

Complexité des algorithmes

Dans ce chapitre, nous comparons le coût de la méthode de relaxation lorsqu'on considère le système diphasique isotherme compositionnel. Il s'agit ici de la méthode de relaxation préservant la positivité des fractions massiques. Nous comparons cette méthode au schéma Tacite, qui est de type VFRoe et nécessite par conséquent la décomposition en éléments propres de la matrice Jacobienne du système. Dans notre analyse, nous distinguons les évaluations des lois de fermeture et le nombre d'opérations du schéma.

Le plan de ce chapitre est le suivant. Dans la première partie, nous analysons la complexité des schémas explicites. Dans la seconde, nous analysons les schémas semi-implicite linéaires. Enfin, nous concluons.

11.1 Algorithmes explicites

Dans ce document nous ne rappelons pas la construction du schéma Tacite, qui est présenté dans [26] et que nous avons utilisé tout au long de ce travail (voir [10, 8, 9, 4]). Nous nous contentons de reporter ici les résultats de l'analyse des schémas, qui sont présentés dans les figures 11.1 et 11.2 dans lesquelles K représente le nombre de constituants.

Évaluations des lois de fermeture	3 K+1
Étape	Opérations
Calcul de (a, b)	$K + 41$
Calcul auxiliaires	$2 K + 2$
Calcul des états intermédiaires	$12 K + 8$
Calcul des valeurs propres	8
Solution du problème de Riemann	$2 K + 1$
Évaluation du flux	$10 K + 2$
Total	$27 K + 62$

FIG. 11.1 – Nombre d'opérations du schéma de relaxation explicite

Par le terme “évaluations des lois de fermetures”, nous entendons tous les calcul des fonctions pression et glissement ainsi que leur dérivées. Comme nous ne connaissons pas la complexité de ces opérations (qui impliquent généralement des méthodes de Newton), nous ne pouvons rentrer dans le détail de ces calculs et nous nous contentons de comparer le nombre d'appels à ces lois.

Évaluations des lois de fermeture	$4K+2$
Étape	Opérations
Calculs auxiliaires	4
Calcul des Jacobiennes	$6K$
Calcul des éléments propres	$56(K+1)^3$
Calcul des flux physiques	$3K$
Calcul de la matrice de diffusion	$8K^3 + 26K^2 + 32K + 14$
Évaluation du flux	$2K^2 + 9K + 2$
Total	$64K^3 + 196K^2 + 218K + 76$

FIG. 11.2 – Nombre d’opérations du schéma Tacite explicite

On constate que le nombre d’évaluations des lois de fermeture est sensiblement le même, bien que l’avantage revienne tout de même à la méthode de relaxation. C’est bien naturel car la méthode de relaxation ne nécessite de calcul de dérivée que pour le calcul des coefficients de relaxation a et b alors que la méthode Tacite nécessite de calculer la Jacobienne complète du système.

La différence fondamentale entre les deux schémas est le nombre d’opérations qui évolue comme K^3 dans le schéma Tacite et comme K dans le schéma de relaxation. Le gain en nombre d’opération évolue alors comme K^2 , ce qui est considérable (voir figure 11.3). La raison de cette différence est bien évidemment dans le fait que la méthode Tacite nécessite une décomposition en éléments propres, dont la complexité varie selon le cube du nombre de constituants.

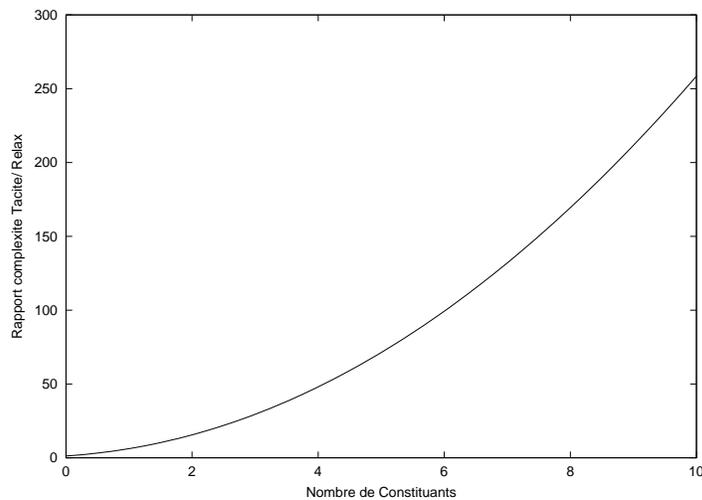


FIG. 11.3 – Étude du rapport (nombre d’opérations Tacite/ relaxation) pour le schéma explicite

11.2 Algorithmes semi-implicite linéaires

Nous comparons dans les figures 11.4 et 11.5 la complexité des schémas semi-implicite linéaires relaxation et Tacite.

Rappelons que la complexité de ces schémas implicites dépend du nombre de mailles noté I .

Évaluations des lois de fermetures	$(4K + 3)I$
Étape	Opérations
Étape physique	$(33K + 65)I$
- Flux numériques	$(27K + 62)I$
- Mise à jour	$(6K + 3)I$
Étape mathématique	
- Matrice de diffusion	$(22K + 45)I$
- Jacobiennes modifiées	$(16K + 54)I$
- Matrices α, β, γ	$(20K^2 + 22K + 6)I$
- Second membre	$(2K + 1)I$
- Réduction	$24K^2 I$
Système linéaire	$(64K^2 - 8K + 4) I$
Total	$(108K^2 + 120K + 240) I$

FIG. 11.4 – Nombre d'opérations du schéma de relaxation semi-implicite linéaire

Évaluations des lois de fermetures	$(4K + 2)I$
Étape	Opérations
Étape physique	$(64K^3 + 196K^2 + 218K + 80)I$
- Flux numériques	$(64K^3 + 196K^2 + 215K + 77)I$
- Mise à jour	$(3K + 3)I$
Étape mathématique	
- Matrice de diffusion	$(8K^3 + 35K^2 + 50K + 23)I$
- Jacobiennes modifiées	$(4K^3 + 16K^2 + 22K + 10)I$
- Matrices α, β, γ	$(4K^3 + 14K^2 + 16K + 6)I$
- Second membre	$(5K^2 + 11K + 6)I$
- Réduction	$(K + 1)I$
Système linéaire	$(16K^2 + 28K + 16)I$
Total	$(72K^3 + 247K^2 + 296K + 119)I$

FIG. 11.5 – Nombre d'opérations du schéma Tacite semi-implicite linéaire

On constate que le nombre d'évaluations des lois de fermeture est sensiblement le même.

La différence fondamentale est le nombre d'opérations qui évolue comme K^3 dans le schéma Tacite et comme K^2 dans le schéma de relaxation. On constate que la complexité du schéma de relaxation a augmenté (dans le schéma explicite, elle évoluait comme K). En réalité, c'est bien naturel puisqu'on doit construire le système linéaire à inverser et donc calculer de l'ordre de K^2 termes.

Le gain en nombre d'opération par rapport au schéma Tacite évolue alors comme K , ce qui est très intéressant (voir figure 11.6). Notons que nous présentons par la suite les résultats du schéma pour seulement 2 constituants, ce qui ne permet pas de constater des gains très intéressants. Ce ne sera pas le cas dans la pratique, auquel cas on utilise entre 5 et 10 constituants. Les gains seront alors plus attractifs pour la méthode de relaxation.

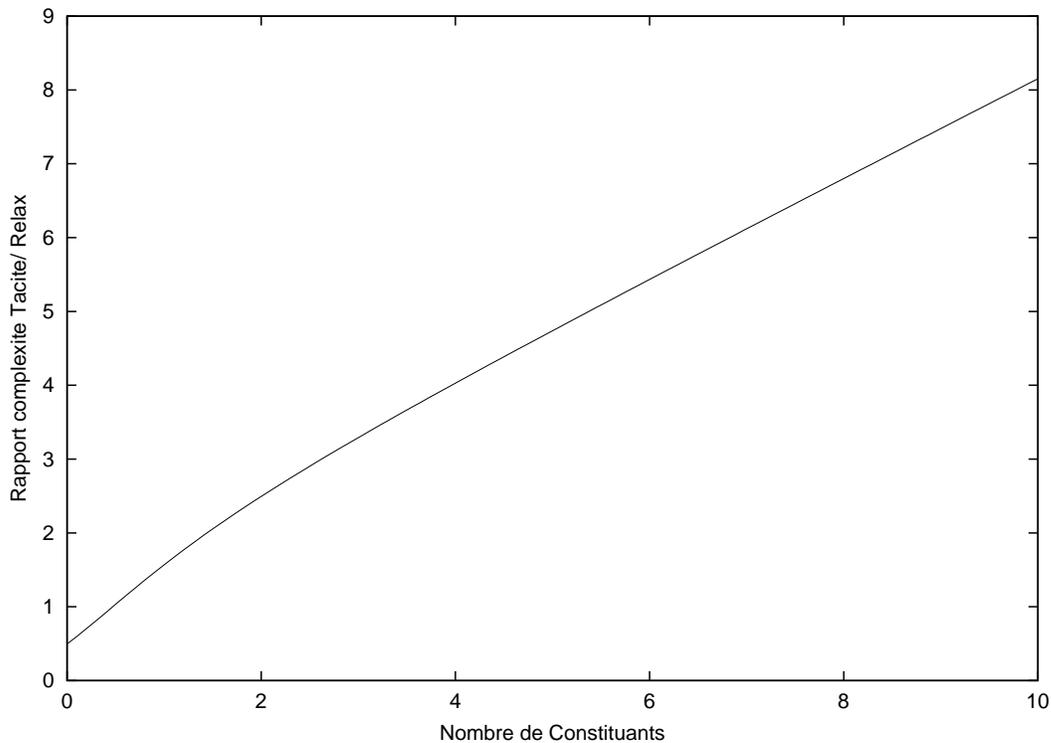


FIG. 11.6 – Étude du rapport (nombre d'opérations Tacite/ relaxation) pour le schéma semi-implicite linéaire

11.3 Conclusion

Nous avons analysé la complexité des schémas de relaxation explicite et semi-implicite linéaire. Comparée à celle du schéma Tacite, le schéma de relaxation s'avère peu coûteux et le gain varie comme K^2 pour le schéma explicite et comme K pour le schéma semi-implicite linéaire, avec K le nombre de constituants. Dans la pratique, cet avantage pourrait être très intéressant. Rappelons enfin que la méthode de relaxation présente souvent des pas de temps deux fois plus grands que la méthode Tacite (liée à une diffusion numérique importante dans le schéma Tacite) et que cela réduit encore le temps de simulation.

Nous donnons dans ce paragraphe le calcul des dérivées partielles nécessaires au schéma de relaxation ainsi qu'au schéma TACITE. Les dérivées partielles sont dans un premier temps calculées par rapport à $\mathbf{u} = (\rho, \rho v, \rho c_1)^T$ puis par rapport à $\mathbf{w} = (\tau, v, c_1)^T$. Lors de l'implémentation, la cohérence entre ces formules sera validée à la fois par des dérivées numériques et par des formules de changement de variables, données à la fin de ce paragraphe.

On suppose que toutes les dérivées partielles de la pression p et du glissement φ sont disponibles. En pratique, étant donnée leur complexité, ces dérivées sont des dérivées *numériques*. Elles sont validées par cohérence entre elles grâce à des formules de changement de variables. Plus précisément, pour le glissement (et de même pour la pression), il est vérifié que :

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} = -\frac{1}{\rho^2} \left[\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + (\rho v) \frac{\partial \varphi}{\partial v} + (\rho c_1) \frac{\partial \varphi}{\partial c_1} \right], \\ \frac{\partial \varphi}{\partial(\rho v)} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varphi}{\partial v}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial(\rho c_1)} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varphi}{\partial c_1}. \end{cases} \quad (11.1)$$

Les dérivées des fonctions σ , σ_1 et P sont données par les égalités qui suivent.

- Fraction massique de gaz définie par $Y(\mathbf{u}) = \frac{\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_L}}{\frac{1}{\rho_G} - \frac{1}{\rho_L}}$ avec $\rho_{L,G} = \rho_{L,G}(p(\mathbf{u}))$.

$$\begin{cases} \frac{\partial Y}{\partial \rho} = \frac{\rho'_L \rho_G (\rho - \rho_G) + \rho'_G \rho_L (\rho_L - \rho)}{\rho (\rho_L - \rho_G)^2} \frac{\partial p}{\partial \rho} - \frac{\rho_L \rho_G}{\rho^2 (\rho_L - \rho_G)}, \\ \frac{\partial Y}{\partial(\rho v)} = 0, \\ \frac{\partial Y}{\partial(\rho c_1)} = \frac{\rho'_L \rho_G (\rho - \rho_G) + \rho'_G \rho_L (\rho_L - \rho)}{\rho (\rho_L - \rho_G)^2} \frac{\partial p}{\partial(\rho c_1)}, \end{cases} \quad (11.2)$$

avec $\rho'_{L,G} = \frac{d\rho_{L,G}}{dp}$ (on considère que, la température étant fixée à $T = T^0$, les densités $\rho_{L,G}$ ne dépendent que de la pression).

- Fonction définie par $\sigma(\mathbf{u}) = \rho X(\mathbf{u}) Y(\mathbf{u}) \varphi(\mathbf{u})$.

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial \rho} = XY \varphi + \rho XY \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} + \rho \varphi (1 - 2Y) \frac{\partial Y}{\partial \rho}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial(\rho v)} = \rho XY \frac{\partial \varphi}{\partial(\rho v)} + \rho \varphi (1 - 2Y) \frac{\partial Y}{\partial(\rho v)}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial(\rho c_1)} = \rho XY \frac{\partial \varphi}{\partial(\rho c_1)} + \rho \varphi (1 - 2Y) \frac{\partial Y}{\partial(\rho c_1)}. \end{cases} \quad (11.3)$$

- Fonction définie par $\sigma_1(\mathbf{u}) = \sigma(\mathbf{u}) [X_1(p(\mathbf{u})) - Y_1(p(\mathbf{u}))]$.

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_1}{\partial \rho} = (X_1 - Y_1) \frac{\partial \sigma}{\partial \rho} + \sigma (X'_1 - Y'_1) \frac{\partial p}{\partial \rho}, \\ \frac{\partial \sigma_1}{\partial(\rho v)} = (X_1 - Y_1) \frac{\partial \sigma}{\partial(\rho v)} + \sigma (X'_1 - Y'_1) \frac{\partial p}{\partial(\rho v)}, \\ \frac{\partial \sigma_1}{\partial(\rho c_1)} = (X_1 - Y_1) \frac{\partial \sigma}{\partial(\rho c_1)} + \sigma (X'_1 - Y'_1) \frac{\partial p}{\partial(\rho c_1)}, \end{cases} \quad (11.4)$$

avec $X'_1 = \frac{dX}{dp}$ et $Y'_1 = \frac{dY}{dp}$.

- Pseudo-pression définie par $P(\mathbf{u}) = p(\mathbf{u}) + \sigma(\mathbf{u}) \varphi(\mathbf{u})$.

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{\partial p}{\partial \rho} + \varphi \frac{\partial \sigma}{\partial \rho} + \sigma \frac{\partial \varphi}{\partial \rho}, \\ \frac{\partial P}{\partial(\rho v)} = \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} + \varphi \frac{\partial \sigma}{\partial(\rho v)} + \sigma \frac{\partial \varphi}{\partial(\rho v)}, \\ \frac{\partial P}{\partial(\rho c_1)} = \frac{\partial p}{\partial(\rho c_1)} + \varphi \frac{\partial \sigma}{\partial(\rho c_1)} + \sigma \frac{\partial \varphi}{\partial(\rho c_1)}. \end{cases} \quad (11.5)$$

FIG. 11.7 – Détail du calcul des dérivées partielles - 1/2

– Fraction massique de gaz définie par $Y(\mathbf{u}) = \frac{\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_L}}{\frac{1}{\rho_G} - \frac{1}{\rho_L}}$ avec $\rho_{L,G} = \rho_{L,G}(p(\mathbf{u}))$.

$$\begin{cases} \frac{\partial Y}{\partial \tau} = \frac{\rho'_L \rho_G (\rho - \rho_G) + \rho'_G \rho_L (\rho_L - \rho)}{\rho (\rho_L - \rho_G)^2} \frac{\partial p}{\partial \tau} + \frac{\rho_L \rho_G}{\rho_L - \rho_G}, \\ \frac{\partial Y}{\partial v} = 0, \\ \frac{\partial Y}{\partial c_1} = \frac{\rho'_L \rho_G (\rho - \rho_G) + \rho'_G \rho_L (\rho_L - \rho)}{\rho (\rho_L - \rho_G)^2} \frac{\partial p}{\partial c_1}, \end{cases} \quad (11.6)$$

avec $\rho'_{L,G} = \frac{d\rho_{L,G}}{dp}$.

– Fonction définie par $\sigma(\mathbf{w}) = \frac{1}{\tau} X(\mathbf{w}) Y(\mathbf{w}) \varphi(\mathbf{w})$.

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial \tau} = -\rho^2 XY \varphi + \rho XY \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \rho \varphi (1 - 2Y) \frac{\partial Y}{\partial \tau}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial v} = \rho XY \frac{\partial \varphi}{\partial v} + \rho \varphi (1 - 2Y) \frac{\partial Y}{\partial v}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial c_1} = \rho XY \frac{\partial \varphi}{\partial c_1} + \rho \varphi (1 - 2Y) \frac{\partial Y}{\partial c_1}. \end{cases} \quad (11.7)$$

– Fonction définie par $\sigma_1(\mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}) [X_1(p(\mathbf{w})) - Y_1(p(\mathbf{w}))]$.

$$\frac{\partial \sigma_1}{\partial c_1} = (X_1 - Y_1) \frac{\partial \sigma}{\partial c_1} + \sigma (X'_1 - Y'_1) \frac{\partial p}{\partial c_1}, \quad (11.8)$$

avec $X'_1 = \frac{dX}{dp}$ et $Y'_1 = \frac{dY}{dp}$.

– Pseudo-pression définie par $P(\mathbf{w}) = p(\mathbf{w}) + \sigma(\mathbf{w}) \varphi(\mathbf{w})$.

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial \tau} = \frac{\partial p}{\partial \tau} + \varphi \frac{\partial \sigma}{\partial \tau} + \sigma \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}, \\ \frac{\partial P}{\partial v} = \frac{\partial p}{\partial v} + \varphi \frac{\partial \sigma}{\partial v} + \sigma \frac{\partial \varphi}{\partial v}. \end{cases} \quad (11.9)$$

FIG. 11.8 – Détail du calcul des dérivées partielles - 2/2

Chapitre 12

Résultats numériques

Nous présentons dans ce chapitre les résultats des schémas de relaxation explicite et semi-implicite sur le modèle diphasique isotherme à 2 constituants. Nous comparons nos simulations avec celles obtenues avec le schéma Tacite. Nous présentons exclusivement des résultats de tube à choc, c'est à dire des problèmes de Riemann dont nous précisons pour chaque expérience les états gauches et droits.

Nous analyserons la qualité des résultats par comparaison avec une solution de référence et nous présenterons les temps de simulations pour chaque schéma ainsi qu'une décomposition du temps calcul. Nous verrons que la spécificité des isobares du modèle à 2 constituants pose des problèmes lors de la résolution des discontinuités de contact.

Le plan de ce chapitre est le suivant. Nous commençons par une introduction dans laquelle nous précisons certaines données relatives aux expériences numériques. Puis nous détaillons les résultats des 5 expériences numériques avant de conclure.

12.1 Introduction

Nous précisons dans chaque cas une solution de référence. Dans le cas du glissement nul et si on a une loi de pression régulière, la solution de référence est la solution exacte du problème de Riemann. En effet, dans ce cas, le système hyperbolique a la même structure que le système diphasique isotherme non compositionnel. Rappelons que dans ce cas, le système possède trois valeurs propres, l'onde lente étant associée à un champ linéairement dégénéré et les deux ondes rapides étant associés à des champs vraiment non linéaires. Pour l'onde lente, l'invariant fort est c_1 , les invariants faibles sont v et p . Pour plus de détails, consulter [4].

La situation serait simple si la loi de pression était régulière sur tout le domaine. Mais nous avons montré qu'elle est régulière dans les domaines diphasiques et monophasiques, mais pas à la transition de phase. Ainsi, si les états gauche et droit sont dans le même domaine, la solution exacte est bien celle définie dans le paragraphe précédent. Par contre, si les états gauche et droit sont dans des domaines différents, la solution exacte est inconnue.

Pour les expériences dont les résultats sont présentés dans les paragraphes qui suivent, les paramètres numériques sont donnés dans la figure (12.1).

La figure (12.2) présente l'intérêt de chaque expérience par rapport aux phases présentes dans l'écoulement, dont on constatera qu'elles ont une grande influence sur les résultats.

Nous présentons dans ce paragraphe les caractéristiques numériques des schémas dont les résultats sont présentés ici.

Les schémas explicites sont d'ordre 2 en espace et en temps. Les schémas semi-implicites linéaires sont d'ordre 2 en espace et d'ordre 2 en temps pour les ondes lentes. L'ordre 2 en espace est atteint par une technique de limitation de pente (MUSCL). Le limiteur choisi est minmod. Les variables limitées lors de la montée en ordre de précision en espace du schéma numérique sont les variables dites "physiques". Ici, il s'agit des fractions massiques des constituants $\{c_k\}_{k=1,K}$, de la vitesse du mélange v ainsi que de la pression p . L'ordre 2 en temps est atteint par un schéma Runge-Kutta d'ordre 2.

Pour les schémas explicites, la CFL est 0.5. Elle limite le pas de temps qui est contraint par les ondes rapides du système. Pour les schémas semi-implicite linéaires, on calcule deux pas de temps avec une CFL de 0.5 pour les ondes lentes et 20 pour les ondes rapides : le pas de temps final est le plus petit des deux pas de temps.

FIG. 12.1 – Paramètres des schémas numériques

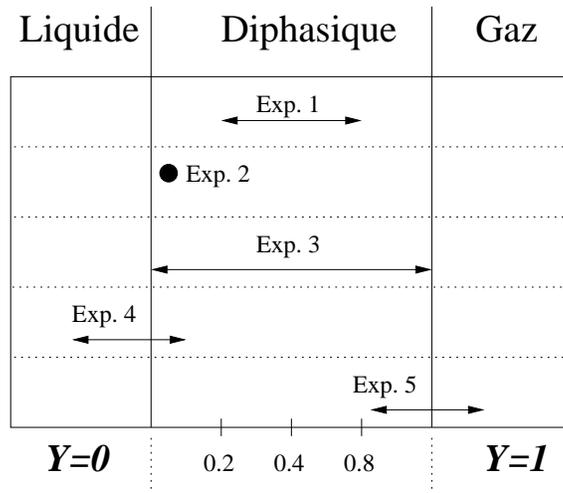


FIG. 12.2 – Position des expériences par rapport aux transitions de phases

Date finale : 20 (s)

Géométrie de la conduite et discrétisation :

- Longueur : 100 m, **horizontal**
- Diamètre : 0.144 m
- Pas d'espace : 1. m (100 mailles)

Modèles thermodynamiques et hydrodynamique :

- Thermodynamique : 2 constituants, liquide incompressible, gaz parfait
- Hydrodynamique : glissement nul

Caractéristiques du modèle thermodynamique :

$$\begin{array}{l|l} p_1^0 = 505.39 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} & p_2^0 = 0.02349 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} \\ p^0 = 1. \cdot 10^5 \text{ (Pa)} & \rho_L^0 = 997.10 \text{ (kg/m}^3\text{)} \\ a_L = \infty & a_G = 330. \text{ (m/s)} \end{array}$$

Etats gauche (**L**) et droit (**R**) :

$$\begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 1.10^5 \\ 0.2 \\ 1. \\ 0.20322 \\ 4.5022 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 1.10^5 \\ 0.8 \\ 1. \\ 0.81884 \\ 1.1211 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_{\mathbf{L}} = (-145.9, 1., 147.9)^T \quad \lambda_{\mathbf{R}} = (-294.0, 1., 296.0)^T$$

Solution exacte : discontinuité de contact de vitesse 1 (m/s).

Intérêt : nous restons dans la zone diphasique et testons une discontinuité de vitesse lente, ce qui conduit à un grand nombre d'itérations.

FIG. 12.3 – Détail de l'expérience 1

Date finale : 1 (s)

Géométrie de la conduite et discrétisation :

- Longueur : 100 m, **horizontal**
- Diamètre : 0.144 m
- Pas d'espace : 0.5 m (200 mailles)

Modèles thermodynamiques et hydrodynamique :

- Thermodynamique : 2 constituants, liquide incompressible, gaz parfait
- Hydrodynamique : glissement nul

Caractéristiques du modèle thermodynamique :

$$\begin{array}{l} p_1^0 = 505.39 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} \\ p^0 = 1. \cdot 10^5 \text{ (Pa)} \\ a_L = \infty \end{array} \left| \begin{array}{l} p_2^0 = 0.02349 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} \\ \rho_L^0 = 997.10 \text{ (kg/m}^3\text{)} \\ a_G = 330. \text{ (m/s)} \end{array} \right.$$

Etats gauche (**L**) et droit (**R**) :

$$\begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 34.996 \cdot 10^5 \\ 0.1 \\ -41.616 \\ 3.3109 \cdot 10^{-2} \\ 500. \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 30.250 \cdot 10^5 \\ 0.1 \\ -57.021 \\ 4.2778 \cdot 10^{-2} \\ 400. \end{pmatrix}$$

$$\lambda_{\mathbf{L}} = (-107.7, -41.6, 24.5)^T \quad \lambda_{\mathbf{R}} = (-128.7, -57.0, 14.6)^T$$

Solution exacte : choc de vitesse 20 (m/s).

Intérêt : nous restons dans la zone diphasique et testons un choc.

FIG. 12.4 – Détail de l'expérience 2

Date finale : 5 (s)

Géométrie de la conduite et discrétisation :

- Longueur : 100 m, **horizontal**
- Diamètre : 0.144 m
- Pas d'espace : 0.5 m (200 mailles)

Modèles thermodynamiques et hydrodynamique :

- Thermodynamique : 2 constituants, liquide compressible, gaz parfait
- Hydrodynamique : glissement nul

Caractéristiques du modèle thermodynamique :

$$\begin{array}{l|l} p_1^0 = 10.10^5 \text{ (Pa)} & p_2^0 = 0.210^5 \text{ (Pa)} \\ p^0 = 1.10^5 \text{ (Pa)} & \rho_L^0 = 997.10 \text{ (kg/m}^3\text{)} \\ a_L = 500. \text{ (m/s)} & a_G = 330. \text{ (m/s)} \end{array}$$

Etats gauche (**L**) et droit (**R**) :

$$\begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 1.10^5 \\ 0.8163265 \\ 4. \\ 0. \\ 0.91827 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 1.10^5 \\ 0.0816327 \\ 4. \\ 1. \\ 997.10 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_{\mathbf{L}} = (-323.013, 4., 331.013)^T \quad \lambda_{\mathbf{R}} = (-349.586, 4., 357.586)^T$$

Solution exacte : discontinuité de contact de vitesse 4 (m/s).

Intérêt : nous parcourons entièrement la zone diphasique sans franchir les zones de transition.

FIG. 12.5 – Détail de l'expérience 3

Date finale : 5 (s)

Géométrie de la conduite et discrétisation :

- Longueur : 100 m, **horizontal**
- Diamètre : 0.144 m
- Pas d'espace : 0.5 m (200 mailles)

Modèles thermodynamiques et hydrodynamique :

- Thermodynamique : 2 constituants, liquide compressible, gaz parfait
- Hydrodynamique : glissement nul

Caractéristiques du modèle thermodynamique :

$$\begin{array}{l|l} p_1^0 = 500.10^5 \text{ (Pa)} & p_2^0 = 0.02 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} \\ p^0 = 1.10^5 \text{ (Pa)} & \rho_L^0 = 997.10 \text{ (kg/m}^3\text{)} \\ a_L = 500. \text{ (m/s)} & a_G = 330. \text{ (m/s)} \end{array}$$

Etats gauche (**L**) et droit (**R**) :

$$\begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 1.10^5 \\ 0.01 \\ 4. \\ 8.2197 \cdot 10^{-3} \\ 100.53 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 1.10^5 \\ 0. \\ 4. \\ 0. \\ 997.10 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_{\mathbf{L}} = (-25.5, 4., 33.5)^T \quad \lambda_{\mathbf{R}} = (-496.0, 4., 504.0)^T$$

Solution exacte : discontinuité de contact de vitesse 4 (m/s).

Intérêt : nous franchissons la zone de transition diphasique – monophasique liquide.

FIG. 12.6 – Détail de l'expérience 4

Date finale : $5 \cdot 10^{-2}$ (s)

Géométrie de la conduite et discrétisation :

- Longueur : 100 m, **horizontal**
- Diamètre : 0.144 m
- Pas d'espace : 0.5 m (200 mailles)

Modèles thermodynamiques et hydrodynamique :

- Thermodynamique : 2 constituants, liquide compressible, gaz parfait
- Hydrodynamique : glissement nul

Caractéristiques du modèle thermodynamique :

$$\begin{array}{l|l} p_1^0 = 500 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} & p_2^0 = 0.02 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} \\ p^0 = 1 \cdot 10^5 \text{ (Pa)} & \rho_L^0 = 997.10 \text{ (kg/m}^3\text{)} \\ a_L = 500 \text{ (m/s)} & a_G = 330 \text{ (m/s)} \end{array}$$

Etats gauche (**L**) et droit (**R**) :

$$\begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 1.0871 \cdot 10^5 \\ 0.98 \\ 89.569 \\ 0.99832 \\ 0.999 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} p \\ c_1 \\ v \\ Y \\ \rho \end{pmatrix}_{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 0.98010 \cdot 10^5 \\ 0.98 \\ 55.076 \\ 1. \\ 0.9000 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_{\mathbf{L}} = (-237.1, 89.5, 416.2)^T \quad \lambda_{\mathbf{R}} = (-274.9, 55.0, 385.0)^T$$

Solution exacte : choc de vitesse 400 (m/s).

Intérêt : nous franchissons la zone de transition diphasique – monophasique gaz.

FIG. 12.7 – Détail de l'expérience 5

12.2 Expérience 1

Les détails de cette expérience sont donnés dans la figure (12.3). C'est une expérience facile car nous restons strictement à l'intérieur du domaine diphasique, dans lequel la pression est régulière.

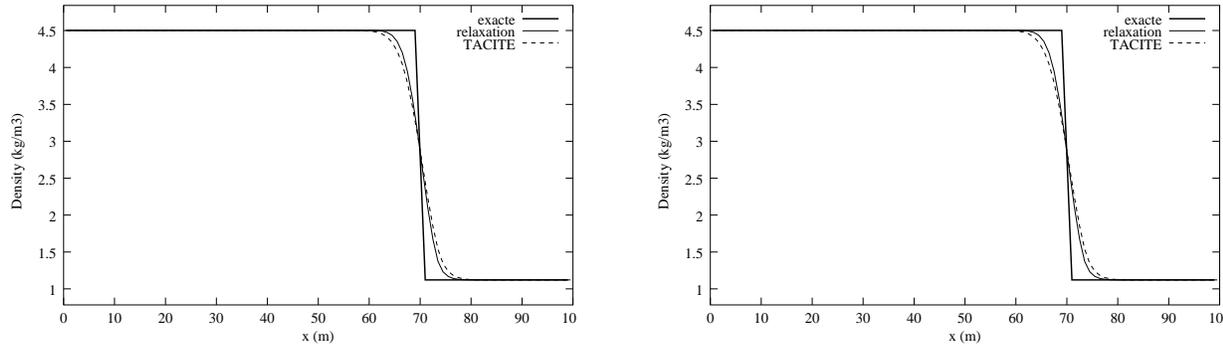


FIG. 12.8 – Expérience 1 – Résultat des schémas explicites (à gauche) et semi-implicite linéaire (à droite)

On constate sur les figures (12.8) que les schémas numériques explicites et semi-implicite linéaires s'accordent bien avec la solution exacte. La méthode de relaxation diffuse moins que le schéma Tacite, se qui est en accord avec tous les résultats obtenus jusque là : la diffusion numérique est plus importante avec Tacite, à cause des coefficients de diffusion qui sont fixés à $k = 2$ (voir [4]).

Schéma	Temps
Relaxation explicite	20 min 2 sec
Relaxation implicite	1 min, 10 sec
Tacite explicite	1 heu, 22 min, 59 sec
Tacite implicite	2 min, 13 sec

FIG. 12.9 – Expérience 1 – Temps d'exécution

On notera dans le tableau (12.9) l'importance des temps CPU qui deviennent, avec une thermodynamique compositionnelle, importants. On constate le gain très important des schémas implicites sur les schémas explicite avec, on l'a constaté sur les figures (12.8), une qualité identique. On constate pour les 4 schémas numérique que le simulateur passe entre 50 et 80 % du temps dans les procédures d'évaluation des lois de fermeture thermodynamiques et hydrodynamiques.

12.3 Expérience 2

Les détails de cette expérience sont donnés dans la figure (12.4). C'est une expérience facile car nous restons strictement à l'intérieur du domaine diphasique, dans lequel la pression est régulière.

On constate sur les figures (12.11) que les schémas numériques explicites et semi-implicite linéaires s'accordent bien avec la solution exacte.

Les figures (12.12) montrent la décomposition du temps d'exécution des schémas semi-implicites. On constate que l'inversion du système linéaire par la méthode de Gauss consomme une part sensible du schéma numérique mais peu importante vis à vis du temps total. Concernant le schéma Tacite, on constate que le calcul des valeurs propres et des vecteurs propres représente environ 40 % du schéma numérique.

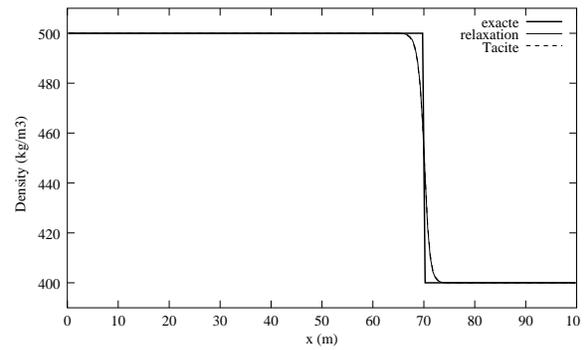
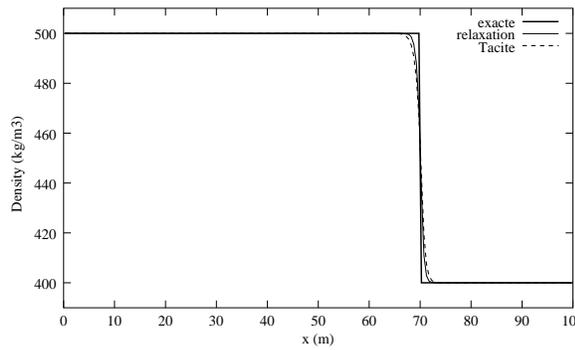


FIG. 12.10 – Expérience 2 – Résultat des schémas explicites (à gauche) et semi-implicite linéaire (à droite)

FIG. 12.11 – Expérience 2 – Résultat des schémas explicites

Total	Proportion	Total	Proportion
Thermo+Hydro	58.2 %	Thermo+Hydro	44.4 %
Schéma	41.8 %	Schéma	55.6 %
Dans Schéma	Proportion	Dans Schéma	Proportion
Gauss	21.2 %	Valeurs propres	41.0 %
Autre	78.8 %	Gauss	8.1 %
		Autre	50.9 %

FIG. 12.12 – Expérience 2 – Temps d’exécution du schéma de relaxation semi-implicite linéaire (à gauche) et du schéma Tacite semi-implicite linéaire (à droite)

12.4 Expérience 3

Les détails de cette expérience sont donnés dans la figure (12.5). C'est une expérience difficile car nous allons d'un bord à l'autre du domaine diphasique. La pression est donc régulière mais la variation de densité est grande et le schéma numérique doit préserver la positivité de la fraction massique de gaz.

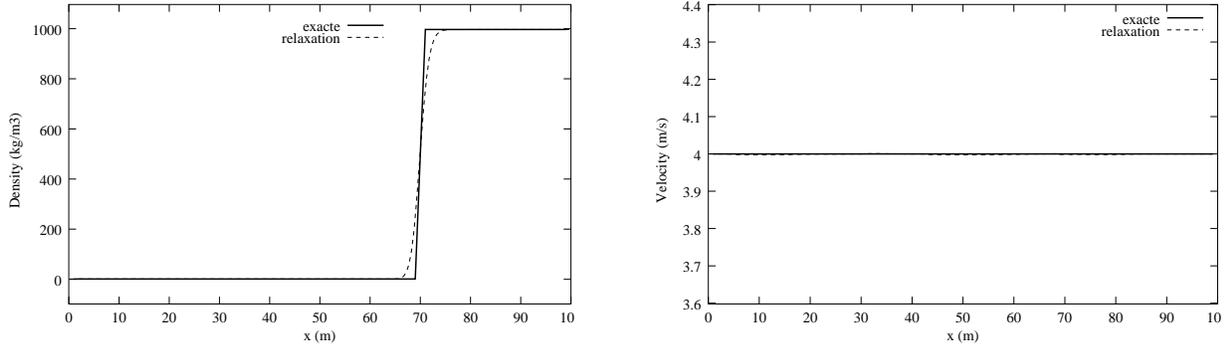


FIG. 12.13 – Expérience 3 – Résultat du schéma de relaxation explicite

Pour cette expérience, le schéma explicite Tacite a manqué de robustesse puisque la simulation s'arrête au bout de quelques itérations lors de la remise à jour des variables conservatives car il détecte une fraction massique du premier constituant négative ($c_1 = -2.9641 \cdot 10^{-2}$). Le schéma semi-implicite Tacite se comporte de la même manière.

Le schéma de relaxation explicite permet sur ce calcul d'obtenir le résultat présenté dans la figure (12.13). On constate que ce résultat est satisfaisant puisque la densité se propage à une vitesse convenable et que la vitesse (invariant faible) est bien constante.

Le schéma de relaxation semi-implicite linéaire manque de robustesse puisqu'il s'arrête à $t = 0.35$ (s) au terme de la 120^e itération car il détecte, lors de la remise à jour de la fraction massique du premier constituant, une valeur dépassant 1 ($c_1 = 1.00232$). Ce résultat n'est pas surprenant car l'ajustement des coefficients de relaxation garantit la robustesse du schéma explicite seulement : la robustesse du schéma semi-implicite linéaire reste soumise au comportement favorable (dans la plupart des cas) ou défavorable (par exemple ici) de la méthode implicite linéaire.

Compte tenu du fait que le schéma explicite a fonctionné, nous suspectons qu'un pas de temps plus petit aurait pu faire fonctionner ce cas. On constate que, lorsqu'on choisit une CFL sur les ondes rapides égale à 10, le cas-test passe. Avec cette CFL, les résultats de schéma de relaxation semi-implicite linéaire se superposent (visuellement) à ceux obtenus avec le schéma explicite.

12.5 Expérience 4

Les détails de cette expérience sont donnés dans la figure (12.6). C'est une expérience difficile car nous allons de part et d'autre de la zone de transition monophasique liquide / diphasique. La pression est donc non régulière mais la variation de densité est faible.

On constate sur les figures (12.14) que les schémas numériques explicites sont bien conservatifs mais que la vitesse et la pression sont éloignées de la solution exacte. L'explication de ces résultats, liés aux propriétés du modèle thermodynamique, se trouve dans la figure (12.15).

Pour cette expérience, les schémas semi-implicite Tacite et relaxation sont mis en échec. Ils produisent tous deux une fraction massique du premier constituant négative dès les premières itérations. Pour le schéma Tacite, aucune CFL rapide n'a été trouvée pour permettre de faire cette expérience.

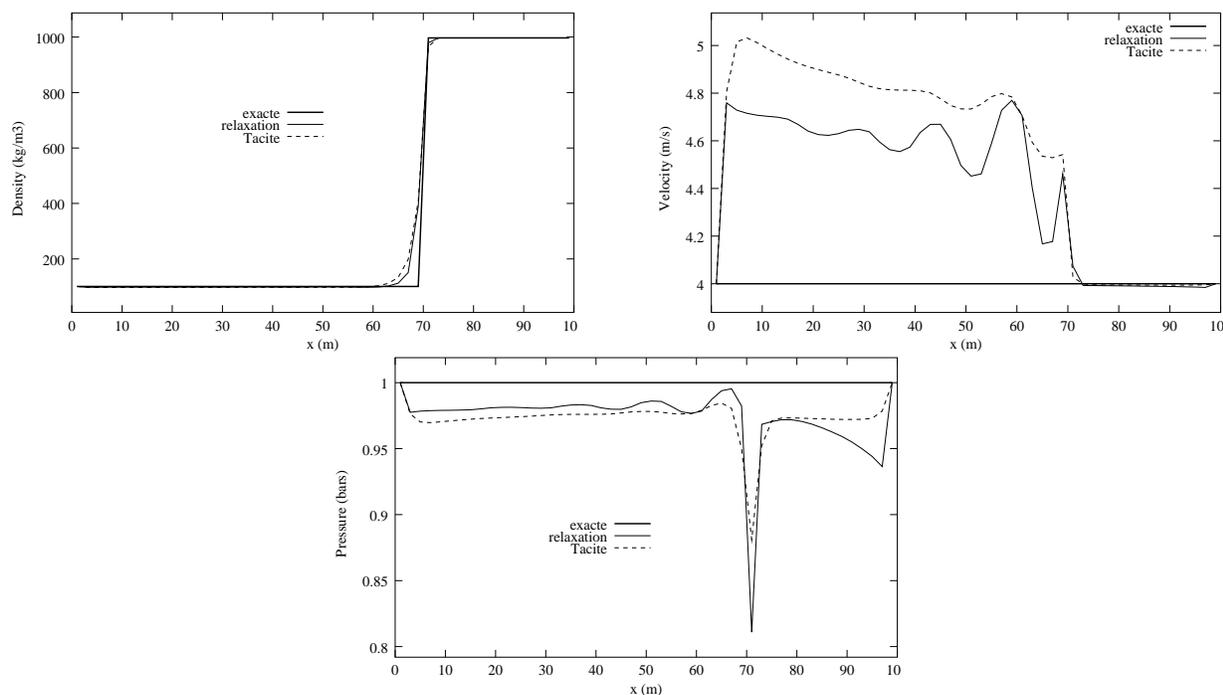


FIG. 12.14 – Expérience 4 – Résultat des schémas explicites

Pour le schéma de relaxation, une CFL rapide égale à 5 (au lieu de 20) permet d’obtenir des résultats comparables à ceux obtenus avec le schéma de relaxation explicite.

12.6 Expérience 5

Les détails de cette expérience sont donnés dans la figure (12.7). C’est une expérience difficile car nous allons de part et d’autre de la zone de transition monophasique gaz / diphasique. La pression est donc non régulière mais la variation de densité est faible.

On constate sur les figures (12.17–12.18) que les schémas se comportent favorablement. En ce qui concerne les schémas explicites, c’est le schéma de relaxation qui diffuse le moins. En ce qui concerne les schéma semi-implicites linéaires, c’est le schéma Tacite qui diffuse le moins.

12.7 Conclusion

Nous avons constaté que, dans tous des cas, le schéma de relaxation produit une solution numérique proche de celle du schéma Tacite. Dans la plupart des cas, cette solution est correcte, excepté lors de discontinuité de contact pour des problèmes de Riemann pour lesquels les états gauche et droits sont de part et d’autre de la zone de transition monophasique–diphasique. Nous avons expliqué cette erreur grâce à la caractérisation des courbes isobares du modèle à 2 constituants. Il s’agit d’un problème important car, dans ce cas, la simulation produit de grandes oscillations dans la pression alors que celle-ci devrait rester constante.

Lorsqu’on considère des chocs ou des détente, la méthode de relaxation produit des solution numériques satisfaisantes, y compris à la traversée des zones de transition, malgré la non-régularité de la dérivée de la pression.

Dans ce paragraphe, nous expliquons les mauvais résultats de l'expérience 4, pour lesquels on constate que la pression exacte est mal approchée par le schéma. L'idée consiste à faire "à la main" la première itération du schéma numérique de Godunov. Nous vérifierons que la pression calculée au terme de la première itération est inexacte.

Soient $\mathbf{u}_{\mathbf{L},\mathbf{R}} = (\rho, \rho v, \rho c_1)$ les états gauche et droit du problème de Riemann. Ils sont tels que $v_{\mathbf{L}} = v_{\mathbf{R}} = \tilde{v} = 4$ (m/s) et $p_{\mathbf{L}} = p_{\mathbf{R}} = \tilde{p} = 1$ (bar). Supposons que à $t = 0$, l'état initial est :

$$\mathbf{u}_i^0 = \begin{cases} \mathbf{u}_{\mathbf{L}}, & \text{si } i \leq 0, \\ \mathbf{u}_{\mathbf{R}}, & \text{si } 1 \leq i. \end{cases} \quad (12.1)$$

Considérons maintenant un schéma de Godunov pour lequel la formule de remise à jour est

$$\mathbf{u}_i^1 = \mathbf{u}_i^0 - \lambda \left[\mathcal{F}(\mathbf{u}_{i+1/2}^*) - \mathcal{F}(\mathbf{u}_{i-1/2}^*) \right], \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \quad (12.2)$$

avec $\mathcal{F} = (\rho v, \rho v^2 + p, \rho c_1 v)^T$ et $\lambda = \Delta t / \Delta x$. Puisque la solution exacte est une discontinuité de contact de vitesse positive, la solution du problème de Riemann sur les arêtes est

$$\mathbf{u}_{i+1/2}^* = \begin{cases} \mathbf{u}_{\mathbf{L}}, & \text{si } i \leq 0, \\ \mathbf{u}_{\mathbf{R}}, & \text{si } 1 \leq i. \end{cases} \quad (12.3)$$

Ainsi, après mise à jour, la solution approchée à la première itération est

$$\mathbf{u}_i^1 = \begin{cases} \mathbf{u}_{\mathbf{L}}, & \text{si } i \leq 0, \\ \mathbf{u}_{\mathbf{R}}, & \text{si } 2 \leq i. \end{cases} \quad (12.4)$$

En ce qui concerne la maille numéro 1, il vient

$$\rho_1^1 = \rho_1^0 - \lambda \left[(\rho v)_{1+1/2}^* - (\rho v)_{1-1/2}^* \right], \quad (12.5)$$

$$(\rho c_1)_1^1 = \rho_1^0 - \lambda \left[(\rho c_1 v)_{1+1/2}^* - (\rho c_1 v)_{1-1/2}^* \right], \quad (12.6)$$

et par conséquent

$$\rho_1^1 = \lambda v \rho_{\mathbf{L}} + (1 - \lambda v) \rho_{\mathbf{R}}, \quad (12.7)$$

$$(\rho c_1)_1^1 = \lambda v (\rho c_1)_{\mathbf{L}} + (1 - \lambda v) (\rho c_1)_{\mathbf{R}}. \quad (12.8)$$

Comme la vitesse est positive et que le pas de temps est limité par la condition CFL $1 - \lambda v \geq 0$, il s'avère que la maille numéro 1 est une combinaison linéaire positive des états gauche et droit. Or les états gauche et droit se trouvent sur l'isobare associée à \tilde{p} . Mais, à cause du franchissement de la zone de transition de phase, les isobares sont des droites de pente différentes (c'est le théorème (9.2.5)). Par conséquent, l'état \mathbf{u}_1^1 ne se trouve pas sur l'isobare associée à \tilde{p} , comme l'illustre la figure (12.16). Cela explique pourquoi, à la première itération, la pression sur la maille numéro 1 n'est pas la pression \tilde{p} . Cette erreur se propage ensuite de proche en proche à l'ensemble du maillage.

D'un autre point de vue, cette explication permet de comprendre pourquoi les expériences faites avec le système diphasique non compositionnel fonctionnaient correctement. En effet, le théorème (9.2.4) permet de voir que le problème qui apparaît dans le modèle compositionnel n'existe pas dans le modèle non compositionnel : en effet, il n'y a dans le modèle non compositionnel aucune courbe de transition de phase. Ainsi, toute combinaison linéaire des états gauche et droit se trouve encore sur l'isobare.

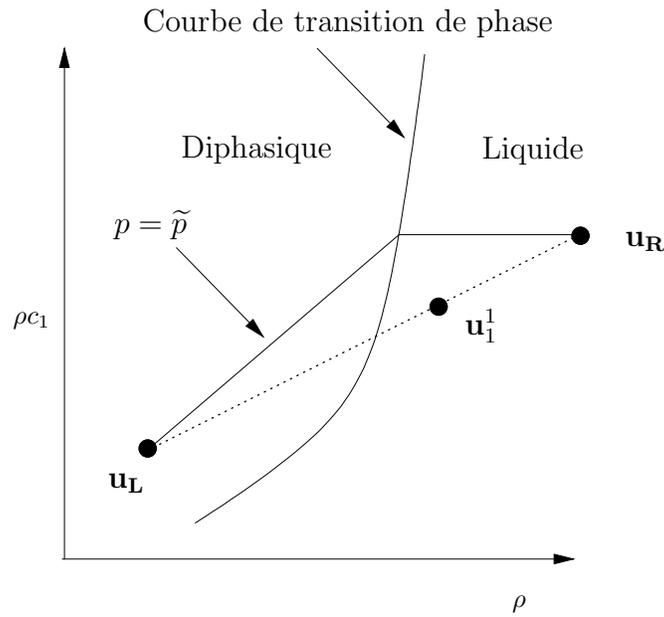


FIG. 12.16 – Position de l'expérience 4 dans le plan $(\rho, \rho c_1)$

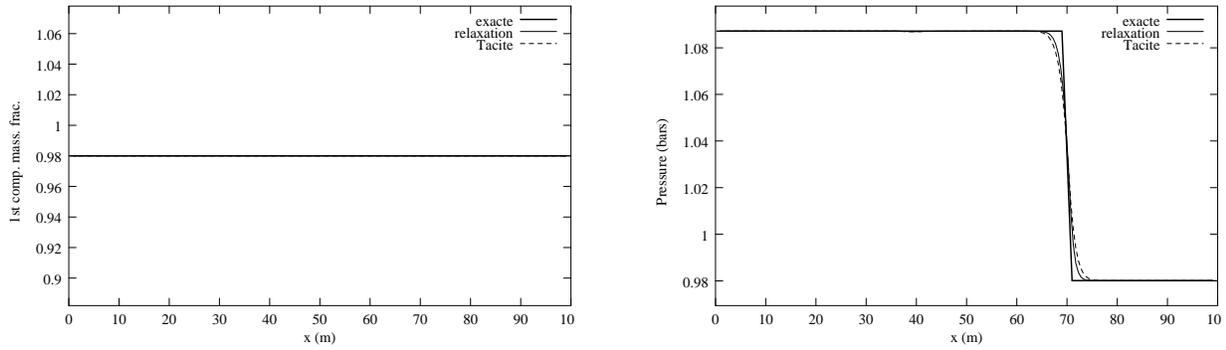


FIG. 12.17 – Expérience 5 – Résultat des schémas explicites

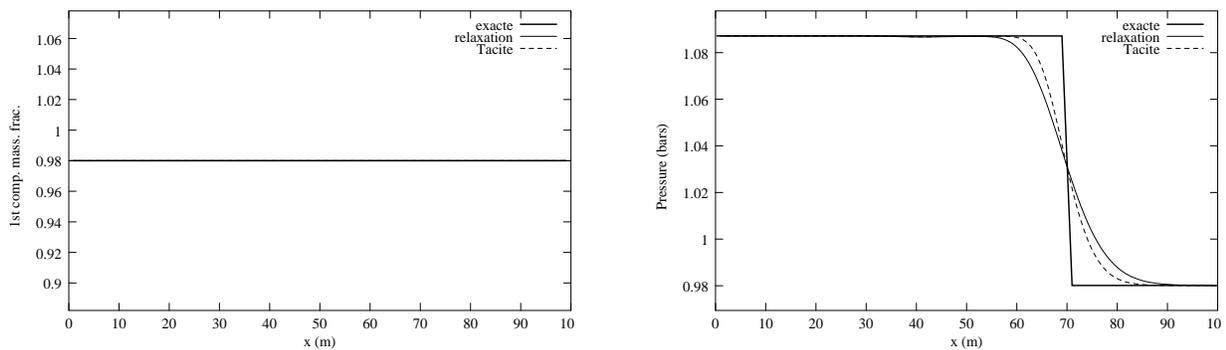


FIG. 12.18 – Expérience 5 – Résultat des schémas semi-implicite linéaires

Du point de vue du temps calcul, la méthode de relaxation s'avère moins coûteuse que la méthode Tacite, ce qui est conforme à l'analyse théorique de complexité du chapitre précédent.

Chapitre 13

Conclusion de la seconde partie

Nous avons présenté une méthode de relaxation pour l'approximation des solutions d'un système diphasique isotherme compositionnel. Nous avons constaté qu'une extension naturelle de la méthode de Larrouturou ne permet pas de préserver la positivité des fractions massiques des constituants. Nous avons également vu qu'une méthode fondée sur le système de Born-Infeld ne permet pas d'assurer la robustesse de la méthode pour toute loi de glissement. Nous avons alors proposé une extension de la méthode introduite dans la première partie de cette thèse. Nous considérons la résolution d'un système de relaxation dont les champs sont linéairement dégénérés. Le schéma numérique est une méthode de Godunov pour laquelle la résolution du problème de Riemann est peu coûteuse. Le calcul des coefficients de relaxation est rendu possible par un découplage, lors du développement de Chapman-Enskog, du sous-système lié à la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, du sous-système lié à l'évolution des fractions massiques. Mais surtout, il est possible d'augmenter un coefficient de relaxation de telle sorte que la positivité des fractions massiques des constituants soit assurée. La méthode peut s'étendre à un schéma semi-implicite linéaire car il est possible d'interpréter la méthode de Godunov comme une méthode de Roe.

Le schéma ainsi construit est moins coûteux que le schéma Tacite pour 2 raisons. La première tient au fait que le pas de temps du schéma de relaxation est souvent 2 fois plus grand que celui du schéma Tacite. La seconde est liée au fait que la méthode Tacite nécessite la décomposition en éléments propres de la matrice Jacobienne, ce qui, dans le cas du système compositionnel, est très coûteux. De ce point de vue, pour le schéma semi-implicite linéaire, le gain est de l'ordre du nombre de constituants.

Les résultats numériques ont été présentés dans le cadre de problèmes de Riemann (sans conditions aux limites). Le schéma de relaxation se comporte d'une manière analogue au schéma Tacite pour un coût moindre. Il a été constaté que, lorsqu'on considère une discontinuité de contact, les 2 schémas produisent des solutions non satisfaisantes à la traversée des zones de transition de phases. Cela a été expliqué grâce à la structure particulière des isobares du modèle à 2 constituants.

Concernant le modèle compositionnel, les perspectives concernent les problèmes de Riemann de type discontinuités de contact, les problèmes avec conditions aux limites ainsi que les problèmes mettant en jeu un grand nombre de constituants.

Nous avons constaté les difficultés numériques liées à la constance de la pression à travers les discontinuités de contact. Or la littérature sur le sujet est vaste. Pour exemple, nous pouvons citer les travaux de Abgrall dans [1] ou bien encore, concernant les propriétés du schéma VFRoe, la thèse de Seguin [58]. Dans le cadre de cette thèse, nous n'avons pas eu assez de temps pour approfondir suffisamment le sujet. Rappelons toutefois que le modèle thermodynamique à 2 constituants utilisé

ici est spécifique à la problématique pétrolière. Mais il ne semble pas qu'aucun remède ne puisse être trouvé pour ce problème.

Il reste par ailleurs à valider le schéma de relaxation avec des problèmes impliquant des variations des conditions aux limites. Bien que ce type de tests soit délicat, il ne semble pas que le modèle compositionnel pose des problèmes spécifiques.

Enfin, nous avons validé le schéma de relaxation uniquement sur un modèle à 2 constituants. Or nous avons démontré que le gain en temps calcul de la méthode de relaxation par rapport au schéma VFRoe–Tacite était proportionnel au nombre de constituants. Ceci laisse espérer des gains importants dans les applications pratiques, dans lesquelles on utilise couramment 7 ou 8 constituants. Lors de développements ultérieurs, il serait intéressant de constater ce gain, compte tenu du fait que les lois de fermetures deviennent, elles aussi de plus en plus complexes.

Bilan

Résultats obtenus

La présente recherche est consacrée à l'approximation numérique des solutions de systèmes d'EDP non linéaires répondant à des modèles d'écoulements en conduites pétrolières. Ces modèles sont complétés par des lois de fermeture (pression et la loi de glissement entre les phases) très non-linéaires. Ces non-linéarités rendent très coûteuses les techniques d'approximation usuelles, basées sur la recherche des éléments propres de la matrice Jacobienne des flux, telles la méthode de type VFRoe utilisée dans le code Tacite.

Nous avons introduit une méthode de relaxation originale, 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. Nos premiers travaux ont concerné le système diphasique isotherme non-compositionnel, aussi appelé système gaz-liquide.

Nous pouvons alors énoncer des critères de stabilité (fondés sur le développement de Chapman-Enskog) de la procédure de relaxation tout en autorisant une évaluation peu coûteuse de la fonction flux numérique. 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 transitoires réels (i.e. impliquant des variations des conditions aux limites) en comparant nos résultats aux résultats obtenus par Tacite. Un excellent accord a été observé.

Or les schémas numériques explicites sont, dans les écoulements en conduites pétrolières, limités par leur manque de précision vis à vis du transport des constituants et prohibitifs du point de vue du temps calcul. Nous avons par conséquent développé une technique d'implicitation de la méthode de relaxation. 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. 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.

Nous avons également proposé une méthode de relaxation pour la simulation des écoulements diphasiques isotherme compositionnels. Notre méthode garantit la positivité des fractions massiques des constituants pour le schéma explicite. Sur cette base, nous construisons schéma numérique semi-implicite linéaire. Nous avons considéré des simulations numériques sur un modèle à 2 constituants

et sur la base de problèmes de Riemann. Ces simulations montrent un comportement comparable en qualité à celui du schéma Tacite, pour un coût moindre. Nous avons expliqué les difficultés qui apparaissent lorsque l'on considère un problème de Riemann mettant en jeu des états gauche et droit de part et d'autre de la zone de transition de phase.

Perspectives

Système d'EDP	Proposition de schéma	Expériences numériques
Diphasique, isotherme, non compositionnel	✓	✓
Diphasique, non isotherme, non compositionnel	✓	?
Triphasique, isotherme, non compositionnel	✓	?
Diphasique, isotherme, compositionnel	✓	-
⋮	⋮	
Triphasique, non isotherme, compositionnel	?	?

FIG. 13.1 – Objectifs de la thèse en termes de lois de conservation

Deux études auxiliaires, présentées en annexe, ont été menées en parallèle. Elle concernent, pour l'une, le système gaz-liquide avec équation d'énergie (système diphasique non isotherme, non compositionnel) et, pour l'autre, le système gaz-eau-huile (système triphasique, isotherme, non compositionnel). Ces études montrent que la technique proposée dans cette thèse s'étend à ces deux systèmes de lois de conservation. La positivité des fractions massique peut toujours être assurée pour le schéma numérique explicite et un schéma semi-implicite linéaire peut toujours être construit. Or l'objectif ultime de cette étude est de trouver un schéma permettant de traiter un système triphasique compositionnel avec équation d'énergie. Cette thèse propose les éléments de base qui permettent de construire un schéma numérique permettant d'assurer la positivité des fractions massiques et à un coût moindre.