

Analyse des temps CPU

Nous nous intéressons au système gaz–liquide DFM (trois équations). Du point de vue industriel, les méthodes numériques employées sont généralement comparées selon leur précision, leur robustesse et leur rapidité d’exécution. Dans ce chapitre, nous montrons que le schéma de relaxation est plus rapide que le schéma VFRoe–Tacite et nous tentons d’évaluer ce gain par deux moyens : l’analyse de complexité qui détaille le nombre d’opérations à effectuer et l’analyse du temps CPU et sa décomposition.

6.1 Introduction

6.1.1 Contexte

Pour résoudre le système diphasique Tacite gaz-liquide, le schéma numérique de type VFRoe a été implémenté [26] et permet de palier aux désavantages des schémas numériques antérieurs. Pourtant, certains inconvénients subsistent, notamment une robustesse parfois limitée et un temps calcul important.

6.1.2 D’autres tentatives

Du point de vue de la rapidité, une autre stratégie, à la fois au niveau du modèle et au niveau numérique, a montré son efficacité. Il s’agit du modèle NPW associé à un schéma centré implicite pour les termes qui confèrent aux équations leur type parabolique et un schéma décentré explicite pour les termes qui confèrent aux équations leur type hyperbolique[25]. Du fait du caractère partiellement implicite du schéma, les gains en temps calcul sont particulièrement intéressants (jusqu’à 40). Il n’est pas possible de comparer cette approche avec la notre puisque le système d’équations aux dérivées partielles n’est pas le même. Pourtant, nous devons pondérer nos gains par les gains obtenus par d’autres approches.

6.1.3 Méthode proposée

Pour trouver une solution à la double problématique de la robustesse et du temps CPU, nous menons des recherches sur une méthode de relaxation qui pourrait permettre d’y remédier. Le but de ce chapitre est de montrer combien la méthode de relaxation est plus rapide que la méthode VFRoe–Tacite.

Faire l’analyse du temps CPU d’un code scientifique n’est pas simple car le temps CPU d’un programme dépend beaucoup de paramètres très variables :

1. la puissance de la machine utilisée,

2. la finesse du compilateur (ici fortran 90) et son utilisation (avec des options de compilation telle `-O2` ou d'autres),
3. l'ingéniosité du programmeur qui, à une date donnée, produit un code plus ou moins optimisé,
4. la charge de la machine à l'instant considéré,
5. la complexité des calculs mis en œuvre.

Le point qui nous intéresse ici est surtout le dernier, mais les 3 premiers sont très importants dans le temps CPU final.

Par ailleurs, insistons sur le fait que le but de cette thèse n'était pas d'optimiser le programme informatique, devenu assez complexe (environ 20 000 lignes de code). Par conséquent, les mesures de temps CPU affichées ici sont à prendre avec pondération.

Notons qu'il est parfois difficile de mesurer le temps CPU d'un programme, car de nombreux utilisateurs travaillent sur une même machine. C'est en partie pour cette raison que nous avons orienté notre travail vers des études de complexité, indépendantes de ce problème.

La complexité des calculs dépend de :

1. la taille du système à traiter. Nous étudierons ici le système diphasique DFM à $N = 3$ équations.
2. le nombre de mailles I utilisées pour discrétiser la conduite. Il est bien connu que le temps CPU final est une fonction quadratique du nombre de maille.
3. les lois de fermetures. L'évaluation des lois thermodynamiques et hydrodynamiques est très coûteuse en temps calcul.
4. le schéma numérique.

Les schémas numériques que nous utilisons sont de deux types :

1. **Schéma Explicite.** Il est fondé sur le calcul d'un flux numérique sur chaque arête.
2. **Schéma Semi-Implicite linéaire.** Il est fondé sur l'inversion d'un système linéaire constitué de blocs dont la taille est $N = 3$ pour le schéma Tacite et $N = 5$ ou $N = 4$ pour le schéma de relaxation, selon l'implémentation (nous y reviendrons). Le schéma semi-implicite linéaire est construit en deux étapes :
 - (a) construction du système linéaire (cette étape utilise les procédures apparues dans le schéma explicite),
 - (b) inversion du système linéaire par une méthode de Gauss par bande.

Ainsi, pour juger de la complexité d'un schéma explicite, il suffit d'analyser la complexité du calcul d'un seul flux numérique. Par contre, pour juger de la complexité d'un schéma semi-implicite linéarisé, il faut tenir compte du fait que la résolution du système linéaire est importante. L'analyse doit donc en particulier porter sur la taille de cette matrice.

Dans les deux cas, l'attention doit également porter sur le **pas de temps** et l'avantage sera au schéma ayant le plus grand pas de temps.

Mais l'analyse de la complexité ne suffit pas car tous les calculs ne prennent pas le même temps ; ainsi, par exemple, l'évaluation de la pression est, pour la machine, très complexe : en fonction des cas, la pression est soit tabulée, soit issue d'une méthode non-linéaire (Newton par exemple) ou au mieux analytique (dans des cas simplistes). Il est donc nécessaire, dans la pratique, d'évaluer précisément dans la simulation quel temps prend chaque calcul.

Cette étude nous intéresse premièrement pour analyser les résultats de la méthode de relaxation. Notons toutefois qu'un aspect original de ce document est qu'il permet également d'étudier la

complexité du schéma VFRoe–Tacite, étude dont nous ne trouvons pas de trace antérieure dans la bibliographie IFP.

Dans la première partie, nous faisons une analyse algorithmique des deux schémas explicites et dans la seconde des deux schémas semi-implicites linéaires. Dans la troisième partie, nous présentons les temps CPU obtenus dans les problèmes sans et avec conditions limites.

Note au lecteur

De nombreux et parfois fastidieux calculs sont nécessaires pour parvenir aux dénombrements souhaités ici. Pour faciliter la lecture de ce document, nous avons placé en annexe A, dans des figures séparées, les détails des calculs que nous évoquons dans le texte. Une première lecture peut se faire aisément en “sautant” ces détails.

6.2 Éléments de base

La figure 6.2 présente le détail des algorithmes de base utilisés dans notre méthode. Les matrices pleines considérées ici sont les matrices Jacobiennes et les matrices de diffusion de taille entre 3 et 5. Les matrices bande considérées ici sont les matrices liées aux systèmes linéaires impliquées dans les méthodes semi-implicites.

Opérateur	Opérations
$+, -, *, /, \sqrt{}, \max(,), \min(,)$	1
$\bar{\varphi} = \frac{\varphi_{\mathbf{L}} + \varphi_{\mathbf{R}}}{2}, \langle \varphi \rangle = \frac{\varphi_{\mathbf{L}} - \varphi_{\mathbf{R}}}{2}$	2

FIG. 6.1 – Complexité des opérations de base

Opérateur		Opérations
$A.x$	A mat. pleine $N \times N$	$2 N^2$
$A + B$	A, B mat. pleines $N \times N$	N^2
$A.B$	A, B mat. pleines $N \times N$	$2 N^3$
$A.D$	A mat. pleine $N \times N$, D mat. diag N	N^2
$x \text{ tq } A.x = b$	A mat. pleine $N \times N$	$0.67 N^3$ (voir [2])
$x \text{ tq } A.x = b$	A mat. bande $N \times N$, demi-larg. ℓ	$(4\ell^2 + 6\ell + 6)N$
Λ, R	$A.R = \Lambda R$ avec A mat. $N \times N$	$26.33 N^3$ (voir [2])
L	$L.R = \mathbb{I}$, R mat. pleine $N \times N$	N^3

FIG. 6.2 – Complexité des opérations d’algèbre linéaire

Remarque 6.2.1 *En ce qui concerne la matrice bande, on considère ici que le nombre maximal d’éléments non nuls sur une ligne de la matrice (largeur de bande) est $L = 2\ell + 1$. L’algorithme en question est celui du pivot de Gauss pour une matrice bande implémenté dans le code Tacite.*

6.3 Analyse algorithmique des schémas explicites

On propose dans ce paragraphe de calculer la complexité des algorithmes mis en œuvre dans les schémas Tacite et relaxation en dénombrant les opérations nécessaires pour calculer le flux sur une arête pour les deux schémas numériques.

Un schéma explicite d'ordre 1 en espace et en temps, sans termes sources et sans conditions limites est construit sur la mise à jour suivante :

$$\frac{\mathbf{u}_i^{n+1} - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t^n} + \frac{\mathbf{H}_{i+1/2}^{n+1/2}(\mathbf{u}^n) - \mathbf{H}_{i-1/2}^{n+1/2}(\mathbf{u}^n)}{\Delta x_i} = 0 \quad (6.1)$$

Cette mise à jour étant, pour un schéma explicite, la même pour les deux schéma, il suffit de s'intéresser au calcul du flux numérique sur une seule arête :

$$\mathbf{H}_{i+1/2}^{n+1/2}(\mathbf{u}^n) = \mathbf{H}(\mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n) \quad (6.2)$$

6.3.1 Analyse du schéma de relaxation

Nous nous plaçons sur une arête $i + 1/2$ ayant pour états gauche et droit les états des mailles i et $i + 1$. Au début du pas de temps, nous connaissons ρ, χ, q à gauche et à droite. On calcule alors $P, P_\tau, P_v, \sigma, \sigma_Y$, à gauche et à droite. Cela représente **10 évaluations** des fonctions de base.

Le détail de l'algorithme du schéma de relaxation explicite est donné dans les figures (A.1) et (A.2). Le décompte total est effectué dans la figure (6.3).

Évaluations de base	10	
Étape	Opérations	Part/ Total
Calcul de (a, b)	46	40 %
Calcul intermédiaires	6	5 %
Calcul des états intermédiaires	32	28 %
Calcul des valeurs propres	8	7 %
Solution du problème de Riemann	5	4 %
Evaluation du flux	17	16 %
Total	114	100 %

FIG. 6.3 – Nombre d'opérations du schéma de relaxation explicite

6.3.2 Analyse du schéma Tacite

Au début du pas de temps, nous connaissons ρ, χ, q à gauche et à droite. On calcule alors $P, P_\rho, P_\chi, P_q, \sigma, \sigma_\rho, \sigma_\chi, \sigma_q$, à gauche et à droite. Cela représente **16 évaluations** des fonctions de base.

Le détail de l'algorithme du schéma Tacite explicite est donné dans la figure (A.3). Le décompte total est effectué dans la figure (6.4).

6.3.3 Analyse comparée

Les tableaux précédents permettent de comprendre clairement les avantages de la méthode de relaxation en terme de vitesse d'exécution.

La méthode de relaxation ne fait que 10 évaluations des fonction de base alors que la méthode Tacite nécessite 16 évaluations, ce qui fait un rapport de $16/10 \approx 1.6$. La raison mathématique est que pour calculer la matrice Jacobienne, la méthode Tacite a besoin de toutes les dérivées de P et σ alors que la méthode de relaxation n'a besoin que de certaines dérivées. D'un autre point de vue, les évaluations en question font appel aux modules thermodynamique et hydrodynamique du code, modules qui sont très consommateurs de temps.

Évaluations de base	16	
Étape	Opérations	Part/ Total
Calculs intermédiaires	4	0 %
Calcul des Jacobiennes	20	1 %
Calcul des éléments propres	1476	82 %
Calcul des flux physiques	12	1 %
Calcul de la matrice de diffusion	246	14 %
Evaluation du flux	18	2 %
Total	1791	100 %

FIG. 6.4 – Nombre d'opérations du schéma Tacite explicite

La méthode de relaxation ne fait que 114 calcul élémentaires alors que la méthode Tacite en fait 16 fois plus. La raison est que la méthode Tacite utilise des algorithmes de calcul des éléments propres dont la complexité (en $O(N^3)$) est très grande tandis que la méthode de relaxation utilise des calculs peu complexes (en $O(N)$). Notons que pour la méthode Tacite, 84 % des opérations consistent en le calcul des éléments propres.

Le facteur global entre la méthode de relaxation et la méthode Tacite est alors la combinaison entre le coût de l'évaluation des fonctions de base et le nombre d'opérations :

$$Gain = 1.6 \theta + 16 (1 - \theta), \quad \theta \in [0, 1] \quad (6.3)$$

Il est possible de diminuer le coût de calcul des coefficients de relaxation : il suffit pour cela d'enlever la modification de (a, b) permettant d'assurer $\rho > 0$ et $Y \in [0, 1]$ (un grand nombre de cas fonctionneraient sans ces modifications). Le rapport de coût entre le schéma de relaxation et le schéma Tacite est alors $1791/80 \approx 22$. Cette donnée est tout à fait en accord avec les premiers résultats obtenus en 2000-2001 : en effet, ils concernaient des tests avec une loi de glissement nulle et une thermodynamique simpliste (liquide incompressible) pour laquelle les évaluations de base étaient une part très réduite du temps calcul total. C'était une situation très favorable à la méthode de relaxation.

La méthode de relaxation a **un pas de temps Δt deux fois plus grand** que la méthode Tacite. En effet, le schéma Tacite est paramétré par le coefficient de diffusion $k = 2$ qui intervient dans le calcul des valeurs propres, donc du pas de temps.

6.3.4 Variante couplée des coefficients de relaxation

On étudie dans ce paragraphe la variante couplée du calcul de (a, b) sur l'arête $i + 1/2$.

On calcule P , P_τ , P_Y , P_v , σ , σ_τ , σ_Y , σ_v à gauche et à droite. Cela représente **16 évaluations** des fonctions de base. Puis les calculs :

$$\begin{aligned} A &= -P_\tau + P_v^2 - P_Y \sigma_v, & D &= -\sigma_\tau + \sigma_v P_v - \sigma_Y \sigma_v, \\ C &= -P_v P_Y + P_Y \sigma_Y, & B &= \sigma_Y^2 - \sigma_v P_Y, \end{aligned} \quad (6.4)$$

et $\gamma = CD$, à droite et à gauche nécessitent **36 opérations**. Les calculs $\gamma = \sqrt{\max(|\gamma_L|, |\gamma_R|)}$ et,

$$\bar{A} = (\sqrt{2} + 1) \gamma, \quad \bar{B} = (\sqrt{2} - 1) \gamma \quad (6.5)$$

$$\underline{A} = \max(|A_L|, |A_R|), \quad \underline{B} = \max(|B_L|, |B_R|), \quad (6.6)$$

$$a = \sqrt{\bar{A} + \underline{A}}, \quad b = \sqrt{\bar{B} + \underline{B}} \quad (6.7)$$

nécessitent de plus **20 opérations**. Si nous ajoutons les modifications permettant d’assurer la positivité de la densité ainsi que le principe du maximum sur Y , cela fait **90 opérations** au total.

La comparaison avec la méthode découplée est faite dans la figure (6.5).

	Découplée	Couplée
Évaluations de base	10	16
Calcul de (a, b)	46	90
Calcul intermédiaires	6	6
Calcul des états intermédiaires	32	32
Calcul des valeurs propres	8	8
Calcul de la solution du problème de Riemann	5	5
Evaluation du flux	17	17
Total	114	158

FIG. 6.5 – Deux variantes pour les coefficients de relaxation

On constate que la variante découplée du calcul est très économique à deux points de vue : d’abord on évalue moins les fonctions de base, ensuite on effectue moins de calcul pour obtenir les coefficients de relaxation, ce qui a une influence importante sur le nombre total d’opérations nécessaires pour évaluer le flux numérique.

6.4 Analyse algorithmique des schémas semi-implicite linéaires

Nous nous intéresserons à l’analyse algorithmique d’un schéma semi-implicite linéarisé d’ordre 1 en espace et en temps, sans termes sources ni conditions limites. Rappelons que nous notons I le nombres de mailles.

Un schéma implicite linéaire peut être vu en trois temps.

1. Étape physique :

$$\mathbf{u}_i^* = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{H}(\mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n) - \mathbf{H}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n)). \quad (6.8)$$

L’état intermédiaire u_i^* apparaît comme un “prédicteur” calculé de façon totalement explicite.

2. Étape mathématique :

$$-\alpha_{i-1}\delta u_{i-1} + \beta_i\delta \mathbf{u}_i + \gamma_{i+1}\delta \mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i^* - \mathbf{u}_i^n. \quad (6.9)$$

Il s’agit ici de la construction du système linéaire.

3. Résolution du système linéaire $A\delta \mathbf{u} = b$.

Il faut noter que le schéma de relaxation semi-implicite linéaire utilise un flux numérique à 5 composantes. La variante “réduite” de la méthode de relaxation semi-implicite linéaire permet de réduire la taille des blocs de 5 à 4, ce qui diminue la largeur de bande du système linéaire complet. Elle a été définie dans l’article précédent [7] et elle est fondée sur l’implication de la projection de la variable relaxée Π . Le détail de l’algorithme de la variante non réduite est présentée dans la figure (A.4) et la variante réduite dans la figure (A.7).

Remarque 6.4.1 *Le nombre d’opérations de la variante réduite est incompressible car il est dû à la largeur de bande du système linéaire qui est une conséquence du fait que nous considérons un schéma :*

1. explicite sur les ondes de vitesse v et $v \pm b\tau$,
2. implicite linéaire sur les ondes de vitesse $v \pm a\tau$.

Cela implique que nous pouvons impliciter la projection de la variable relaxée Π et non celle de la variable relaxée Σ . Cela nous permet tout de même de réduire la taille des blocs du système linéaire de 5 à 4.

Pour dépasser cette limitation, nous serions tenté de choisir un schéma :

1. explicite sur les ondes de vitesse v ,
2. implicite linéaire sur les ondes de vitesse $v \pm b\tau$ et $v \pm a\tau$.

Cela implique que nous pourrions impliciter la projection des variables relaxées Π et Σ et réduire la taille des blocs de 5 à 3. Mais la conséquence néfaste d'impliciter les ondes de vitesse $v \pm b\tau$ est une diffusion numérique plus importante, ce qui n'est pas acceptable. Cela explique pourquoi nous n'utilisons pas une telle technique.

Le détail de l'algorithme du schéma Tacite semi-implicite linéaire sont donnés dans la figure (A.8).

6.4.1 Analyse comparée

Le décompte total est effectué dans la figure (6.6) et la figure (6.7) montre la part de chaque opération dans le total.

	Relaxation	Relaxation réduite	Tacite
Évaluations de base	13 I	13 I	16 I
Étape			
Étape physique	129 I	129 I	1800 I
Étape mathématique	328 I	400 I	558 I
Système linéaire	384 I	244 I	136 I
Total	841 I	773 I	2494 I

FIG. 6.6 – Nombre d'opérations des schémas semi-implicite linéaires

Étape	Relaxation	Relaxation réduite	Tacite
Étape physique	15 %	17 %	75 %
Étape mathématique	39 %	52 %	20 %
Système linéaire	46 %	32 %	5 %
Total	100 %	100 %	100 %

FIG. 6.7 – Part asymptotique de chaque étape dans le total

Nos remarques sont les suivantes.

1. Evaluations. La méthode de relaxation ne fait que 13 évaluations alors que la méthode Tacite nécessite 16 évaluations, ce qui fait un rapport de $16/13 \approx 1.2$.
2. Opérations. Le rapport asymptotique du nombre d'opérations entre la méthode Tacite et la méthode de relaxation réduite est : $2494/773 \approx 3.22$. On constate une diminution importante de ce facteur par rapport au facteur du schéma explicite. La cause est clairement la construction

et la résolution du système linéaire qui interviennent de façon importante dans le décompte total.

La méthode de relaxation réduite (blocs de taille 4) nécessite fois plus de calculs que la méthode Tacite (blocs de taille 3) pour inverser le système linéaire. Pour le schéma Tacite la majeure partie des opérations est effectuée dans l'étape physique alors que pour le schéma de relaxation c'est au contraire l'étape mathématique ainsi que la résolution du système linéaire qui sont coûteuses. Le facteur asymptotique du nombre d'opérations passe à $2494/841 \approx 2.96$ pour la méthode de relaxation non réduite, ce qui est un peu moins favorable que la relaxation réduite.

Le facteur global entre la méthode de relaxation et la méthode Tacite est alors la combinaison entre le coût de l'évaluation des fonctions de base et le nombre d'opérations (RR= relaxation réduite, RNR= relaxation non réduite) :

$$Facteur^{RR} = 1.2 \theta + 3.22 (1 - \theta), \quad (6.10)$$

$$Facteur^{RNR} = 1.2 \theta + 2.96 (1 - \theta), \quad \theta \in [0, 1]. \quad (6.11)$$

Ce facteur est à multiplier par 2 pour tenir compte de l'influence du pas de temps.

6.5 Temps CPU des tubes à choc

Dans ce paragraphe, nous faisons une analyse du temps CPU consommés pendant des expériences portant sur des tubes à choc. Le détail de ces expériences est reporté en annexe A car il n'a pas d'intérêt essentiel dans l'analyse. Nous proposons de comparer les temps obtenus par les différents schémas numériques ainsi que d'analyser la décomposition de ces temps.

Nous considérons des schémas d'ordre 2 en espace et en temps. La méthode de relaxation est ici celle qui utilise un calcul découplé des coefficients de Chapman-Enskog et permettant d'assurer la positivité de la densité ainsi que le principe du maximum sur Y . La méthode de relaxation Semi-Implicite linéaire est la variante réduite.

Dans les deux cas suivants, nous utilisons un liquide incompressible et un gaz compressible, c'est à dire la plus simple des lois thermodynamiques. Nous testons en particulier la sensibilité des algorithmes à la loi hydrodynamique : glissement nul dans le cas 1 ou glissement Zuber-Findlay dans le cas 2. Le détail du cas 1 est donné dans la figure (A.9) et on utilise 200 mailles. Le détail du cas 2 est donné dans la figure (A.10) et on utilise 100 mailles.

6.5.1 Temps CPU

Les temps calcul (en secondes) sont représentés (SIL= Semi-Implicite linéaire) dans la figure (6.8).

	Explicite		SIL	
	Relax.	Tacite	Relax. réduite	Tacite
CAS 1	9.56	93.70	7.27	55.41
CAS 2	21.47	167.66	1.09	4.78

FIG. 6.8 – Temps CPU des 2 cas de tube à choc

On constate des facteurs variant de 8 à 10 pour le schéma explicite et de 4 à 8 pour le schéma Semi-Implicite linéaire.

6.5.2 Décomposition du temps calcul

Les différentes décompositions du temps calcul des schémas semi-implicite linéaires sont donnés dans les figures (6.9–6.10).

	Explicite		SIL	
	Relax.	Tacite	Relax. réduite	Tacite
Evaluations	54 %	12 %	38 %	10 %
Schéma	46 %	82 %	62 %	90 %
Total	100 %	100 %	100 %	100 %

FIG. 6.9 – Part de chaque étape dans le cas 1

	Explicite		SIL	
	Relax.	Tacite	Relax. réduite	Tacite
Evaluations	75 %	24 %	58 %	21 %
Schéma	25 %	76 %	42 %	79 %
Total	100 %	100 %	100 %	100 %

FIG. 6.10 – Part de chaque étape dans le cas 2

Nous constatons que la part relative de l’hydrodynamique et de la thermodynamique est plus importante dans le cas Zuber-Findlay que dans le cas Glissement Nul, ce qui est bien normal. Ainsi, pour le schéma de relaxation explicite cette part passe de 37 % à 58 %. Pour le schéma Tacite Semi-Implicite Linéaire, cette part passe de 10 % à 20 %.

D’autre part, pour le schéma de relaxation, dans le cas Zuber-Findlay, le coût des évaluations est plus important que le coût du schéma. Pour Tacite, c’est le contraire.

Enfin, notons que dans le cas 2, pour le schéma Tacite, 65 % du coût du schéma est imputable au calcul des valeurs propres.

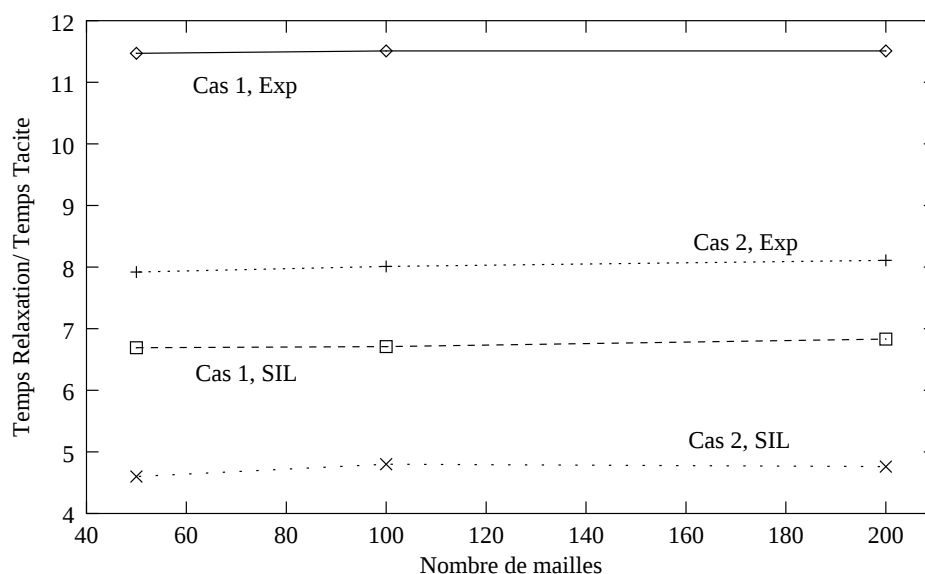


FIG. 6.11 – Rapport des temps CPU

6.5.3 Gain en temps CPU

Nous cherchons maintenant à analyser le rapport des temps CPU de la méthode de relaxation et celui de la méthode Tacite. Nous reportons dans la figure (6.11) ces temps en fonction du nombre de mailles. On constate que, comme l'analyse de complexité le laissait prévoir :

1. le gain du schéma de relaxation Semi-Implicite Linéaire est plus faible que celui du schéma explicite,
2. le gain du schéma de relaxation est d'autant plus faible que l'hydrodynamique est complexe.

6.6 Temps CPU des Problèmes avec conditions limites

Dans ce paragraphe, nous faisons une analyse du temps CPU consommés pendant des expériences portant sur variations des conditions aux limites. Le détail de ces expériences est reporté en annexe A car il n'a pas d'intérêt essentiel dans l'analyse.

6.6.1 Temps CPU

Nous utilisons **50 mailles**, un schéma explicite d'ordre 2 en espace et en temps et une CFL de 0.5 sur les ondes lentes et de 20 sur les ondes rapides. Le code Tacite que nous utilisons ici est le code commercial. On considère les deux expériences dont les détails sont donnés dans les figures (A.11) et (A.12).

	Relaxation	Relax. réduite	Tacite	Tacite /Relax. Réduite
EXP. 1				
Explicite	80.6 s	-	11 min 10 s	8.3
SIL	3.61 s	4.43 s	48 s	10.8
EXP. 2				
SIL	3 min 35 s	3 min 44 s	22 min 9 s	5.9

FIG. 6.12 – Temps CPU des 2 expériences avec Conditions Limites

Nous analysons ici les résultats présentés dans la figure (6.12). On constate, avec étonnement, que la variante réduite est plus lente que la variante non-réduite, point sur lequel nous reviendrons par la suite. Nous observons par ailleurs, pour le schéma Semi-Implicite linéaire, des facteurs variant entre 5 et 11.

6.6.2 Décomposition du temps calcul

Le schéma Tacite décomposé ici est celui développé par l'auteur de ce rapport. Les différentes décompositions du temps calcul des schémas semi-implicite linéaires sont donnés dans les figures (6.13) et (6.14).

On constate que ces résultats numériques ne concordent pas exactement avec les résultats théoriques donnés précédemment. Une raison possible est que l'étape physique comporte en pratique le calcul des *points fictifs*, dont nous n'avons pas tenu compte dans l'étude théorique. Le même problème se pose avec les termes sources qui comptent dans l'étape physique comme dans l'étape mathématique.

Notons que dans le schéma Tacite, l'inversion du système linéaire ne compte quasiment pas.

Étape	Relax	Relax. réduite	Tacite
Évaluations	32 %	36 %	4 %
Étape physique	25 %	25 %	73 %
Étape mathématique	23 %	23 %	22 %
Système linéaire	20 %	16 %	1 %
Total	100 %	100 %	100 %

FIG. 6.13 – Part de chaque étape dans l'expérience 1

Étape	Relax	Relax. réduite	Tacite
Évaluations	42 %	43 %	11 %
Étape physique	36 %	39 %	66 %
Étape mathématique	12 %	12 %	22 %
Système linéaire	10 %	6 %	1 %
Total	100 %	100 %	100 %

FIG. 6.14 – Part de chaque étape dans l'expérience 2

L'expérience 1 utilise un glissement nul et l'expérience 2 un glissement de type Zuber-Findlay, ce que l'on vérifie lors de la décomposition : plus de temps est consommé en évaluations.

On vérifie bien que la relaxation réduite passe un peu moins de temps dans la résolution du système linéaire. On constate par ailleurs qu'elle prend un peu plus de temps en évaluations. Cela peu s'expliquer par les points fictifs qui nécessitent des évaluations supplémentaires, dont nous n'avons pas tenu compte dans les calculs de complexité. Cela explique également les temps CPU défavorables pour la variante réduite de la figure (6.12) car nous n'utilisons que 50 mailles intérieures pour 2 mailles fictives : autrement dit 4 % des mailles sont des mailles de bord !

6.7 Conclusions

Nous avons étudié le schéma numérique VFRoe–Tacite ainsi que le schéma de relaxation du point de vue de la complexité algorithmique et du temps CPU sur des cas tests avec et sans conditions limites. Nous avons trouvé que les facteurs influençant la complexité des schémas explicites sont :

1. les évaluations thermodynamiques et hydrodynamiques. Pour l'évaluation d'un flux sur une arête, le schéma Tacite nécessite 16 évaluations alors que seulement 10 (schéma explicite) ou 13 (schéma semi-implicite linéaire) sont nécessaires au schéma de relaxation.
2. la complexité de mise en œuvre du schéma numérique. Dans le schéma de relaxation explicite, la partie la plus importante (du point de vue du nombre d'opérations) est le calcul des coefficients de relaxation (40 %) et dans le schéma Tacite, la partie la plus importante est le calcul des éléments propres (85 %). Pour l'évaluation d'un flux sur une arête, le schéma Tacite nécessite 16 fois plus d'opérations élémentaires que le schéma de relaxation.
3. le pas de temps. Le schéma Tacite utilise un coefficient de diffusion numérique qui implique que son pas de temps est 2 fois plus petit que celui du schéma de relaxation.

Pour un schéma explicite, le gain théorique varie entre 3 et 30 et le gain pratique entre 7 et 12, selon les lois de fermetures : plus les lois sont complexes, plus le facteur est petit.

En plus des facteurs influençant le schéma explicite, nous avons trouvé que le facteur principal influençant la complexité des schémas semi-implicites linéaires est le coût de construction et d'inversion du système linéaire. Le schéma de relaxation, à cause de la taille des blocs mis en œuvre, nécessite 1.8 fois plus d'opérations pour résoudre le système.

Nous avons optimisé la méthode de relaxation grâce à une technique d'implicitation de la projection qui permet de réduire la taille du système. Les calculs théoriques permettent de constater la supériorité de la variante réduite sur la variante non-réduite. Malheureusement, les tests pratiques ne confirment pas ces calculs à cause du nombre trop faible de mailles utilisées. Nous pensons toutefois que la variante réduite prouvera son utilité lorsqu'on utilisera un nombre de maille plus important.

Pour un schéma semi-implicite linéaire, le gain théorique varie entre 2 et 6 et le gain pratique entre 2 et 10, selon les lois de fermetures.

Chapitre 7

Conclusion de la première partie

Nous avons développé un schéma numérique de relaxation pour la simulation des écoulements diphasiques, isothermes et non compositionnels dans les conduites pétrolières. Ces systèmes sont caractérisés par de très fortes non-linéarités induites par les relations de fermeture sur la pression et la loi de glissement entre les phases. Ces non linéarités rendent très coûteuses les techniques d'approximation usuelles, basées sur la recherche des éléments propres de la matrice Jacobienne des flux.

Nous avons introduit une méthode de relaxation explicite, proposant contrairement aux approches classiques, de ne relaxer que les non linéarités les plus sévères, c'est-à-dire la loi de pression ainsi que la loi de glissement. Cette stratégie permet d'énoncer des critères simples de stabilité de la procédure de relaxation tout en autorisant une évaluation peu coûteuse de la fonction flux numérique. Nous avons porté une grande attention à l'ajustement des coefficients de relaxation, permettant de garantir la stabilité de la méthode ainsi que la positivité des fractions massiques de la solution approchée. Nous avons proposé une extension de cette technique d'approximation au second ordre en temps et en espace. L'intérêt de l'approche a été illustré dans un premier temps en comparant les solutions discrètes aux solutions exactes de problèmes de Riemann. De manière à envisager le cas d'écoulements pétroliers, nous avons étudié un large ensemble de conditions aux limites dans le contexte de la méthode de relaxation. Le traitement proposé a été validé dans le cadre de problèmes réels en comparant nos résultats aux résultats obtenus par Tacite. Un excellent accord a été observé.

Les travaux commencés en mars 2001 ont concerné le développement d'une technique d'implicitation de la méthode de relaxation. La stratégie d'implicitation préconisée a pour but de décrire avec précision les phénomènes de transport de constituants : elle repose sur une méthode d'implicitation sélective des ondes composant le modèle de relaxation. Les ondes rapides (acoustiques) sont implicitées alors que les ondes lentes (ondes de matières) sont explicitées. Nous avons développé une stratégie d'implicitation des termes source de relaxation permettant de réduire la taille du problème matriciel à résoudre tout en permettant une bien meilleure approximation des états transitoires et stationnaires. Le traitement des conditions aux limites a également fait l'objet de travaux. La technique d'intégration temporelle semi-implicite linéarisée a été validée sur les problèmes réels (i.e. en présence de conditions limites) et les résultats obtenus ont été comparé aux résultats du code Tacite avec un excellent accord.

Une étude détaillée de la complexité des algorithmes a montré que celle-ci dépend essentiellement de la complexité

1. des évaluations thermodynamiques et hydrodynamiques,

2. du schéma numérique.

Nous avons montré que le schéma de relaxation explicite est 16 fois moins coûteux que le schéma VFRoe–Tacite et que le schéma de relaxation semi-implicite linéaire est 3 fois moins coûteux. De plus, il doit être noté que le pas de temps du schéma de relaxation est souvent 2 fois plus grand que celui du schéma VFRoe–Tacite. Pourtant, il s'avère que, dans les applications réelles, ce sont les lois de fermeture qui consomment la majeure partie du temps calcul. En pratique, le bilan s'avère positif et le schéma de relaxation est toujours plus rapide que le schéma VFRoe–Tacite avec un gain entre 2 et 20 selon les cas.

Les sujets ouverts concernant ce modèle gaz-liquide concernent la robustesse des conditions aux limites ainsi que les gains en temps calcul.

Nous avons en effet rencontré des obstacles difficiles pour prendre en compte les conditions aux limites. Certes, les travaux de Julien Vovelle [62] et Thierry Gallouët [29] permettent d'avoir des éléments concernant la convergence des schémas numériques dans le cas d'une équation scalaire. Pourtant, dans le cas d'un système d'équations aux dérivées partielles, peu de choses sont connues. En particulier, l'existence du point fictif vérifiant les conditions aux limites n'a pas été démontrée et, en pratique, la convergence de la méthode Newton pose souvent des problèmes de robustesse.

Par ailleurs, nous constatons que les gains en temps calcul sont limités. Or il est possible, en considérant le système d'équations aux dérivées partielles NPW, d'obtenir des gains plus avantageux. Il est pourtant difficile de comparer les temps CPU obtenus par deux modèles différents.

Dans l'état actuel, nous constatons que, dans les simulations de cas réels, le temps CPU est majoritairement consommé par les lois de fermetures. Ainsi, il est certain qu'un travail qui permettrait de diminuer cette part contribuerait beaucoup à diminuer le temps des simulations.

Deuxième partie

**Modèle diphasique isotherme
compositionnel**

Chapitre 8

Introduction

L'approche gaz-liquide est limitée. En effet, selon les physiciens de l'IFP [14], *“aucune méthode fiable et robuste n'ayant été proposée pour prendre correctement en compte le terme de déséquilibre entre les phases, l'approche gaz-liquide n'est pas viable pour traiter les cas présentant d'importants transferts entre phases.”* C'est pourquoi les modèles compositionnels sont généralement utilisés dans le cadre des écoulements dans les conduites pétrolières. Ici, chaque constituant est associé à une loi de conservation et peut se trouver en phase liquide ou gaz. Notre travail consiste alors à construire un schéma numérique capable de traiter un nombre quelconque de constituants et valider notre étude dans le cas particulier du modèle à 2 constituants proposé dans [14].

Plus concrètement, nous devons trouver des remèdes aux problèmes posés par le schéma numérique de type VFRoe existant en particulier vis à vis de 2 points centraux : le coût du schéma numérique et la positivité des fractions massiques des constituants.

Premièrement, nous devons réduire le temps d'exécution de l'algorithme existant. Rappelons qu'il nécessite le calcul des valeurs propres (et vecteurs propres associés) de la matrice Jacobienne du système de lois de conservation, pour chaque maille et pour chaque pas de temps. Or les algorithmes les plus performants sont d'une complexité qui varie comme le cube de la taille du système, ce qui est très contraignant dans les cas pratiques pour lesquels entre 2 et 8 constituants sont modélisés (il s'agit donc d'un système de grande taille). Par ailleurs, il n'est pas possible de démontrer que ces valeurs propres sont réelles, condition pourtant nécessaire à tout schéma numérique traitant les systèmes de lois de conservation hyperboliques.

Deuxièmement, le schéma de type VFRoe ne permet pas d'assurer que les fractions massiques de chaque constituant sont positives. Or il est évident que si ce n'est pas le cas, la thermodynamique ne permet plus d'évaluer la pression car on sort du domaine de définition des lois d'état. Ce problème est résolu pour un fluide à une vitesse grâce aux travaux de Larrouturou [41] mais il n'est pas résolu pour un fluide à 2 vitesses.

Nous évaluons deux classes de méthodes. La première est fondée sur un découplage entre le système gaz-liquide et des lois d'évolution sur les fractions massiques des constituants. La seconde utilise un système couplé (donc de plus grande taille).

Le plan de cette partie est le suivant. Dans la première partie, nous présentons le modèle continu c'est-à-dire le système de lois de conservation ainsi que les lois de fermeture associées. Nous présentons dans cette partie les caractéristiques du modèle thermodynamique à deux constituants utilisé dans cette étude. Dans la seconde partie, nous présentons l'étude des méthodes de relaxation découplées et couplées et nous implicherons cette dernière variante. Puis, nous analyserons la complexité algo-

rithmique de la méthode préservant la positivité ainsi que des résultats numériques obtenus à partir de ce schéma.

Chapitre 9

Modèle continu

Dans ce chapitre, nous décrivons le modèle diphasique isotherme compositionnel que nous étudions. Dans une première partie, nous présentons le système de lois de conservation et ses lois de fermetures et dans une seconde partie nous décrivons le modèle thermodynamique à 2 constituants que nous avons utilisé.

9.1 Modèle et notations

9.1.1 Système de variables

On considère un mélange de K constituants pouvant se présenter en phase liquide et en phase gazeuse, en écoulement monodimensionnel dans une conduite. On indice par k les constituants. On indice respectivement par L et G les variables relatives au liquide et au gaz. Définissons les $11 + 5K$ inconnues par

- $\rho_L^k R_L^k$ (resp. $\rho_G^k R_G^k$), la masse volumique du constituant k sous phase liquide (resp. gaz),
- X_k (resp. Y_k), la fraction massique du constituant k dans la phase liquide (resp. gazeuse)
- c_k , la fraction massique du constituant k ,
- R_L (resp. R_G), la fraction surfacique occupée par la phase liquide (resp. gazeuse),
- ρ_L (resp. ρ_G), la masse volumique de la phase liquide (resp. gazeuse),
- X (resp. Y), la fraction massique de liquide (resp. gaz),
- v_L (resp. v_G), la vitesse de la phase liquide (resp. gaz),
- ρ , la masse volumique du mélange,
- v , la vitesse du mélange,
- p , la pression du mélange.

Introduisons les $7 + 2K$ égalités

$$R_L + R_G = 1, \quad \rho_L R_L = \sum_{k=1,K} \rho_L^k R_L^k, \quad \rho_G R_G = \sum_{k=1,K} \rho_G^k R_G^k, \quad (9.1)$$

$$\rho = \rho_L R_L + \rho_G R_G, \quad \rho X = \rho_L R_L, \quad \rho Y = \rho_G R_G, \quad v = X v_L + Y v_G, \quad (9.2)$$

$$X_k = \frac{\rho_L^k R_L^k}{\rho_L R_L}, \quad Y_k = \frac{\rho_G^k R_G^k}{\rho_G R_G}. \quad (9.3)$$

Les égalités (9.1–9.3) permettent de démontrer

$$\sum_{k=1,K} X_k = 1, \quad \sum_{k=1,K} Y_k = 1, \quad \frac{1}{\rho} = \frac{X}{\rho_L} + \frac{Y}{\rho_G}, \quad X + Y = 1. \quad (9.4)$$

Nous devons de plus respecter les inégalités

$$0 \leq X_k \leq 1, \quad 0 \leq Y_k \leq 1, \quad k = 1, K, \quad (9.5)$$

$$0 \leq X \leq 1, \quad 0 \leq Y \leq 1. \quad (9.6)$$

Remarque 9.1.1 *Le lecteur trouvera de l'intérêt à consulter [61], chapitre 5, qui traite du modèle compositionnel dans l'approximation NPW.*

9.1.2 Équations de conservation

Les équations sont constituées par les K équations de conservation de la masse de chaque constituant plus l'équation de conservation de la quantité de mouvement globale :

$$\begin{cases} \partial_t(\rho c_k) + \partial_x(\rho_L^k R_L^k v_L + \rho_G^k R_G^k v_G) = 0, & k = 1, K, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) = 0. \end{cases} \quad (9.7)$$

On vérifie dans la figure (9.1) que le nombre d'équations est bien égal au nombre d'inconnues grâce aux relations de fermetures hydrodynamique et thermodynamiques.

Équations	Nombre
Égalités (9.1–9.3)	$7 + 2K$ équations
Lois de conservation	$1 + K$ équations
Hydrodynamique	1 équation
Thermodynamique	$2 + 2K$ équations
Total	$11 + 5K$ équations

Inconnues	Nombre
$\{\rho_L^k R_L^k, \rho_G^k R_G^k, X_k, Y_k, c_k\}_{k=1,K}$	$5K$ inconnues
$R_L, R_G, \rho_L, \rho_G, X, Y, v_L, v_G$	8 inconnues
ρ, v, p	3 inconnues
Total	$11 + 5K$ inconnues

FIG. 9.1 – Bilan équations–inconnues

9.1.3 Hydrodynamique

Rappelons que le glissement est la loi qui régit la différence de vitesse entre les phases $\varphi = v_L - v_G$. Nous écrirons le glissement comme une fonction des variables conservatives

$$\varphi = \varphi(\{\rho c_k\}_{k=1,K}, \rho v). \quad (9.8)$$

Il est alors possible de démontrer les égalités :

$$v_L = v + Y\varphi, \quad v_G = v - X\varphi.$$

9.1.4 Thermodynamique

On considère un mélange de K constituants pouvant se présenter en phase liquide et en phase gazeuse. Pendant un certain temps, dit “temps de relaxation”, un phénomène instationnaire a lieu : pour chaque constituant, il y a des échanges de masse entre les phases liquide et gazeuse. Au terme de ce temps de relaxation, l’état stationnaire, ou encore “équilibre thermo-chimique”, est atteint. On peut le modéliser par des relations d’égalité des potentiels chimiques pour chaque constituant en phase liquide et en phase gazeuse.

Les lois de fermeture thermodynamiques calculent les propriétés physiques des fluides, à partir de la pression, la température et de la fraction massique des composants. En ce qui nous concerne, nous considérons que la température est constante $T = T^0$. Les $2 + 2K$ équations thermodynamiques sont

$$\rho_L = \rho_L(p), \quad \rho_G = \rho_G(p), \quad (9.9)$$

$$c_k = X X_k + Y Y_k, \quad \mu_k(p, c_1, \dots, c_K) = \mu(p, c_1, \dots, c_K), \quad k = 1, K, \quad (9.10)$$

où μ et $\{\mu_k\}_{k=1,K}$ sont des potentiels chimiques, que nous ne détaillerons pas ici. Les fractions massiques des constituants vérifient l’égalité

$$\sum_{k=1,K} c_k = 1, \quad (9.11)$$

ainsi que les inégalités

$$0 \leq c_k \leq 1, \quad k = 1, K. \quad (9.12)$$

9.2 Une thermodynamique à deux constituants par phase

Nous donnons dans ce paragraphe un exemple de loi de fermeture thermodynamique adaptée à la résolution du système d’équations aux dérivées partielles et à 2 constituants. Nous fondons notre étude sur [14]. Dans ce cas, le système de lois de conservation se réduit à

$$\begin{cases} \partial_t(\rho c_1) + \partial_x(\rho_L^1 R_L^1 v_L + \rho_G^1 R_G^1 v_G) &= 0, \\ \partial_t(\rho c_2) + \partial_x(\rho_L^2 R_L^2 v_L + \rho_G^2 R_G^2 v_G) &= 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) &= 0. \end{cases} \quad (9.13)$$

Connaissant la variable conservative $\mathbf{u} = (\rho c_1, \rho c_2, \rho v)^T$, le but est de calculer la pression $p = p(\mathbf{u})$. Notons qu’il est toujours possible de calculer ρ grâce à l’égalité $\rho = \rho c_1 + \rho c_2$. Dans ce modèle, le constituant 1 est le constituant *léger* et le constituant 2 est *lourd*. La pression trouve 3 définitions :

- une définition dans le domaine diphasique,
- une définition dans le domaine monophasique liquide,
- une définition dans le domaine monophasique gaz.

Il s’agit donc d’un modèle hétérogène. Le modèle proposée possède la caractéristique suivante : dans le plan $(\rho, \rho c_1)$, les courbes isobares sont des droites. Comme les pentes des droites dans les domaines monophasiques sont différentes de celles dans le domaine diphasique, cela engendrera, comme nous allons le voir par la suite, des difficultés lors de la résolution de problèmes de Riemann impliquant des discontinuités de contact (voir le chapitre consacré aux résultats numériques). Nous constaterons que l’on peut borner les quantités $X_k - Y_k$ pour chaque constituant k , ce qui nous permettra de minimiser les coefficients de relaxation, comme nous le verrons dans le prochain chapitre. Nous

vérifierons que la pression est une fonction continue de $\mathbf{u}$, mais que la dérivée de la pression n'est pas continue.

Nous considérons un modèle isotherme c'est à dire que la température est fixée $T = T^0 = 293$ K.

Comme nous l'avons vu lors du dénombrement des équations, le modèle thermodynamique doit nous fournir, pour 2 constituants, 6 équations. Ici, le modèle remplace la définition de potentiels chimiques par la définition des pressions de bulle et de rosée.

9.2.1 Pression dans le cas général

Considérons notre modèle compressible à 2 constituants. Supposons que $\mathbf{u}$ est connu. Définissons l'ensemble des états admissibles par

$$\Omega = \{ \mathbf{u} \in \mathbb{R}^3 \text{ tq } \rho > 0, c_1 \in [0, 1] \}. \quad (9.14)$$

Caractérisons les zones monophasiques et diphasiques c'est à dire définissons les ensembles (voir figure 9.2)

$$\Omega^L = \{ \mathbf{u} \in \Omega \text{ tq } p_L(\rho) \geq p_{bu}(c_1) \} \text{ (état monophasique liquide),} \quad (9.15)$$

$$\Omega^G = \{ \mathbf{u} \in \Omega \text{ tq } p_G(\rho) \leq p_{ro}(c_1) \} \text{ (état monophasique gaz),} \quad (9.16)$$

$$\Omega^D = \Omega \setminus \{ \Omega^L \cup \Omega^G \} \text{ (état diphasique),} \quad (9.17)$$

où p_L (resp. p_G) est la pression dans un liquide (resp. gaz), p_{bu} (resp. p_{ro}) est la pression de bulle (resp. de rosée), que nous détaillerons par la suite.

Alors, la pression est

$$p = \begin{cases} p_L(\rho) & \text{si } \mathbf{u} \in \Omega^L \text{ (état monophasique liquide),} \\ p_G(\rho) & \text{si } \mathbf{u} \in \Omega^G \text{ (état monophasique gaz),} \\ \text{solution de l'équation non linéaire (9.27) si } \mathbf{u} \in \Omega^D. \end{cases} \quad (9.18)$$

L'équation non linéaire dont la pression est solution dans le domaine diphasique sera détaillée plus loin. Pour l'instant, il suffit de savoir que, dans le domaine diphasique, la pression est solution d'un polynôme de degré 3.

La définition ainsi formulée montre que le modèle est *hétérogène* c'est à dire constitué de l'assemblage de trois modèles différents. La question est alors de savoir de quelle façon ces modèles sont cohérents entre eux, ce qui est le sujet de l'étude qui suit.

9.2.2 Pression liquide, gaz

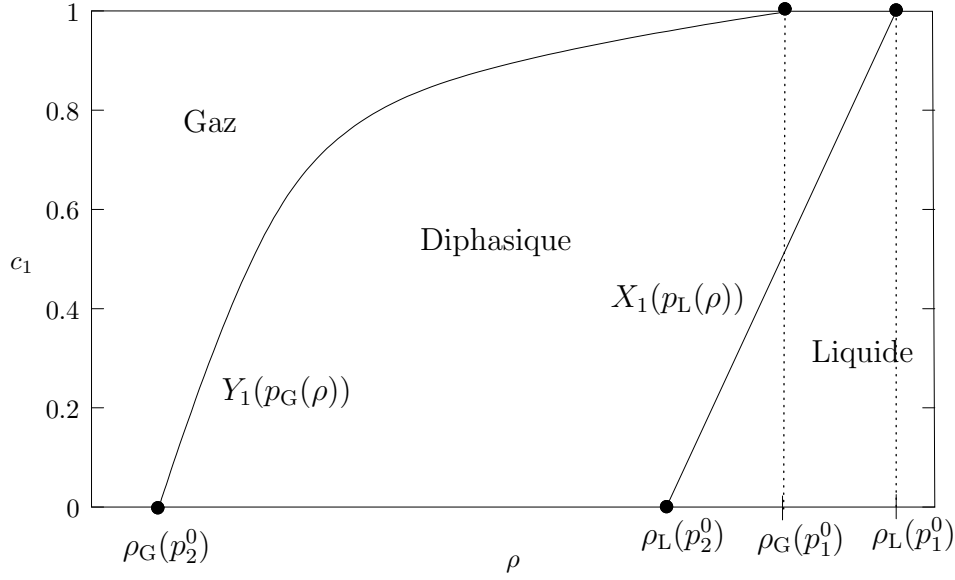
Nous supposons que le liquide (faiblement compressible) et le gaz (parfait) sont soumis aux lois

$$\rho_L(p) = \rho_L^0 + \frac{p - p^0}{a_L^2}, \quad \rho_G(p) = \frac{p}{a_G^2} \quad (9.19)$$

où ρ_L^0, p^0, a_L et a_G sont des constantes données. Nous supposons que $a_G < a_L$. Par ailleurs, nous appellerons liquide incompressible le liquide qui suit la loi $\rho_L(p) = \rho_L^0$.

Notons $p_L(\rho)$ (resp. $p_G(\rho)$) la fonction réciproque de $\rho_L(p)$ (resp. $\rho_G(p)$) c'est à dire

$$p_L(\rho) = p^0 + a_L^2 (\rho - \rho_L^0), \quad p_G(\rho) = a_G^2 \rho. \quad (9.20)$$

FIG. 9.2 – Carte des phases en fonction de (ρ, c_1) à la température $T = T^0$

9.2.3 Pression de bulle, de rosée

Nous définissons p_1^0 et p_2^0 comme les *pressions de saturation* de chaque constituant k qui suivent la *loi d'Antoine*

$$p_k^0(T) = 10^{A_k - \frac{B_k}{C_k + T - 273.15}}. \quad (9.21)$$

Nous définissons la *pression de rosée*, qui correspond à l'apparition de la première goutte de liquide alors que le mélange était monophasique gaz, par

$$p_{ros}(c_1) = \frac{1}{\frac{c_1}{p_1^0(T^0)} + \frac{1-c_1}{p_2^0(T^0)}}, \quad c_1 \in [0, 1]. \quad (9.22)$$

La température T^0 est fixée à 293 degrés Kelvin c'est à dire 20 degrés Celsius. Nous définissons la *pression de bulle*, qui correspond à l'apparition de la première bulle de gaz alors que le mélange était monophasique liquide, par

$$p_{bul}(c_1) = c_1 p_1^0(T^0) + (1 - c_1) p_2^0(T^0), \quad c_1 \in [0, 1]. \quad (9.23)$$

Nous définissons (voir figure 9.3) X_1 et Y_1 par

$$X_1(p) = \frac{\frac{p}{p_1^0} - \frac{p_2^0}{p_1^0}}{1 - \frac{p_2^0}{p_1^0}}, \quad Y_1(p) = \frac{1 - \frac{p_2^0}{p}}{1 - \frac{p_2^0}{p_1^0}}, \quad (9.24)$$

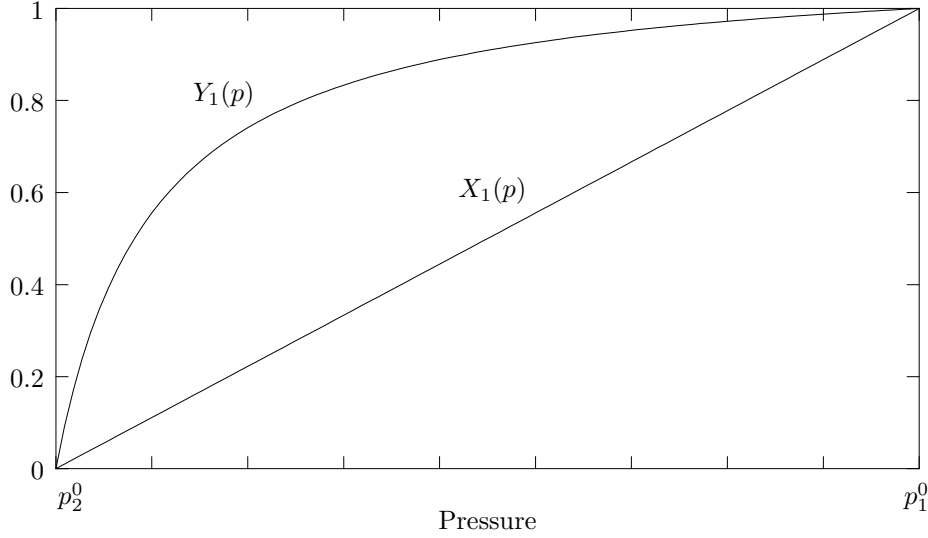
où nous avons omis dans le membre de droite la dépendance vis à vis de la température afin d'alléger l'écriture.

Notons que la pression de rosée (resp. de bulle) est la fonction réciproque de $Y_1(p)$ (resp. $X_1(p)$).

9.2.4 Pression dans le domaine diphasique

Nous définissons par $\mathcal{C}$ la fraction massique du premier constituant par

$$\mathcal{C}(\rho, p) = X_1(p) \mathcal{X}(\rho, p) + Y_1(p) \mathcal{Y}(\rho, p), \quad (9.25)$$

FIG. 9.3 – Loi de Henry pour $X_1(p)$ et $Y_1(p)$ pour la température $T = T^0$

avec $\mathcal{Y}(\rho, p)$ la fraction massique de gaz et $\mathcal{X}(\rho, p)$ la fraction massique de liquide, définies par

$$\mathcal{Y}(\rho, p) = \frac{\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_L(p)}}{\frac{1}{\rho_G(p)} - \frac{1}{\rho_L(p)}}, \quad \mathcal{X}(\rho, p) = 1 - \mathcal{Y}(\rho, p). \quad (9.26)$$

Pour (ρ, c_1) donné, la pression est la solution de l'équation non linéaire

$$\mathcal{C}(\rho, p) - c_1 = 0. \quad (9.27)$$

Une formulation plus précise de cette équation est donnée en annexe B. L'idée principale est que la pression est solution d'un polynôme de degré 3.

Remarque 9.2.1 On suppose que la pression vérifie les inégalités

$$p_2^0(T^0) \leq p \leq p_1^0(T^0), \quad (9.28)$$

de telle sorte que $X_1(p) \in [0, 1]$ et $Y_1(p) \in [0, 1]$.

Dans le domaine diphasique, on a

$$p \in [p_{ros}(c_1), p_{bul}(c_1)], \quad \rho \in [\rho_G(p), \rho_L(p)] \text{ et } c_1 \in [X_1(p), Y_1(p)]. \quad (9.29)$$

Remarque 9.2.2 Le lecteur aura peut-être, dans une première lecture, envie de simplifier les égalités (9.24) car elles ont l'inconvénient de paraître complexes. Il faut toutefois noter qu'elles ont l'avantage de se simplifier dans un cas fort intéressant : le cas où $p_1^0 = \infty$ et $p_2^0 = 0$. Dans cette hypothèse, on peut vérifier qu'on obtient $X_1 = 0$ et $Y_1 = 1$ d'où il suit que $c_1 = Y$ et $c_2 = X$. C'est le cas particulier d'un mélange gaz-liquide dans lequel "le composant 1 se trouve uniquement sous forme vapeur et le composant 2 uniquement sous forme liquide" [14]. Il est rassurant de constater que le système de lois de conservation (9.7) se simplifie également en le système de lois de conservation diphasique.

Remarque 9.2.3 Du point de vue de la rigueur mathématique, la définition implicite de la pression dans le domaine diphasique est faible car elle serait à compléter de 2 théorèmes : un théorème d'existence de la solution et un théorème d'unicité. Faute de conditions sur $(\rho, \rho c_1)$ permettant d'assurer l'existence et l'unicité de la pression, la méthode de Newton permettant de trouver la solution de ce problème non linéaire n'est pas garantie de converger vers une solution physiquement acceptable. Pourtant, en pratique, la méthode de résolution fonctionne correctement.

9.2.5 Courbes isobares

Théorème 9.2.4 *A température constante $T = T^0$, dans le plan $(\rho, \rho Y)$, les courbes isobares sont des droites.*

PREUVE Considérons la courbe isobare associée à la pression $p = \tilde{p}$.

Dans le domaine diphasique, montrons que, dans le plan $\mathbf{z} = (\rho, \rho Y)^T$ les courbes isobares sont des droites. En effet, considérons deux points de l'isobare notés $\mathbf{z}_{\mathbf{L}}, \mathbf{z}_{\mathbf{R}}$. Ils vérifient tous les deux l'égalité (obtenue par réécriture de (9.26)) :

$$\frac{\rho Y}{\rho_{\mathbf{G}}(\tilde{p})} + \frac{\rho - \rho Y}{\rho_{\mathbf{L}}(\tilde{p})} = 1. \quad (9.30)$$

Soit $\mathbf{z}$ un point de la droite $(\mathbf{z}_{\mathbf{L}}, \mathbf{z}_{\mathbf{R}})$ défini par $\mathbf{z} = (\rho, \rho Y)^T = \mathbf{z}_{\mathbf{R}} + \lambda(\mathbf{z}_{\mathbf{L}} - \mathbf{z}_{\mathbf{R}})$ avec $\lambda \in [0, 1]$. Cela implique que $\rho = \rho_{\mathbf{R}} + \lambda(\rho_{\mathbf{L}} - \rho_{\mathbf{R}})$ et $(\rho Y) = (\rho Y)_{\mathbf{R}} + \lambda[(\rho Y)_{\mathbf{L}} - (\rho Y)_{\mathbf{R}}]$. On vérifie alors aisément que $\mathbf{z} = (\rho, \rho Y)^T$ vérifie également l'égalité (9.30) car cette dernière relation est *linéaire* par rapport à ρ et ρY . $\square$

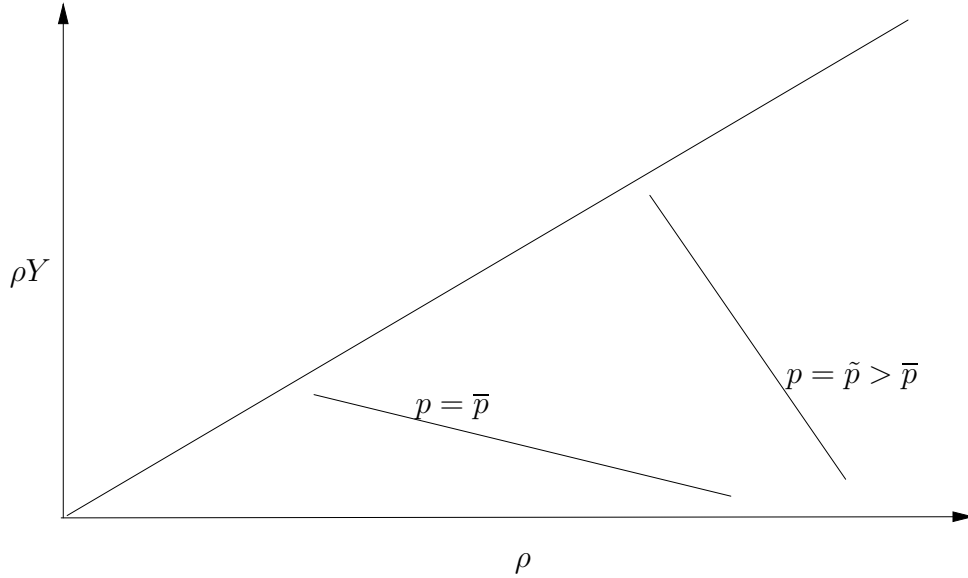


FIG. 9.4 – Courbes isobares dans le plan $(\rho, \rho Y)$

Théorème 9.2.5 *A température constante $T = T^0$, dans chaque domaine $\Omega^{\mathbf{L}, \mathbf{G}, \mathbf{D}}$ du plan $(\rho, \rho c_1)$, les courbes isobares sont des droites.*

PREUVE Supposons que nous considérons courbe isobare associée à la pression $p = \tilde{p}$.

1. Dans le domaine monophasique liquide, la fraction massique du premier constituant est $c_1 = X_1(\tilde{p})$ de telle sorte que ρc_1 est égal à la constante $\rho c_1 = X_1(\tilde{p})\rho_{\mathbf{L}}(\tilde{p})$.
2. Dans le domaine monophasique gaz, la fraction massique du premier constituant est $c_1 = Y_1(\tilde{p})$ de telle sorte que ρc_1 est égal à la constante $\rho c_1 = Y_1(\tilde{p})\rho_{\mathbf{G}}(\tilde{p})$.
3. Dans le domaine diphasique, nous nous inspirons de la démonstration du théorème 9.2.4. L'isobare associée à la pression $\tilde{p}$ est caractérisée par l'égalité

$$X_1(\tilde{p})(\rho - \rho Y(\rho, \tilde{p})) + Y_1(\tilde{p})\rho Y(\rho, \tilde{p}) - \rho c_1 = 0 \quad (9.31)$$

avec $\rho Y(\rho, \tilde{p}) = \frac{1 - \frac{\rho}{\rho_L(\tilde{p})}}{\frac{1}{\rho_G(\tilde{p})} - \frac{1}{\rho_L(\tilde{p})}}$. Là encore, toutes les relations étant linéaires en ρ et (ρc_1) , on vérifie facilement que toute combinaison linéaire de deux points de l'isobare appartient à l'isobare. $\square$

Remarque 9.2.6 La figure 9.5 permet de visualiser une courbe isobare $p = \tilde{p}$ dans le plan $(\rho, \rho c_1)$. On vérifie que les droites ont des pentes différentes selon le domaine. La conséquence de ce fait est que si on place deux points de l'isobare de part et d'autre d'une zone de transition, la ligne droite joignant les deux points n'est plus sur l'isobare. Cette remarque permettra de comprendre en détail les difficultés générées par le modèle thermodynamique lorsqu'on simule une discontinuité de contact.

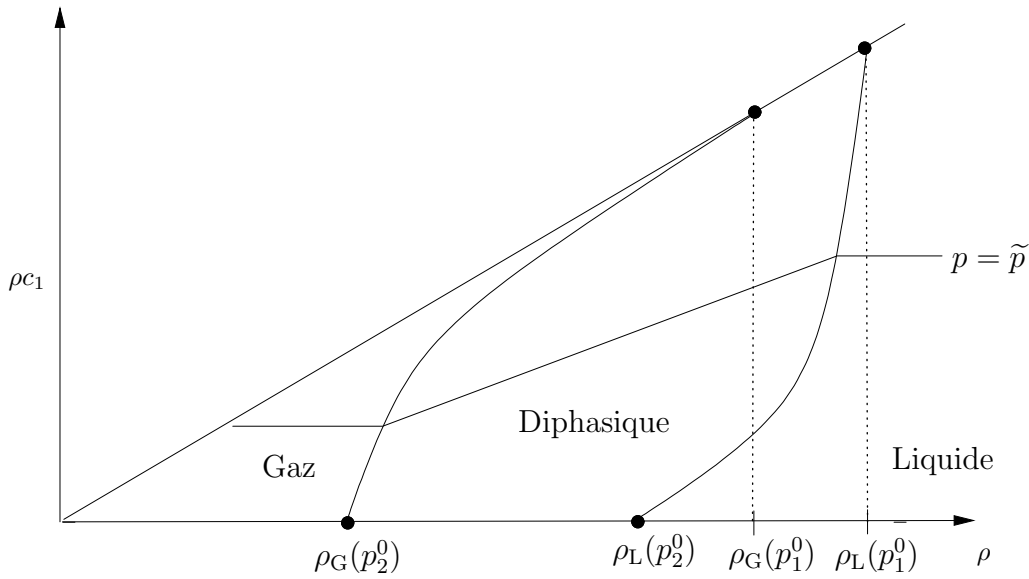


FIG. 9.5 – Une courbe isobare dans le plan $(\rho, \rho c_1)$

9.2.6 Une propriété remarquable

Dans ce paragraphe, nous démontrons une propriété qui nous sera utile dans le cadre du développement de la méthode de relaxation couplée. Cette propriété nous permettra de minimiser les coefficients de relaxation et donc de minimiser la diffusion numérique du schéma. Ce théorème permet de borner, pour chaque constituant k , la quantité $Y_k - X_k$ et il est fondé sur une propriété du modèle thermodynamique à 2 constituants.

Théorème 9.2.7 *Soit*

$$\xi_k = Y_k - X_k, \quad k = 1, K. \quad (9.32)$$

Supposons que

$$0 \leq p_2^0(T^0) \leq p \leq p_1^0(T^0) \quad (9.33)$$

Alors $\xi_1(p) \in [0, 1]$ et $\xi_2(p) \in [-1, 0]$.

Notons tout d'abord que

$$\sum_{k=1,K} \xi_k = \sum_{k=1,K} Y_k - \sum_{k=1,K} X_k = 1 - 1 = 0. \quad (9.34)$$

Par ailleurs, les hypothèses $X_k \in [0, 1]$ et $Y_k \in [0, 1]$ impliquent que $\xi_k \in [-1, 1]$. L'objet du théorème précédent est d'affirmer que, dans ce cas particulier, on peut encore restreindre l'encadrement de ξ_k .

PREUVE Il est facile, par définition de $X_1(p)$ et $Y_1(p)$ (voir 9.24), de réécrire ξ_1 sous la forme

$$\xi_1(p) = \frac{\left(1 - \frac{p}{p_1^0}\right) (p - p_2^0)}{p \left(1 - \frac{p_2^0}{p_1^0}\right)}. \quad (9.35)$$

Il est facile de voir que, pour $p \in [p_2^0, p_1^0]$, on a $\xi_1 \geq 0$. Comme, sous cette hypothèse, on a également X_1 et Y_1 dans $[0, 1]$, on peut conclure que $\xi_1 \in [0, 1]$. Par opposition, on a $\xi_2 \in [-1, 0]$. $\square$

Ces cas particuliers sont l'expression d'un phénomène plus général. En effet, si k est un constituant léger, on aura, *la plupart du temps*, $\xi_k \in [0, 1]$. Par opposition, si k est un constituant lourd, on aura, *la plupart du temps*, $\xi_k \in [-1, 0]$. Nous utiliserons par la suite ces hypothèses pour minimiser les coefficients de relaxation (voir paragraphe 10.2.4).

9.2.7 Exemples de mélanges compositionnels

Les caractéristiques physiques de ce modèle peuvent être trouvés dans des tables [55], [46]. Nous en donnons quelques exemples dans la figure 9.8. Dans ce tableau, l'état (liquide ou gaz), la masse volumique ρ et la vitesse du son c sont données à $T^0 = 20^\circ\text{C}$, $p^0 = 10^5$ (Pa). Les coefficients A , B et C sont ceux intervenant dans la loi d'Antoine (9.21). Il ne nous a pas été possible de nous les procurer pour l'air qui est un mélange de gaz (il est raisonnable de considérer que ceux de l'oxygène en sont proches). La pression de saturation p_{sat} est celle calculée par la loi de Antoine.

La figure 9.7 donne une illustration de la fonction $\mathcal{C}$ avec comme paramètres ceux d'un mélange d'eau et d'oxygène, c'est à dire $\rho_L^0 = 997.10$ (kg/m³), $a_L = 1482$. (m/s), $a_G = 330$. (m/s), $p^0 = 10^5$ (Pa), $p_1^0 = 505.39780.10^5$ (Pa), $p_2^0 = 2349$ (Pa).

La figure 9.6 illustre la fonction masse volumique pour différentes valeurs de c_1 . Les paramètres sont ceux d'un mélange d'eau et d'oxygène, comme précédemment. Elle est une illustration de l'inégalité $\rho_G(p) \leq \rho \leq \rho_L(p)$.

9.2.8 Continuité de la pression

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons à la continuité de la pression et ses dérivées. Comme nous allons le vérifier, la pression est, malgré sa formulation hétérogène, une fonction continue de la variable conservative $\mathbf{u} = (\rho, \rho c_1, \rho v)$. Par contre, nous vérifierons que la dérivée de la pression n'est pas continue à la traversée des zone de transition monophasique–diphasique.

Théorème 9.2.8 *La pression est une fonction continue de $(\rho, \rho c_1)$ sur le domaine Ω .*

PREUVE Il est bien évident que la fonction pression est continue sur chaque domaine : la seule difficulté réside dans les transitions de phase. Démontrons par exemple la continuité de la pression à la transition diphasique – monophasique liquide.

Commençons par remarquer que la zone de transition est caractérisée par l'égalité $p = p_{bu}(c_1)$.

Premièrement, considérons un état monophasique liquide : $\mathbf{u} \in \Omega^L$. Alors la pression est $p(\rho, c_1) = p_L(\rho)$.

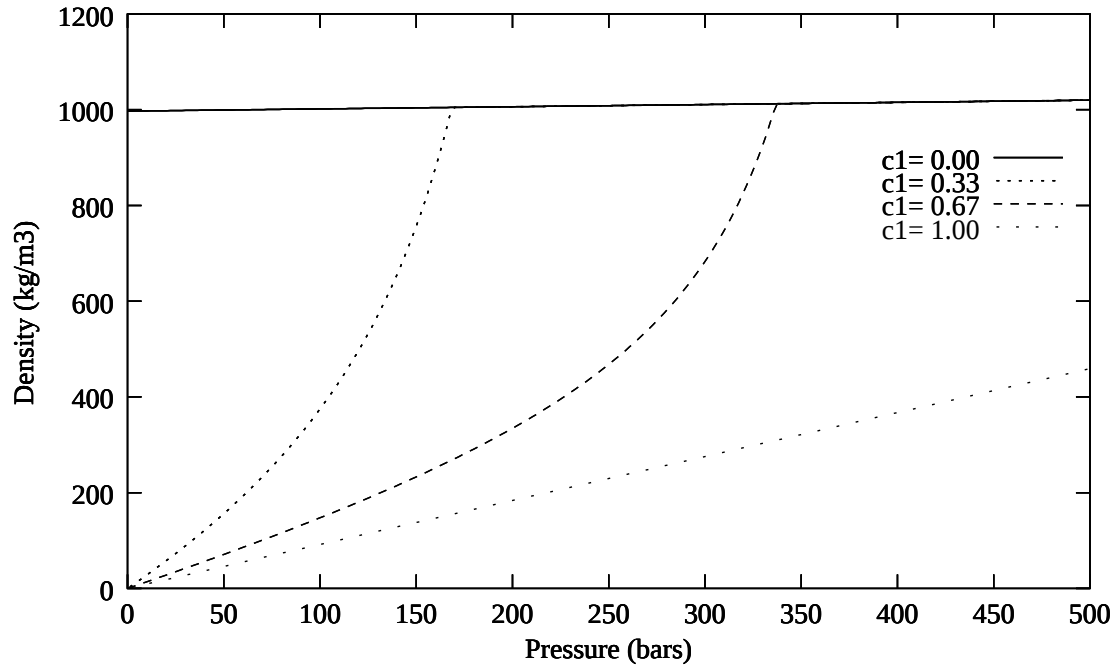


FIG. 9.6 – Densité avec 2 constituants

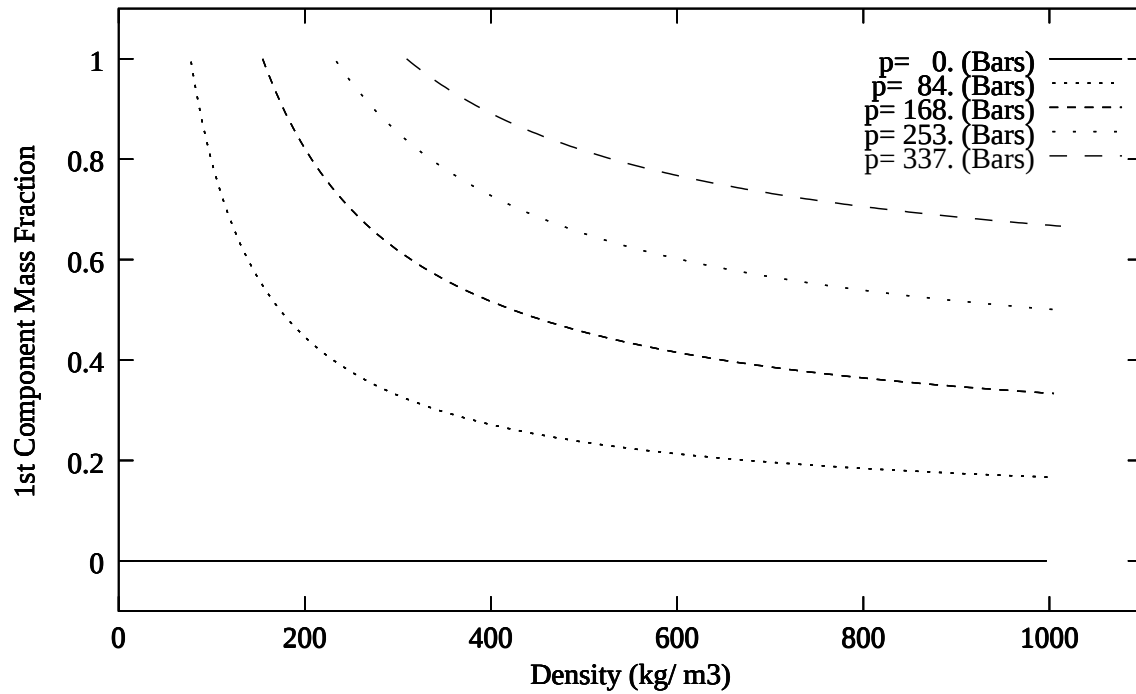


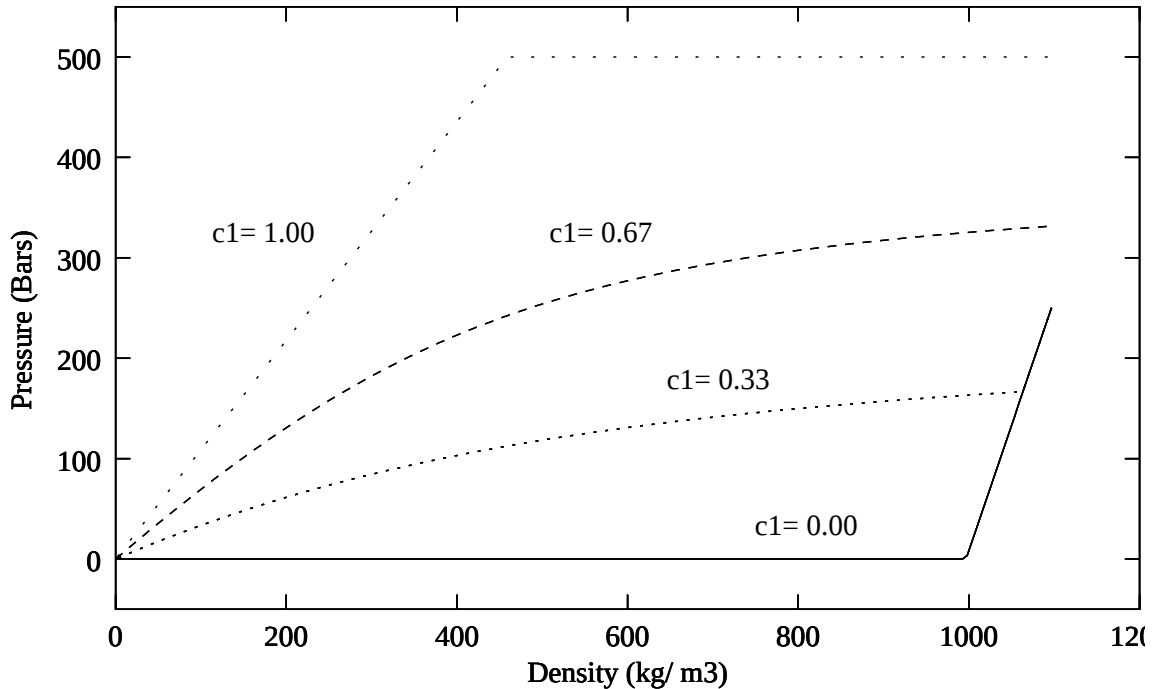
FIG. 9.7 – Fraction massique du premier constituant avec 2 constituants

Nom	Formule	État	ρ (kg/m ³)	c (m/s)	A	B	C	p_{sat} (Pa)
<i>Oxygène</i>	O ₂	Gaz	1.4	330.	3.8163	319.013	266.7	50 539 780.
<i>Air</i>	O ₂ +N	Gaz	1.2	343.	—	—	—	—
<i>Méthane</i>	CH ₄	Gaz	0.68	297.	3.7687	395.7	266.7	24 449 310.
<i>Eau</i>	H ₂ O	Liquide	997.1	1 482.	5.1156	1687.5	230.2	2 349.
<i>Décane</i>	C ₁₀ H ₂₂	Liquide	730.	1 225.	4.0685	1 495.2	193.9	119.
<i>Tétradécane</i>	C ₁₄ H ₃₀	Liquide	762.8	1 200.	4.1379	1 740.9	167.7	1.

FIG. 9.8 – Caractéristiques thermodynamiques de quelques fluides

Deuxièmement, considérons un état diphasique : $\mathbf{u} \in \Omega^D$. Supposons de plus que cet état se trouve dans la zone de transition. Or l'égalité $p = p_{bu}(c_1)$ est équivalente à $c_1 = X_1(p)$. On remarque enfin que la pression $p = p_L(\rho)$ est solution de l'équation (9.27), qui dans le cas où $Y = 0$, se simplifie en $\mathcal{C}(\rho, p) - c_1 = X_1(p) - c_1 = 0$. $\square$

Pour illustrer la continuité de la fonction pression, traçons son évolution en fonction de la densité à c_1 fixé (voir figure 9.9). Elle est régie, dans la zone monophasique liquide, par la loi linéaire $p_L(\rho) = p^0 + a_L^2(\rho - \rho_L^0)$ et, dans la zone diphasique, elle est la racine positive du polynôme de degré trois (B.26). La figure 9.9 montre qu'il est manifeste sur que la dérivée de la pression n'est pas continue à la transition diphasique / monophasique liquide (sur la ligne $\Omega^L \cap \Omega^D$) et c'est ce que nous allons démontrer dans la suite.

FIG. 9.9 – Pression à (c_1, T^0) fixés

Dans le théorème qui suit nous considérons la variable $\mathbf{v} = (\tau, c_1, v)$ avec $\tau = 1/\rho$. Par abus de notation, nous considérons désormais la pression comme une fonction de $\mathbf{v}$.

Théorème 9.2.9 *Considérons la variable $\mathbf{v} = (\tau, c_1, v)$ avec $\tau = 1/\rho$. La dérivée partielle de la*

pression par rapport au covolume τ n'est pas continue à la traversée de la transition diphasique – monophasique liquide.

PREUVE Notons $\mathcal{T} = \Omega^L \cap \Omega^D$ la ligne de transition monophasique liquide / diphasique. Nous allons comparer les valeurs de la dérivée partielle de la pression évaluées de part et d'autre de $\mathcal{T}$.

Dans la zone monophasique liquide, la pression est $p = p_L(\tau)$. Sur la ligne de transition, du côté monophasique liquide, la dérivée partielle de la pression par rapport à $\tau = 1/\rho$ est donc

$$\frac{\partial p}{\partial \tau}(\mathbf{v}) = -\rho^2 a_L^2, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{T} \cap \Omega^L. \quad (9.36)$$

Soit maintenant $\mathbf{v} \in \Omega^D$: la pression est solution de l'équation non linéaire : $c_1[p(p, \tau), \tau] - c_1 = 0$. Par dérivation par rapport à τ , nous trouvons $\frac{\partial c_1}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \tau} + \frac{\partial c_1}{\partial \tau} = 0$ qui se réécrit encore

$$\frac{\partial p}{\partial \tau}(\mathbf{v}) = -\frac{\frac{\partial c_1}{\partial \tau}(\mathbf{v})}{\frac{\partial c_1}{\partial p}(\mathbf{v})}, \quad \forall \mathbf{v} \in \Omega^D. \quad (9.37)$$

Par définition, la fraction massique du premier constituant est $c_1 = X_1(p)X(\tau, p) + Y_1(p)Y(\tau, p)$. Les dérivées partielles valent par conséquent

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = X_1(p) \frac{\partial X}{\partial \tau}(\mathbf{v}) + Y_1(p) \frac{\partial Y}{\partial \tau}(\mathbf{v}), \quad (9.38)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial p} = X_1'(p)X(\mathbf{v}) + X_1(p) \frac{\partial X}{\partial p}(\mathbf{v}) + Y_1'(p)Y(\mathbf{v}) + Y_1(p) \frac{\partial Y}{\partial p}(\mathbf{v}). \quad (9.39)$$

Par définition, la fraction massique de gaz vaut

$$Y(\mathbf{v}) = \frac{\tau - \frac{1}{\rho_L(p)}}{\frac{1}{\rho_G(p)} - \frac{1}{\rho_L(p)}}, \quad \forall \mathbf{v} \in \Omega^D. \quad (9.40)$$

Les dérivées partielles valent par conséquent

$$\frac{\partial Y}{\partial \tau}(\mathbf{v}) = \frac{\rho_L \rho_G}{\rho_L - \rho_G}, \quad \frac{\partial Y}{\partial p}(\mathbf{v}) = \frac{\rho'_G \rho_L (\rho_L / \rho - 1) + \rho'_L \rho_G (1 - \rho_G / \rho)}{(\rho_L - \rho_G)^2}, \quad (9.41)$$

avec $\rho'_G = 1/a_G^2$ et $\rho'_L = 1/a_L^2$.

Considérons, afin de simplifier le résultat, le cas particulier d'un état sur la ligne de transition c'est à dire supposons que $\mathbf{v} \in \Omega^L \cap \Omega^D$. On a alors $Y = 0$ et $\rho = \rho_L(p)$. Les dérivées partielles précédentes se simplifient alors en

$$\frac{\partial Y}{\partial \tau}(\mathbf{v}) = \frac{\rho \rho_G}{\rho - \rho_G}, \quad \frac{\partial Y}{\partial p}(\mathbf{v}) = \frac{\rho'_L \rho_G}{\rho} \frac{\rho - \rho_G}{(\rho - \rho_G)^2}, \quad \forall \mathbf{v} \in \Omega^L \cap \Omega^D. \quad (9.42)$$

Par ailleurs $\frac{\partial Y}{\partial \tau} = -\frac{\partial X}{\partial \tau}$ et $\frac{\partial Y}{\partial p} = -\frac{\partial X}{\partial p}$. Il vient alors

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = (Y_1 - X_1) \frac{\rho \rho_G}{\rho - \rho_G}, \quad \frac{\partial c_1}{\partial p} = X_1'(p) + (Y_1 - X_1) \frac{\rho'_L \rho_G}{\rho} \frac{\rho - \rho_G}{(\rho - \rho_G)^2}, \quad \forall \mathbf{v} \in \Omega^L \cap \Omega^D. \quad (9.43)$$

Par conséquent, la dérivée partielle de la pression par rapport à τ sur l'interface est

$$\frac{\partial p}{\partial \tau}(\mathbf{v}) = -\frac{(Y_1 - X_1) \frac{\rho \rho_G}{\rho - \rho_G}}{X_1'(p) + (Y_1 - X_1) \frac{\rho'_L \rho_G}{\rho} \frac{\rho - \rho_G}{(\rho - \rho_G)^2}}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{T} \cap \Omega^D. \quad (9.44)$$

La comparaison des égalités (9.36) et (9.44) permet de conclure que la dérivée partielle de la pression par rapport à τ n'est pas continue à la traversée de la zone de transition monophasique liquide / diphasique. $\square$

Il est clair qu'il en est de même à la traversée de la zone de transition monophasique gaz / diphasique.