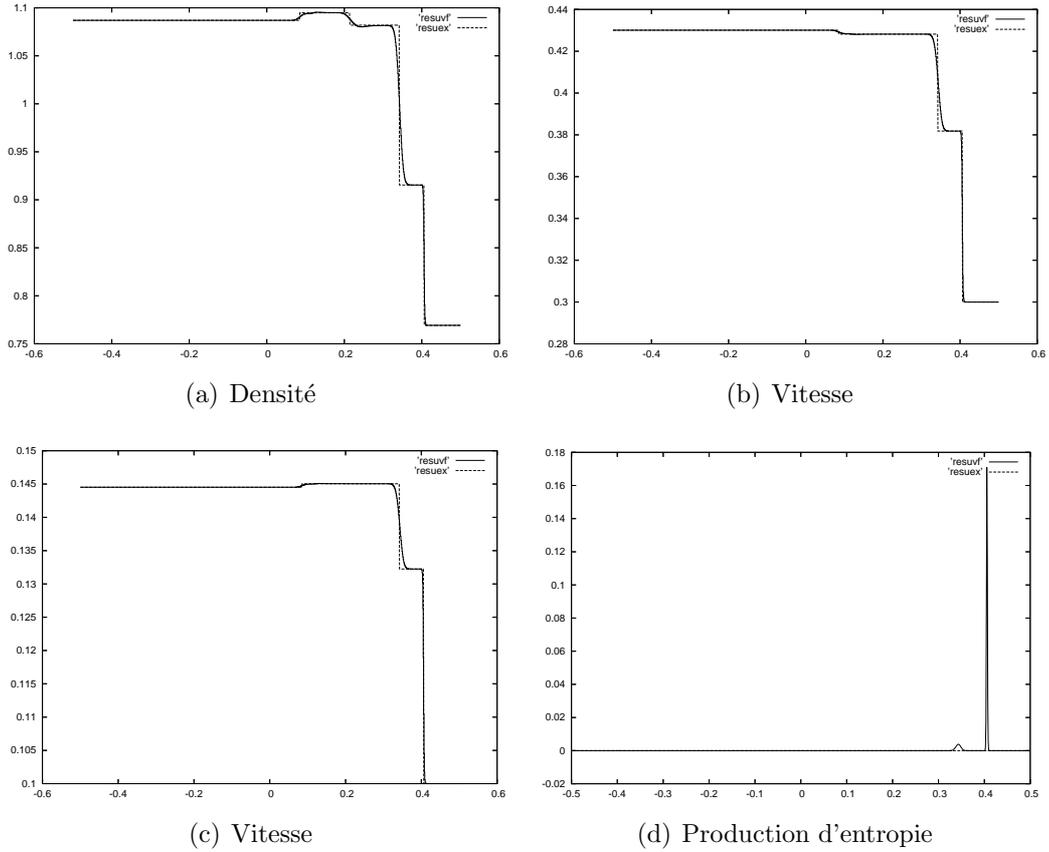
Variable	État gauche	État droit
Densité	$\tau_L = 0.92$	$\tau_R = 1.3$
Vitesse	$u_L = 0.4300665497$	$u_R = 0.3$
Pression	$p_L = 0.1445192299$	$p_R = 0.1$

TAB. 5 – *Jeu de données initiales, loi de pression de transition de phase.*

sont données Tableau 6 conduit aux résultats représentés Figure 6. On constate que la solution de Liu est bien capturée. La production numérique d'entropie est positive.

En augmentant très légèrement le nombre de CFL, on obtient les résultats présentés Figure 7. Cette fois-ci, le schéma capture une autre solution. Cette solution est bien une solution entropique. Il est possible de s'en convaincre en examinant la production numérique d'entropie dans le choc de droite où se situe le changement de phase. Visiblement, ce choc est résolu sur deux mailles. Sur la maille de droite, la production numérique d'entropie est positive. Sur la maille de gauche, cette production est négative. Mais globalement,

FIG. 6 – Schéma HLL, transition de phase, $CFL = 0.9418$.



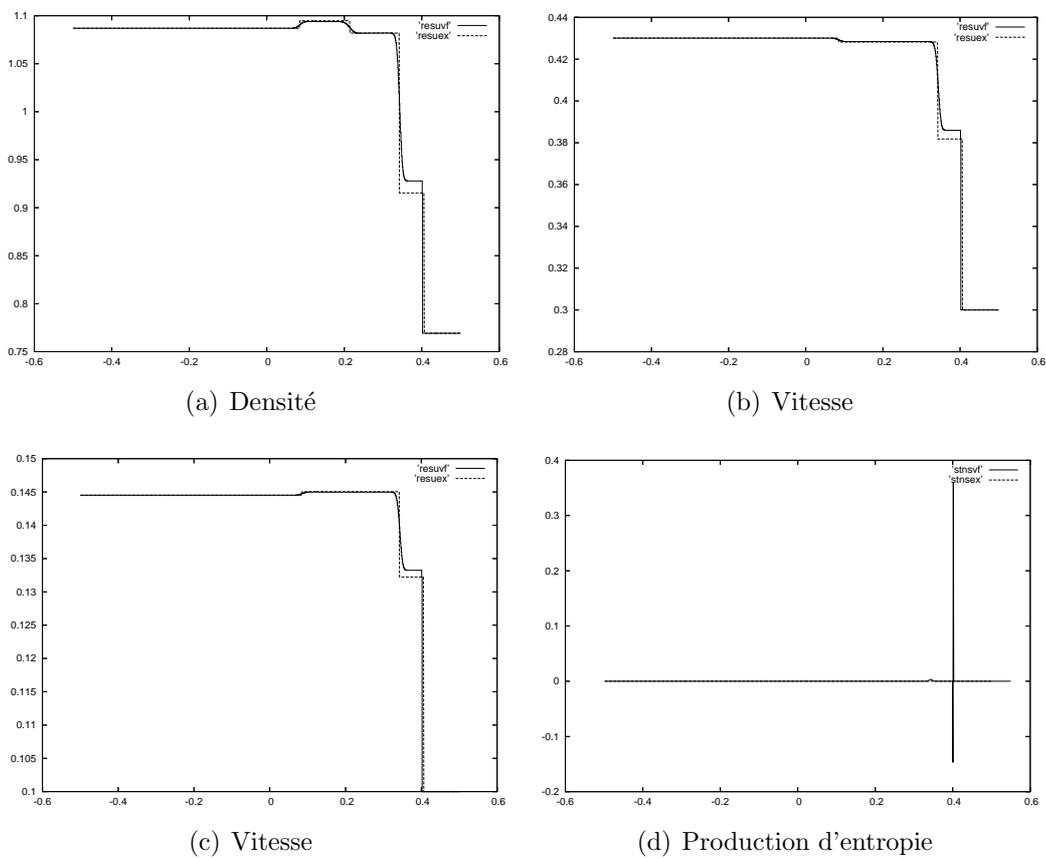
sur les deux mailles, la production est positive, donc à convergence, la solution sera une solution entropique.

CFL	0.9418 ou 0.9419
Nombre de mailles	1000
Intervalle	$[-1/2, 1/2]$
Instant final	$t = 0.5$
Lois de pression	$G_1 = 0.6, \quad G_2 = 0.5$

TAB. 6 – Variables des calculs, loi de transition de phase.

Dans un article [10] reproduit à la fin de la section, j'ai proposé, avec Thomas Barberon, un schéma de relaxation pour l'approximation de ce type de type de problème. L'idée, est de mettre un oeuvre un schéma de décomposition. Chaque pas de temps est décomposé en deux sous-pas de temps. Dans le premier sous-pas, on utilise un schéma de Godunov pour un système diphasique sans changement de phase. Les variables de mélange sont simplement convectées. Il est alors possible de résoudre de façon unique le problème de Riemann. Ce problème de Riemann est beaucoup plus simple à résoudre que le problème avec transition de phase, voir [11], [12]. Dans un deuxième demi-pas de temps, on actualise les variables de mélange en optimisant l'entropie par rapport à celles-ci. Nous avons vérifié

FIG. 7 – Schéma HLL, transition de phase, $CFL = 0.9419$.



numériquement la convergence vers la solution de Liu, ce qui semble assez intuitif, étant donné que chaque demi-pas de temps est par construction entropique.

Dans le même travail, j'ai proposé une loi de pression permettant de prendre en compte le changement de phase de l'eau. Malheureusement, cette loi de pression n'est plus valable au-delà du point critique de l'eau. Dans un travail en cours avec Nicolas Seguin, nous essayons d'étendre le principe d'optimisation de l'entropie pour la prise en compte du point critique.

5.5 Finite volume simulation of cavitating flows

Cette article a été accepté en 2004 à "Computers and Fluids". Il s'agit d'un travail en collaboration avec Thomas BARBERON.

Il peut être téléchargé à l'adresse

<http://helluy.univ-tln.fr/PREPRINTS/transphase.pdf>

6 Écoulements à faible Mach

Depuis quelques mois, j'ai commencé à m'intéresser aux difficultés numériques liées aux calculs des écoulements à faible Mach. Un travail est en cours avec Hervé Guillard de l'INRIA Sophia Antipolis, dans le cadre du projet SMASH

<http://www.inria.fr/recherche/equipes/smash.fr.html>

Dans cette section, je présente quelques résultats de simulation de déferlement de vagues. Ces résultats correspondent à ceux d'un cas-test que j'ai défini à l'occasion du congrès LOMA'04

<http://www-sop.inria.fr/smash/LOMA/>.

Les données précises du cas test peuvent être consultées sur la page web

<http://helluy.univ-tln.fr/soliton.htm>.

Les résultats numériques présentés ont été obtenus en collaboration avec Frédéric Golay.

6.1 Exemple

Dans cette partie, nous nous intéressons au calcul d'un écoulement diphasique particulier : le déferlement d'une vague arrivant sur un récif immergé. Nous allons reprendre le modèle général (8). La loi de pression de mélange sera une loi de gaz raide. Une légère correction doit être apportée au terme source afin de prendre en compte la pesanteur $g = 9.81\text{m.s}^{-2}$. Le modèle est donc le suivant

$$\begin{aligned}
 w &= (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \varphi)^T, \\
 f^1(w) &= (\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u, \rho \varphi u)^T, \\
 f^2(w) &= (\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v, \rho \varphi v)^T, \\
 s(w) &= (0, 0, -\rho g, -\rho v g, 0)^T, \\
 w_t + f^1(w)_x + f^2(w)_y &= s(w), \\
 E &= \varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2}, \\
 p &= (\gamma - 1)\rho\varepsilon - \gamma\pi, \\
 \frac{1}{\gamma - 1} &= \frac{\varphi}{\gamma_a - 1} + \frac{1 - \varphi}{\gamma_b - 1}, \\
 \frac{\gamma\pi}{\gamma - 1} &= \frac{\varphi\gamma_a\pi_a}{\gamma_a - 1} + \frac{(1 - \varphi)\gamma_b\pi_b}{\gamma_b - 1},
 \end{aligned} \tag{128}$$

Les paramètres de la loi d'état sont choisis de façon à respecter le comportement de chaque fluide, air ou eau. Dans ce calcul, le paramètre déterminant est la vitesse du son. Cette vitesse du son, pour la loi des gaz raides, est donnée par

$$c = \sqrt{\frac{\gamma(p + \pi)}{\rho}}. \tag{129}$$

Nous avons choisi d'imposer (arbitrairement) $\gamma_a = \gamma_b = 1.1$ pour l'air et l'eau. Ensuite, le paramètre π est déterminé de façon que la vitesse du son de chaque fluide soit correcte pour une masse volumique et une pression standard. Les valeurs physiques retenues sont indiquées Tableau 7.

Fluide	c	ρ	p	γ	π
Air (a)	$400m.s^{-1}$	$1kg.m^{-3}$	10^5Pa	1.1	0×10^5Pa
Eau (b)	$1600m.s^{-1}$	$1000kg.m^{-3}$	10^5Pa	1.1	0×10^5Pa

TAB. 7 – Loi des gaz raides pour l'air et l'eau.

La géométrie retenue est présentée Figure 8.

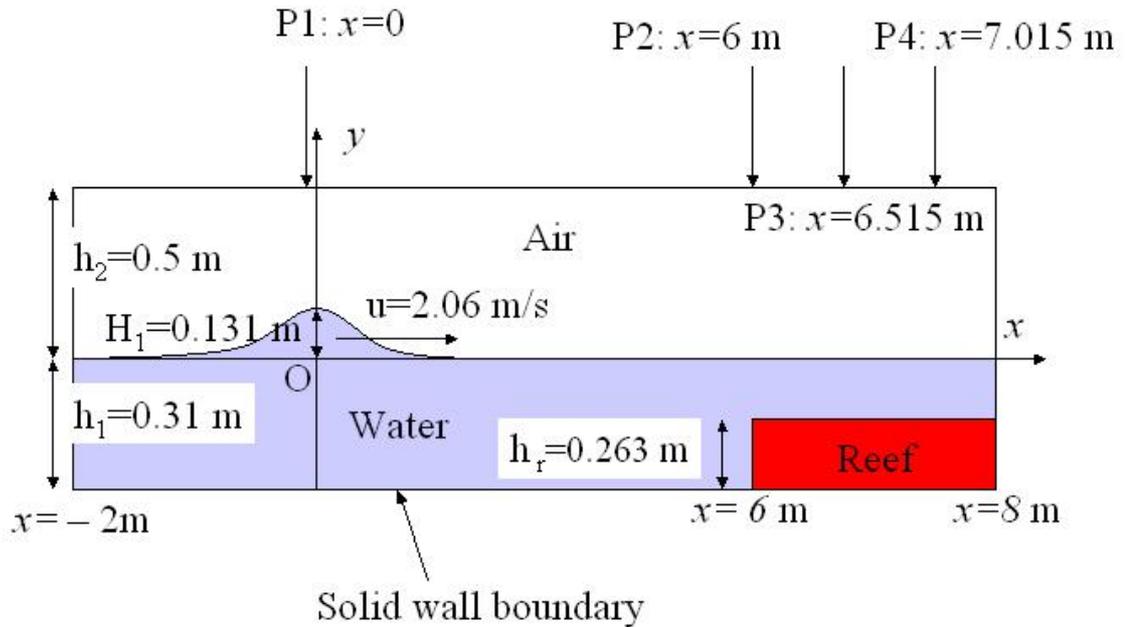
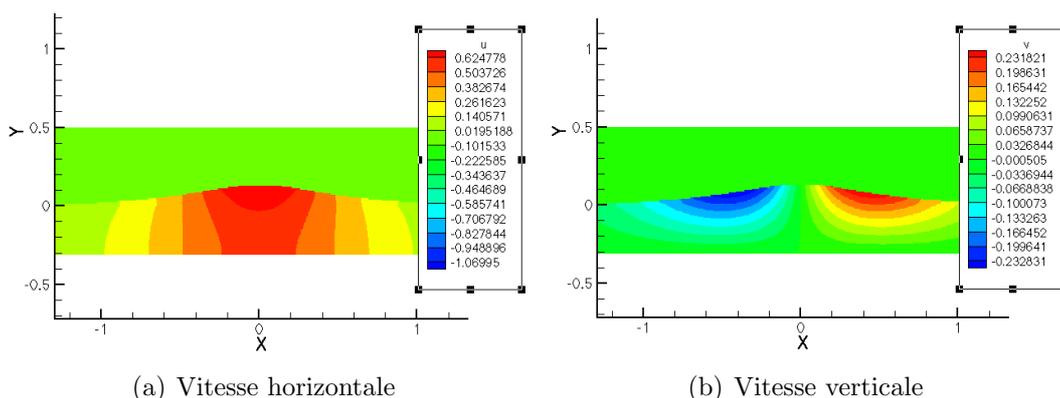


FIG. 8 – Propagation d'un soliton.

Le schéma utilisé est le schéma de Godunov avec la correction d'Abgrall et Saurel. La montée en ordre est décrite au paragraphe 4.3.

La caractéristique principale de cet écoulement est qu'il est très faiblement compressible. D'ailleurs, il est souvent résolu par des méthodes adaptées aux écoulements incompress-

FIG. 9 – Soliton



sibles. Le modèle est alors écrit sous la forme suivante.

$$\begin{aligned}
 u_x + v_y &= 0, \\
 \rho_t + u\rho_x + v\rho_y &= 0, \\
 u_t + uu_x + vu_y + p_x/\rho &= 0, \\
 v_t + uv_x + vv_y + p_y/\rho &= 0.
 \end{aligned} \tag{130}$$

À l'instant initial, au point (x, y) , la masse volumique ne prend que deux valeurs $\rho(0, x, y) = \rho_l$ si le point (x, y) est dans l'eau et $\rho(0, x, y) = \rho_a$ si le point (x, y) est dans l'air. Comme ρ est simplement transportée, cette propriété est encore vérifiée à tout instant ultérieur.

En l'absence de récif, et pour un domaine de calcul infini dans la direction horizontale, il est possible de calculer des solutions particulières, appelées solitons. Le calcul de ces solutions est décrit par Tanaka dans [89]. Sur la Figure 9, sont représentées les composantes horizontales et verticales de la vitesse, ainsi que la forme de la surface libre d'un soliton. Ces champs de vitesse et de masse volumique doivent être convectés à la vitesse du soliton pour obtenir la solution en domaine infini. À l'instant initial, on place la crête du soliton suffisamment loin du récif, pour pouvoir négliger le champ de vitesse près du récif. Ensuite, l'onde solitaire se propage, d'abord comme en domaine infini, puis se déforme à cause du récif et finit par déferler.

De nombreuses méthodes ont été proposées pour le calcul d'écoulements incompressibles. En général, dans ces méthodes, il est nécessaire de résoudre une partie du système par une résolution implicite (souvent de l'équation de pression) ce qui implique une programmation assez lourde.

Il peut donc y avoir certains avantages à conserver le modèle compressible.

6.2 Résultats numériques

Regardons maintenant s'il est possible de résoudre numériquement par une méthode de volumes finis standard le système (128). La première difficulté pratique vient de la condition de CFL. En effet, dans cet écoulement, la matière (l'eau et l'air) se déplace à une

FIG. 10 – Propagation d'un soliton, condition initiale.

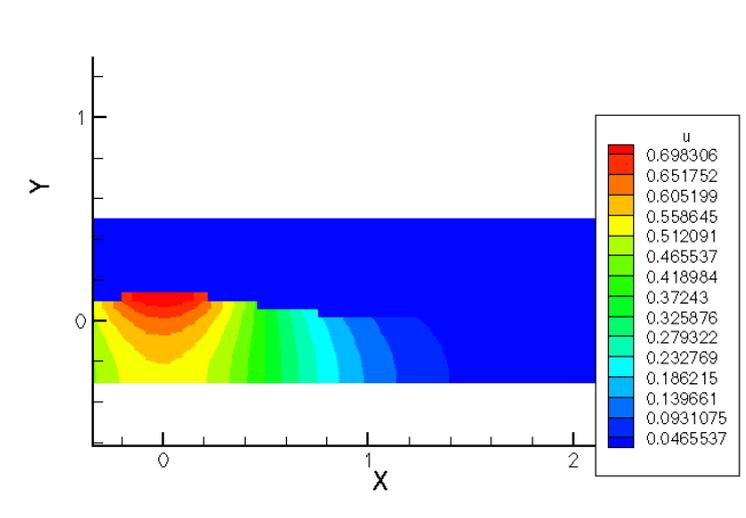
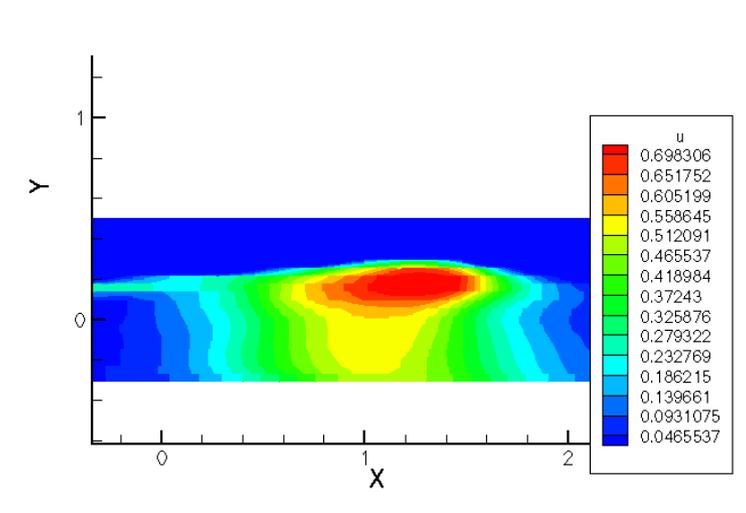


FIG. 11 – Propagation d'un soliton, $c = 20m/s$.



vitesse de l'ordre du mètre par seconde tandis que la vitesse du son est elle de l'ordre de 1000 m/s. L'emploi d'une méthode implicite semble alors indiqué, mais alors on retrouve un des défauts des méthodes incompressibles. De toute façon, même en respectant la condition de CFL, les résultats numériques obtenus seront désastreux.

Sur les Figures 11, 12, 13, on montre un exemple de ce que devient la composante horizontale de la vitesse après une seconde de propagation du soliton. Ces trois figures ont été obtenues en modifiant la vitesse du son c dans l'air et dans l'eau. Elles doivent être comparées à la Figure 10, où est représentée la condition initiale. La solution exacte incompressible correspond à une translation d'un mètre vers la droite de cette condition initiale. Il est clair que la solution est d'autant plus dégradée que la vitesse du son choisie est grande. L'explication de ces résultats calamiteux est principalement que la diffusion numérique des schémas de volumes finis est liée à la vitesse du son dans l'écoulement. Un

FIG. 12 – Propagation d'un soliton, $c = 40m/s$.

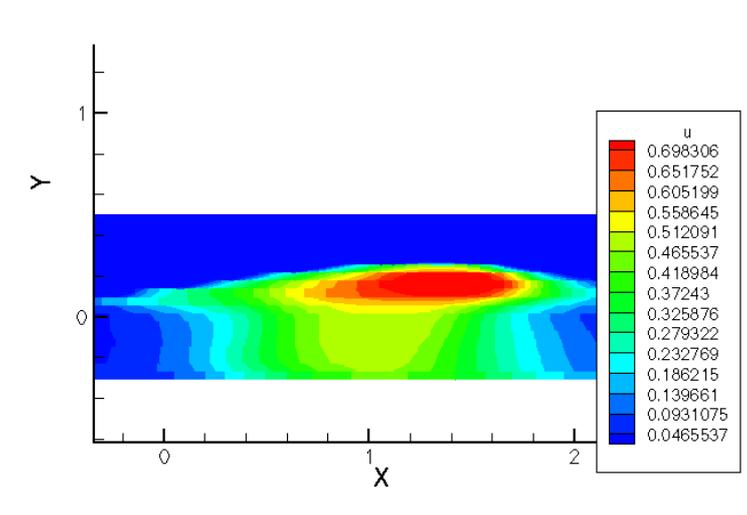
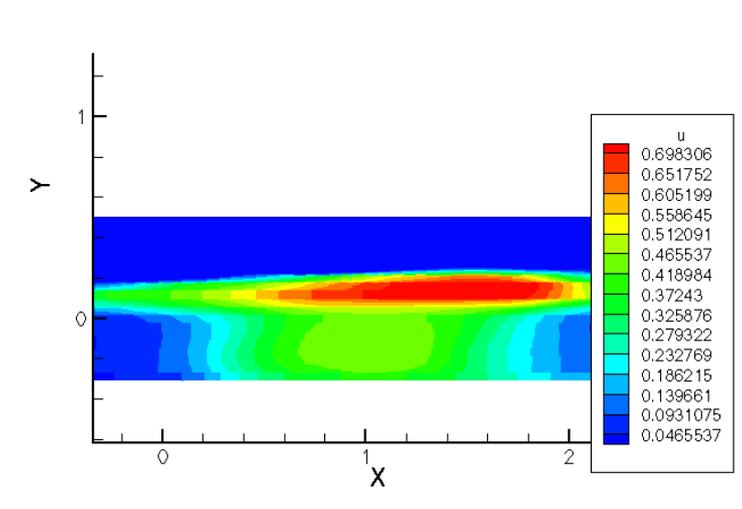


FIG. 13 – Propagation d'un soliton, $c = 100m/s$.



cas typique est le flux numérique de Rusanov qui s'écrit

$$f(u, v) = \frac{f(u) + f(v)}{2} - \frac{a}{2}(v - u), \quad (131)$$

où a est la valeur absolue de la plus grande vitesse d'onde dans le solveur de Riemann. L'amortissement est alors beaucoup trop important comparé aux ondes de contact et les résultats s'en trouvent dégradés.

6.3 Modification de la loi d'état

Il existe un moyen très simple d'améliorer les résultats, proposé par exemple par Chanterperdrix, Vila et Villedieu dans [25]. En physique, on considère qu'un écoulement est incompressible lorsque le nombre de Mach est inférieur à quelque chose de l'ordre de $1/10$. En d'autres termes, entre un écoulement à Mach 0.1 et un écoulement à Mach 10^{-3} , il y aura très peu de différences en terme de champs de vitesse et de masse volumique.

C'est ici que la loi des gaz raides est intéressante car elle permet facilement d'ajuster, par un choix judicieux des coefficients, la vitesse du son.

Nous présentons ci-dessous quelques résultats obtenus avec cette méthode simple, la vitesse du son étant fixée à 20 m/s à pression atmosphérique et pour une masse volumique standard (1000 kg/m^3 pour l'eau et 1 kg/m^3 pour l'air). Les coefficients π pour chaque phase sont déterminés grâce à (129). Sur la Figure 14 on a représenté l'évolution de la hauteur de la surface libre au cours du temps aux jauges P2, P3 et P4 (voir Figure 8). Cette évolution est comparée à des mesures expérimentales effectuées par Yasuda [93]. L'accord est très satisfaisant. Sur la Figure 15, est représentée la masse volumique à un instant postérieur au déferlement. On observe l'apparition de trois rouleaux, emprisonnant chacun une bulle d'air. Malgré la simplicité de l'approche, le "préconditionnement" que nous proposons permet déjà d'obtenir des simulations intéressantes.

7 Perspectives

Dans ce document, j'ai synthétisé mes travaux dans le domaine des volumes finis depuis 1997. J'ai essayé de replacer ces travaux dans le contexte actuel de la recherche en modélisation des écoulements compressibles à plusieurs phases. La conclusion partielle de cette synthèse est que, même pour des modèles très simples, pour lesquelles certains résultats théoriques sont assez faciles à obtenir, il reste encore beaucoup de chose à comprendre et à découvrir sur le plan numérique. Nous avons insisté sur quatre exemples de difficultés :

- les défauts de précision du schéma de Godunov,
- la compréhension du phénomène des oscillations de pression aux interfaces,
- la construction de lois d'état réalistes pour la prise en compte du changement de phases,
- le comportement des schémas à faible Mach.

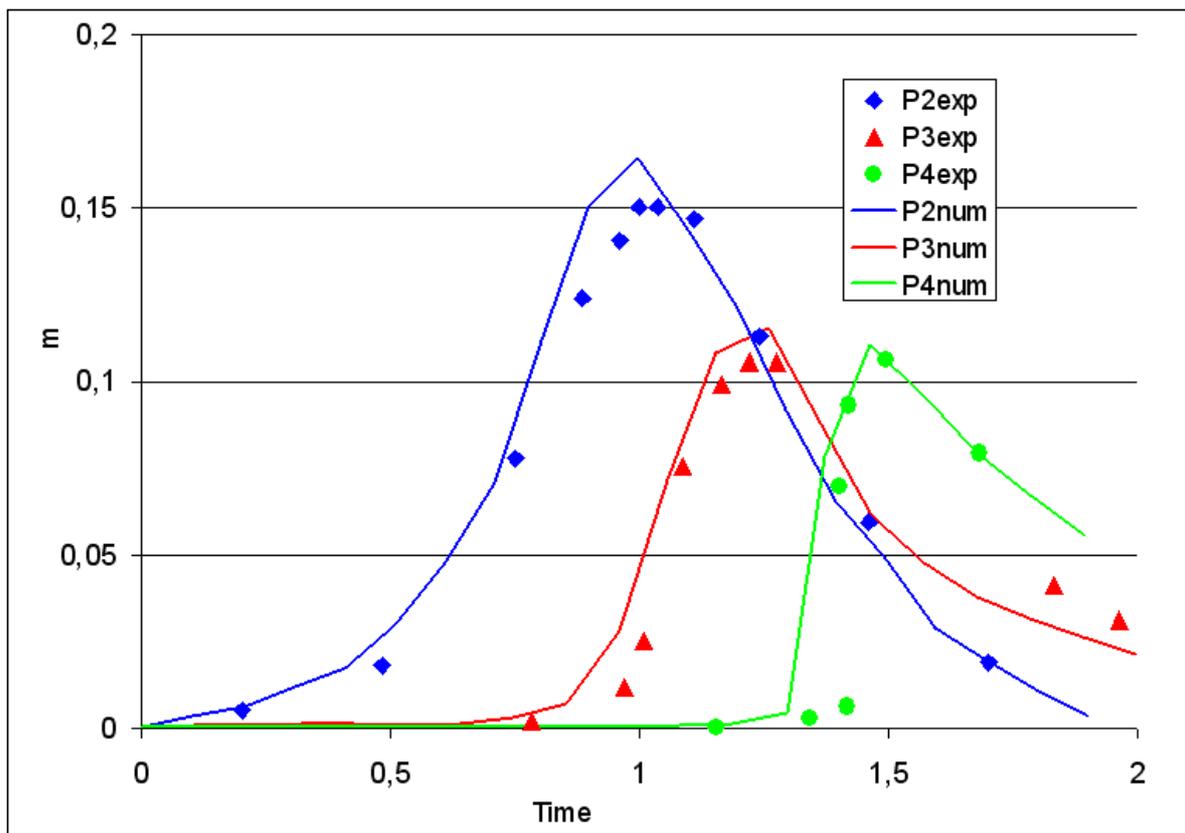


FIG. 14 – *Élévation de la surface libre au cours du temps aux jauges P2, P3 et P4.*

Sur chacun de ces points, il reste encore beaucoup à faire. À l'avenir, je souhaite continuer à travailler sur ce type de sujets, avec l'objectif d'appliquer les méthodes numériques obtenues à des simulations du monde réel.

En janvier 2005, deux nouvelles thèses, que je co-encadre, vont démarrer dans le laboratoire MNC. La première, menée par Julien Nussbaum, à l'Institut de Recherche Franco-Allemand de Saint-Louis, portera sur l'approximation d'un modèle multiphasique pour la balistique intérieure des armes à feu. Dans le modèle retenu, chaque phase a sa vitesse propre. Le modèle à traiter est nettement plus complexe que ceux présentés dans ce document : dans certains cas, il n'est plus hyperbolique, et même lorsque les valeurs propres sont réelles, il peut être résonnant (non diagonalisable). Il présente aussi des termes sources dont l'expression analytique est très complexe. J'espère, à l'occasion de cette thèse, améliorer ma compréhension de ce sujet.

La seconde thèse, de Fabrice Pelestor de la DGA Toulon, concernera l'application des méthodes particulières, couplée à la méthode des volumes finis, pour l'approximation des écoulements avec des réactions chimiques rapides et des lois d'états complexes. Fabrice Pelestor dispose déjà d'un code, qui utilise une méthode de type "Particle-In-Cell". Dans certains cas, les grandeurs physiques sortent de leur domaine de validité. Il faut donc fournir un correctif, ou améliorer le schéma afin de pouvoir obtenir des résultats utiles à l'ingénieur.

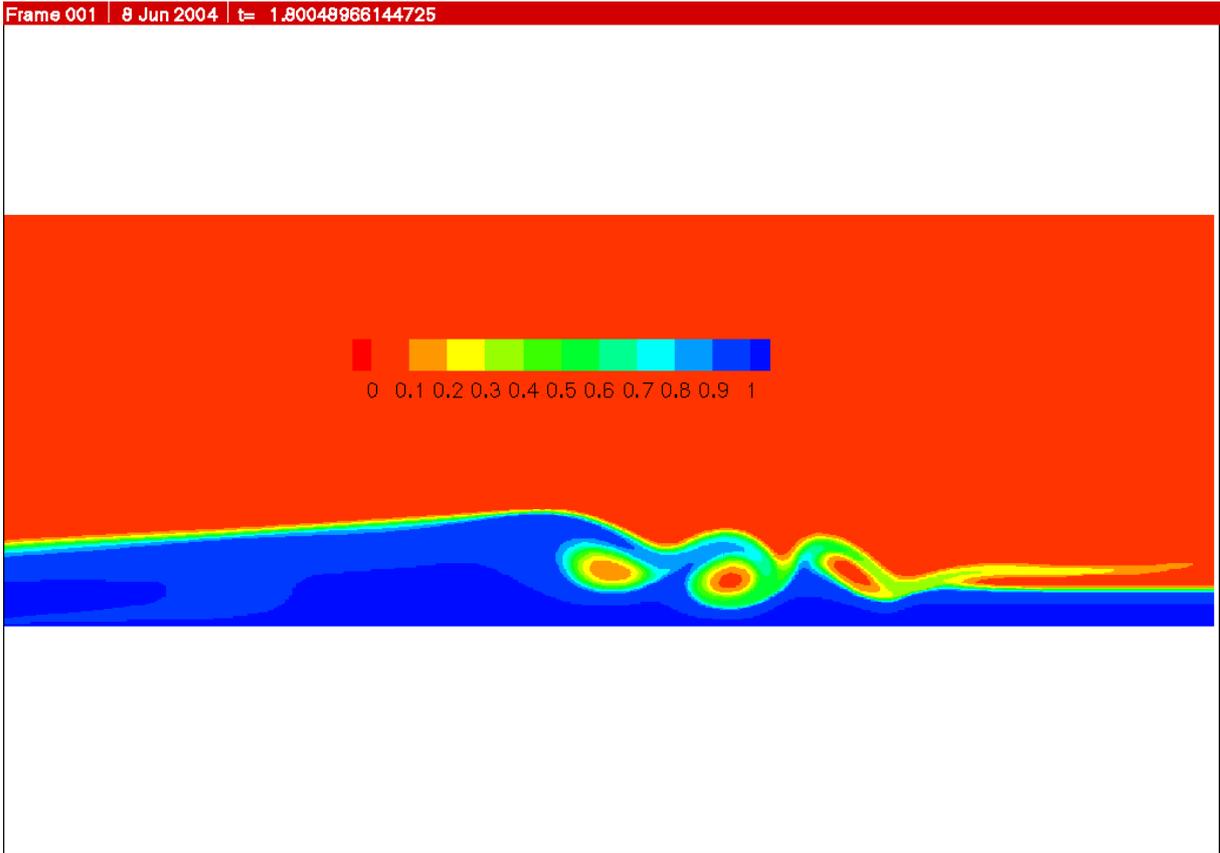


FIG. 15 – Masse volumique à $t = 8s$

Références

- [1] R. Abgrall. Generalisation of the Roe scheme for the computation of mixture of perfect gases. *Recherche Aéronautique*, 6 :31–43, 1988.
- [2] R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi-conservative approach. *J. Comput. Phys.*, 125(1) :150–160, 1996.
- [3] R. Abgrall and S. Karni. Computations of compressible multifluids. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :594–623, 2001.
- [4] Rémi Abgrall. Approximation du problème de Riemann vraiment multidimensionnel des équations d’Euler par une méthode de type Roe. I. La linéarisation. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 319(5) :499–504, 1994.
- [5] Rémi Abgrall. Approximation du problème de Riemann vraiment multidimensionnel des équations d’Euler par une méthode de type Roe. II. Solution du problème de Riemann approché. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 319(6) :625–629, 1994.
- [6] Rémi Abgrall and Ami Harten. Multiresolution representation in unstructured meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6) :2128–2146 (electronic), 1998.
- [7] Rémi Abgrall and Mohamed Mezine. Construction of second order accurate monotone

- and stable residual distribution schemes for unsteady flow problems. *J. Comput. Phys.*, 188(1) :16–55, 2003.
- [8] M. Asch, J.-C. Le Gac, and P. Helluy. An adjoint method for geoacoustic inversions. In *2nd Conference on Inverse Problems, Control and Shape Optimization*. Carthage, Tunisia, 2002.
- [9] T. Barberon. *Modélisation mathématique et numérique de la cavitation dans les écoulements multiphasiques compressibles*. PhD thesis, Université de Toulon, 2002.
- [10] T. Barberon and Helluy. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers and Fluids*, 35(?) :?, 2004.
- [11] T. Barberon, P. Helluy, and S. Rouy. Practical computation of axisymmetrical multifluid flows. *International Journal of Finite Volumes*, 1(1) :1–34, 2003.
- [12] Thomas Barberon and Philippe Helluy. Finite volume simulations of cavitating flows. In *Finite volumes for complex applications, III (Porquerolles, 2002)*, pages 441–448 (electronic). Lab. Anal. Topol. Probab. CNRS, Marseille, 2002.
- [13] Matania Ben-Artzi and Joseph Falcovitz. An upwind second-order scheme for compressible duct flows. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7(3) :744–768, 1986.
- [14] C. Berthon and B. Nkonga. Behavior of the finite volumes schemes in material and numerical interfaces. In *Finite Volumes for Complex Applications III (Porquerolles, 2002)*, pages 139–146. Hermes Penton Ltd, London, 2002.
- [15] Barna L. Bihari and Ami Harten. Multiresolution schemes for the numerical solution of 2-D conservation laws. I. *SIAM J. Sci. Comput.*, 18(2) :315–354, 1997.
- [16] F. Bouchut, Ch. Bourdarias, and B. Perthame. A MUSCL method satisfying all the numerical entropy inequalities. *Math. Comp.*, 65(216) :1439–1461, 1996.
- [17] F. Bourdel, P.-A. Mazet, and P. Helluy. Resolution of the non-stationary or harmonic maxwell equations by a discontinuous finite element method. application to an e.m.i. (electromagnetic impulse) case. In *10th international conference on computing methods in applied sciences and engineering, Paris, february 11-14*, pages 1–18. Nova Science Publishers, Inc., New York, 1992.
- [18] Françoise Bourdel, Jean-Pierre Croisille, Philippe Delorme, and Pierre-Alain Mazet. On the approximation of K -diagonalizable hyperbolic systems by finite elements. Applications to the Euler equations and to gaseous mixtures. *Rech. Aérospat.*, (5) :15–34, 1989.
- [19] A. Bourgeade, Ph. LeFloch, and P.-A. Raviart. An asymptotic expansion for the solution of the generalized Riemann problem. II. Application to the equations of gas dynamics. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 6(6) :437–480, 1989.
- [20] Yann Brenier. Averaged multivalued solutions for scalar conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 21(6) :1013–1037, 1984.

- [21] Yann Brenier. Averaged multivalued solutions and time discretization for conservation laws. In *Large-scale computations in fluid mechanics, Part 1 (La Jolla, Calif., 1983)*, volume 22 of *Lectures in Appl. Math.*, pages 41–55. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1985.
- [22] Yann Brenier. Un algorithme rapide pour le calcul de transformées de Legendre-Fenchel discrètes. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 308(20) :587–589, 1989.
- [23] H. B. Callen. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, second edition*. Wiley and Sons, 1985.
- [24] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 124(2) :449–464, 1996.
- [25] G. Chantepedrix, P. Villedieu, and Vila J.-P. A compressible model for separated two-phase flows computations. In *ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting*. ASME, Montreal, Canada, July 2002.
- [26] Bernardo Cockburn and Chi-Wang Shu. The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws. V. Multidimensional systems. *J. Comput. Phys.*, 141(2) :199–224, 1998.
- [27] Albert Cohen, Nira Dyn, Sidi Mahmoud Kaber, and Marie Postel. Multiresolution schemes on triangles for scalar conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 161(1) :264–286, 2000.
- [28] Albert Cohen, Sidi Mahmoud Kaber, Siegfried Müller, and Marie Postel. Fully adaptive multiresolution finite volume schemes for conservation laws. *Math. Comp.*, 72(241) :183–225 (electronic), 2003.
- [29] F. Coquel, P. Helluy, and J. Schneider. Second order entropy diminishing scheme for the euler equations. soumis à *International Journal for Numerical Methods in Fluids*.
- [30] F. Coquel and B. Perthame. Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6) :2223–2249 (electronic), 1998.
- [31] Frédéric Coquel and Philippe G. LeFloch. An entropy satisfying MUSCL scheme for systems of conservation laws. *Numer. Math.*, 74(1) :1–33, 1996.
- [32] J.-P. Croisille. *Contribution à l'étude théorique et à l'approximation par éléments finis du système hyperbolique de la dynamique des gaz multidimensionnelle et multiespèces*. PhD thesis, Université Paris VI, 1991.
- [33] Árpád Csík, Mario Ricchiuto, and Herman Deconinck. A conservative formulation of the multidimensional upwind residual distribution schemes for general nonlinear conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 179(1) :286–312, 2002.
- [34] Stéphane Dellacherie. Relaxation schemes for the multicomponent Euler system. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(6) :909–936, 2003.

- [35] B. Després, F. Lagoutière, and D. Ramos. Stability of a thermodynamically coherent multiphase model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 13(10) :1463–1487, 2003.
- [36] Bruno Després and Frédéric Lagoutière. Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics. *J. Sci. Comput.*, 16(4) :479–524 (2002), 2001.
- [37] F. Dubois. Partial Riemann problem, boundary conditions and gas dynamics. In *Absorbing Boundaries and Layers, Domain Decomposition Methods. Applications to Large Scale Computations*, Loïc Tournette and Laurence Halpern, eds., pages 16–77. Nova Science Publishers, Inc., New York, 2001.
- [38] F. Dubois and P. LeFloch. Boundary conditions for nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. *J. Differential Equations*, 71(1) :93–122, 1988.
- [39] L. C. Evans. Entropy and partial differential equations. 2004.
- [40] R. P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J. Comput. Phys.*, 152(2) :457–492, 1999.
- [41] Miloslav Feistauer, Jiri Felcman, and Ivan Straskraba. *Mathematical and Computational Methods for Compressible Flow*. Oxford University Press, 2004.
- [42] Thierry Gallouët, Jean-Marc Hérard, and Nicolas Seguin. A hybrid scheme to compute contact discontinuities in one-dimensional Euler systems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 36(6) :1133–1159 (2003), 2002.
- [43] Thierry Gallouët, Jean-Marc Hérard, and Nicolas Seguin. True rate of convergence of some upwinding finite volume schemes for Euler equations. In *Finite volumes for complex applications, III (Porquerolles, 2002)*, pages 731–738 (electronic). Lab. Anal. Topol. Probab. CNRS, Marseille, 2002.
- [44] Edwige Godlewski and Pierre-Arnaud Raviart. *Hyperbolic systems of conservation laws*, volume 3/4 of *Mathématiques & Applications (Paris) [Mathematics and Applications]*. Ellipses, Paris, 1991.
- [45] Edwige Godlewski and Pierre-Arnaud Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, volume 118 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1996.
- [46] S. K. Godunov. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of equations of fluids mechanics. *Math Sbornik*, n 47 :271–306, 1959.
- [47] F. Golay and P. Helluy. Numerical simulation of viscous compressible fluid based on a splitting method. soumis à Num. Meth. P.D.E.
- [48] Jonathan B. Goodman and Randall J. LeVeque. On the accuracy of stable schemes for 2D scalar conservation laws. *Math. Comp.*, 45(171) :15–21, 1985.
- [49] A. Harten, P. D. Lax, and B. Van Leer. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Rev.*, 25(1) :35–61, 1983.

- [50] Ami Harten. ENO schemes with subcell resolution. *J. Comput. Phys.*, 83(1) :148–184, 1989.
- [51] P. Helluy. Couplage équation intégrale-volumes finis pour la résolution des équations de maxwell harmoniques. In *JEE'93, European symposium on numerical methods in electromagnetics, november 17-19th*, pages 217–226. ONERA, UPS, INSA, CER-FACS, Toulouse, 1993.
- [52] P. Helluy. *Résolution numérique des équations de Maxwell harmoniques par une méthode d'éléments finis discontinus*. PhD thesis, Sup'aéro, janvier 1994.
- [53] P. Helluy. Modélisation de la chambre de refroidissement d'un générateur de gaz. Technical report, ISITV, 2002. Contrat de recherche DCN, livraison du logiciel DIVAXI.
- [54] P. Helluy. Quelques exemples de méthodes numériques récentes pour le calcul des écoulements multiphasiques. Thèse de HDR, 2005.
- [55] P. Helluy, F. Golay, and al. Numerical simulation of wave breaking. soumis à M2AN.
- [56] P. Helluy, S. Maire, and P. Ravel. New higher order numeric quadratures for regular or singular functions on an interval, applications for the helmoltz integral equation. In *Second Symposium on Multibody Dynamics and Vibration, september 12-16*. ASME, Las Vegas, Nevada, 1999.
- [57] P. Helluy, P. Mazet, and P. Klotz. Sur une approximation en domaine non borné des équations de Maxwell instationnaires, comportements asymptotiques. *Rech. Aéropat.*, (5) :365–377, 1994.
- [58] P. Helluy and V. Rey. Modélisation numérique de la houle dans le port de banyuls. Technical report, ISITV, 1998. Contrat de recherche avec la Mairie de Banyuls-sur-mer.
- [59] Philippe Helluy and Sandrine Dayma. Convergence d'une approximation discontinue des systèmes du premier ordre. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 319(12) :1331–1335, 1994.
- [60] Philippe Helluy, Sylvain Maire, and Patrick Ravel. Intégration numérique d'ordre élevé de fonctions régulières ou singulières sur un intervalle. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 327(9) :843–848, 1998.
- [61] Jean-Baptiste Hiriart-Urruty. *Optimisation et analyse convexe*. Mathématiques. [Mathematics]. Presses Universitaires de France, Paris, 1998.
- [62] Jean-Baptiste Hiriart-Urruty and Claude Lemaréchal. *Fundamentals of convex analysis*. Grundlehren Text Editions. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [63] T. Y. Hou and P. G. LeFloch. Why nonconservative schemes converge to wrong solutions : error analysis. *Math. Comp.*, 62(206) :497–530, 1994.

- [64] S. Jaouen. *Étude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. PhD thesis, Université Paris VI, November 2001.
- [65] S. Karni. Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm. *J. Comput. Phys.*, 112(1) :31–43, 1994.
- [66] S. Karni. Hybrid multifluid algorithms. *SIAM J. Sci. Comput.*, 17(5) :1019–1039, 1996.
- [67] L. Landau and Lifchitz E. *Physique statistique*. Physique théorique. Ellipses, Paris, 1994.
- [68] P.D. Lax. Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. In *CBMS Regional Conf. Ser. In Appl. Math. 11*, Philadelphia, 1972. SIAM.
- [69] Peter D. Lax and Xu-Dong Liu. Solution of two-dimensional Riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(2) :319–340 (electronic), 1998.
- [70] P. Lesaint. Continuous and discontinuous finite element methods for solving the transport equation. In *The mathematics of finite elements and applications, II (Proc. Second Brunel Univ. Conf. Inst. Math. Appl., Uxbridge, 1975)*, pages 151–161. Academic Press, London, 1976.
- [71] Meng-Sing Liou and Christopher J. Steffen, Jr. A new flux splitting scheme. *J. Comput. Phys.*, 107(1) :23–39, 1993.
- [72] T. P. Liu. The Riemann problem for general systems of conservation laws. *J. Diff. Equations.*, 56 :218–234, 1975.
- [73] Y. Lucet. A fast computational algorithm for the Legendre-Fenchel transform. *Comput. Optim. Appl.*, 6(1) :27–57, 1996.
- [74] Yves Lucet. Faster than the fast Legendre transform, the linear-time Legendre transform. *Numer. Algorithms*, 16(2) :171–185 (1998), 1997.
- [75] P.-A. Mazet and F. Bourdel. Multidimensional case of an entropic variational formulation of conservative hyperbolic systems. *Rech. Aérospat.*, (5) :369–378, 1984.
- [76] R. Menikoff and B. J. Plohr. The Riemann problem for fluid flow of real materials. *Rev. Modern Phys.*, 61(1) :75–130, 1989.
- [77] W. Mulder, S. Osher, and J. A. Sethian. Computing interface motion in compressible gas dynamics. *J. Comput. Phys.*, 100(2) :209–228, 1992.
- [78] J. Nussbaum. *Écoulement diphasique réactif dans la chambre de combustion d'une arme à feu*. PhD thesis, Université de Toulon, en cours.
- [79] F. Pelestor. *Modélisation numériques d'écoulements multiphasiques par des méthodes particulières*. PhD thesis, Université de Toulon, en cours.

- [80] B. Perthame. Boltzmann type schemes for gas dynamics and the entropy property. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(6) :1405–1421, 1990.
- [81] H. Preston-Thomas. The international temperature scale of 1990 (its90). *Metrologia*, 27(1) :3–10, 1990.
- [82] Jeffrey Rauch. BV estimates fail for most quasilinear hyperbolic systems in dimensions greater than one. *Comm. Math. Phys.*, 106(3) :481–484, 1986.
- [83] P. L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 43(2) :357–372, 1981.
- [84] S. Rouy. *Modélisation mathématique et numérique d’écoulements diphasiques compressibles*. PhD thesis, Université de Toulon, December 2000.
- [85] Sandra Rouy and Philippe Helluy. Mathematical and numerical modeling of a two-phase flow by a level set method. In *Finite volumes for complex applications II*, pages 833–840. Hermes Sci. Publ., Paris, 1999.
- [86] Lionel Sainsaulieu. Finite volume approximate of two-phase fluid flows based on an approximate Roe-type Riemann solver. *J. Comput. Phys.*, 121(1) :1–28, 1995.
- [87] R. Saurel and R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3) :1115–1145, 1999.
- [88] Joseph L. Steger and R. F. Warming. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *J. Comput. Phys.*, 40(2) :263–293, 1981.
- [89] M. Tanaka. The stability of solitary waves. *Phys. Fluids*, 29 :650–6555, 1986.
- [90] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, 2nd edition*. Springer, 1999.
- [91] E. H. van Brummelen and B. Koren. A pressure-invariant conservative Godunov-type method for barotropic two-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 185 :289–308, 2003.
- [92] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. a second order sequel to the godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32 :101–136, 1979.
- [93] T. Yasuda, H. Mutsuda, and N. Mizutani. Kinematic of overtuning solitary waves and their relations to breaker types. *Coastal Engineering*, 29 :317–346, 1997.

8 Notice individuelle

Cursus

Philippe HELLUY
Né le 1/6/1968 à Trêves (ex RFA)
Nationalité française
Marié, 2 enfants
ISITV, Laboratoire MNC, BP 56
83162 La Valette CEDEX
helluy@univ-tln.fr
<http://helluy.univ-tln.fr>



Situation Professionnelle

- Depuis septembre 1994 : Maître de Conférence en Mathématiques Appliquées à l'Institut des Sciences de l'Ingénieur de Toulon et du Var (ISITV).
- 1993-1994 : ATER 26 à l'Université Paul Sabatier de Toulouse.

Diplômes

- janvier 2005 : Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Toulon.
- 1990-1993 : Doctorat de l'École Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace. Spécialité mathématiques appliquées : *Résolution numérique des équations de Maxwell harmoniques par une méthode d'éléments finis discontinus*. Soutenue en janvier 1994.
- 1989/90 : DEA de Mathématiques Appliquées de l'Université Paul Sabatier de Toulouse
- 1987/90 : École Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace (Sup'Aéro)

Recherche

- Modélisation mathématique et numérique des écoulements multiphasiques compressibles.
- Méthodes numériques pour l'acoustique et l'électromagnétisme.

Publications

Articles

- P. Helluy, P. Mazet, and P. Klotz. Sur une approximation en domaine non borné des équations de Maxwell instationnaires, comportements asymptotiques. *Rech. Aérospat.*, (5) :365–377, 1994

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/aero94.pdf>

- Philippe Helluy and Sandrine Dayma. Convergence d'une approximation discontinue des systèmes du premier ordre. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 319(12) :1331–1335, 1994

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/cras94.pdf>

- Philippe Helluy, Sylvain Maire, and Patrick Ravel. Intégration numérique d'ordre élevé de fonctions régulières ou singulières sur un intervalle. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 327(9) :843–848, 1998

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/cras98.pdf>

- T. Barberon, P. Helluy, and S. Rouy. Practical computation of axisymmetrical multifluid flows. *International Journal of Finite Volumes*, 1(1) :1–34, 2003

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/axigen.pdf>

- T. Barberon and Helluy. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers and Fluids*, 35(?) :?, 2004

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/transphase.pdf>

Actes de colloques

- F. Bourdel, P.-A. Mazet, and P. Helluy. Resolution of the non-stationary or harmonic maxwell equations by a discontinuous finite element method. application to an e.m.i. (electromagnetic impulse) case. In *10th international conference on computing methods in applied sciences and engineering, Paris, february 11-14*, pages 1–18. Nova Science Publishers, Inc., New York, 1992

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/inria92.pdf>

- P. Helluy. Couplage équation intégrale-volumes finis pour la résolution des équations de maxwell harmoniques. In *JEE'93, European symposium on numerical methods in electromagnetics, november 17-19th*, pages 217–226. ONERA, UPS, INSA, CERFACS, Toulouse, 1993

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/jeee93.pdf>

- Sandra Rouy and Philippe Helluy. Mathematical and numerical modeling of a two-phase flow by a level set method. In *Finite volumes for complex applications II*, pages 833–840. Hermes Sci. Publ., Paris, 1999

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/fvca2.pdf>

- P. Helluy, S. Maire, and P. Ravel. New higher order numeric quadratures for regular or singular functions on an interval, applications for the helmoltz integral equation. In *Second Symposium on Multibody Dynamics and Vibration, september 12-16*. ASME, Las Vegas, Nevada, 1999
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/asme99.pdf>
- Thomas Barberon and Philippe Helluy. Finite volume simulations of cavitating flows. In *Finite volumes for complex applications, III (Porquerolles, 2002)*, pages 441–448 (electronic). Lab. Anal. Topol. Probab. CNRS, Marseille, 2002
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/fvca3.pdf>
- M. Asch, J.-C. Le Gac, and P. Helluy. An adjoint method for geoacoustic inversions. In *2nd Conference on Inverse Problems, Control and Shape Optimization*. Carthage, Tunisia, 2002
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/acoustic.pdf>

Prépublications

- P. Helluy, F. Golay, and al. Numerical simulation of wave breaking. soumis à M2AN
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/soliton.pdf>
- F. Golay and P. Helluy. Numerical simulation of viscous compressible fluid based on a splitting method. soumis à Num. Meth. P.D.E
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/nastocomp.pdf>
- F. Coquel, P. Helluy, and J. Schneider. Second order entropy diminishing scheme for the euler equations. soumis à International Journal for Numerical Methods in Fluids
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/entropy.pdf>
- P. Helluy. Quelques exemples de méthodes numériques récentes pour le calcul des écoulements multiphasiques. Thèse de HDR, 2005
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/habilitation.pdf>
- P. Helluy. *Résolution numérique des équations de Maxwell harmoniques par une méthode d'éléments finis discontinus*. PhD thesis, Sup'aéro, janvier 1994
<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/THESE.zip>

Encadrement doctoral

- S. Rouy. *Modélisation mathématique et numérique d'écoulements diphasiques compressibles*. PhD thesis, Université de Toulon, December 2000

<http://helluy.univ-tln.fr/THESES/rouy.pdf>

- T. Barberon. *Modélisation mathématique et numérique de la cavitation dans les écoulements multiphasiques compressibles*. PhD thesis, Université de Toulon, 2002

<http://helluy.univ-tln.fr/THESES/barberon.pdf>

- F. Pelestor. *Modélisation numériques d'écoulements multiphasiques par des méthodes particulières*. PhD thesis, Université de Toulon, en cours

- J. Nussbaum. *Écoulement diphasique réactif dans la chambre de combustion d'une arme à feu*. PhD thesis, Université de Toulon, en cours

Contrats de recherche

- P. Helluy and V. Rey. *Modélisation numérique de la houle dans le port de banyuls*. Technical report, ISITV, 1998. Contrat de recherche avec la Mairie de Banyuls-sur-mer

<http://helluy.univ-tln.fr/ADMIN/CV/BANYULS.pdf>

- P. Helluy. *Modélisation de la chambre de refroidissement d'un générateur de gaz*. Technical report, ISITV, 2002. Contrat de recherche DCN, livraison du logiciel DIVAXI