

Méthodes de relaxation

Dans ce chapitre, nous présentons des méthodes numériques dont le but est d'approcher les solutions du système d'équations diphasiques isotherme compositionnel

$$\begin{cases} \partial_t(\rho c_k) + \partial_x(\rho_L^k R_L^k v_L + \rho_G^k R_G^k v_G) & = 0, \quad k = 1, K, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) & = 0. \end{cases} \quad (10.1)$$

Nous présenterons deux stratégies de résolution : une méthode avec découplage et une méthode couplée. Nous analyserons ces méthodes du point de vue du respect de la positivité des fractions massiques des constituant ainsi que de leur coût.

Nous proposerons deux variantes pour la méthode avec découplage. Nous constaterons que la première (fondée sur une extension naturelle de la méthode de Larrouturou) ne permet pas d'assurer le principe du maximum dans le cadre d'un modèle à 2 vitesse. Nous constaterons également que la seconde (fondée sur le système de Born-Infeld) ne permet pas de vérifier le principe du maximum pour toutes les lois de glissement, mais seulement pour certaines d'entre elles.

Nous considérerons alors un schéma de relaxation fondé sur le modèle couplé et qui a l'avantage de garantir la positivité des fractions massiques quelque soit la loi de glissement. L'idée clé est de construire un système de relaxation sur la base de l'étude du système d'équilibre en coordonnées Lagrangiennes. Nous proposons de relaxer la pression ainsi que les fonctions non linéaires associées au transport de chaque constituant. L'étude de cette méthode de relaxation est facilitée par l'introduction de seulement deux coefficients de relaxation (indépendamment du nombre de constituants). Cette méthode de relaxation permet de diminuer le coût d'évaluation du flux numérique. En effet, il n'est désormais plus nécessaire de calculer numériquement les valeurs propres de la matrice Jacobienne, comme c'était le cas dans la méthode VFRoe–Tacite.

10.1 Relaxation avec découplage

Le système compositionnel étant de grande taille, on cherche à construire un système de petite taille par découplage. Dans ce but, on approche le système compositionnel par les solutions du système gaz-liquide complété par des équations de transport sur les fractions massiques des constituants. Rappelons en effet que

$$\rho c_k = \rho_L^k R_L^k + \rho_G^k R_G^k \quad \text{et} \quad \rho v = \rho_L^k R_L^k v_L + \rho_G^k R_G^k v_G. \quad (10.2)$$

L'hypothèse d'équilibre (égalité des potentiels chimiques) permet de calculer $\rho_L^k R_L^k$ et $\rho_G^k R_G^k$ en fonction de ρc_k . Nous proposons d'abandonner cette hypothèse et de considérer des lois d'évolution

sur $\rho_L^k R_L^k$ et $\rho_G^k R_G^k$. On procède à une “relaxation chimique” en découplant chaque équation de conservation en deux et on considère le système

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_L^k R_L^k) + \partial_x (\rho_L^k R_L^k v_L) & = \lambda Q_k, & k = 1, K, \\ \partial_t (\rho_G^k R_G^k) + \partial_x (\rho_G^k R_G^k v_G) & = -\lambda Q_k, & k = 1, K, \\ \partial_t (\rho v) + \partial_x (\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) & = 0, \end{cases} \quad (10.3)$$

avec Q_k des termes de relaxation chimiques et λ un paramètre de relaxation. Nous allons approcher les solutions du système à l'équilibre (10.1) par les solutions du système étendu (10.3). Notons $\mathbf{u} = (\rho c_1, \dots, \rho c_K, \rho v)^T$ et supposons connue à l'instant t^n une solution $\mathbf{u}(x, t^n)$. On se propose de réactualiser cette solution en 2 pas de temps dictés par une décomposition en opérateurs.

1er pas On considère la donnée initiale $\mathbf{v}(x, t^n) = \left(\{\rho_L^k R_L^k\}_{k=1, K}, \{\rho_G^k R_G^k\}_{k=1, K}, \rho v \right)^T$ construit à partir de $\mathbf{u}(x, t^n)$ sous l'hypothèse d'équilibre chimique. On résout le système homogène

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_L^k R_L^k) + \partial_x (\rho_L^k R_L^k v_L) & = 0, & k = 1, K, \\ \partial_t (\rho_G^k R_G^k) + \partial_x (\rho_G^k R_G^k v_G) & = 0, & k = 1, K, \\ \partial_t (\rho v) + \partial_x (\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) & = 0. \end{cases} \quad (10.4)$$

2è pas On résout

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_L^k R_L^k) = \lambda Q_k, & k = 1, K, \\ \partial_t (\rho_G^k R_G^k) = -\lambda Q_k, & k = 1, K, \\ \partial_t (\rho v) = 0, \end{cases} \quad (10.5)$$

dans la limite d'un paramètre de relaxation λ infini avec pour donnée initiale $\mathbf{v}(x, t^n + \Delta t)$ du problème précédent. Ceci revient à construire ρc_k par $\rho c_k = \rho_L^k R_L^k + \rho_G^k R_G^k$.

Il est attendu que la procédure d'approximation proposée soit stable dès que la condition de Whitham, imposant que la vitesse du son du système en déséquilibre est plus grande que la vitesse du son du système à l'équilibre, est respectée.

On se concentre désormais sur le premier pas, c'est à dire sur la résolution du système (10.4). Nous allons voir pourquoi le premier pas peut être compris comme la résolution de

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_L R_L) + \partial_x (\rho_L R_L v_L) & = 0, \\ \partial_t (\rho_G R_G) + \partial_x (\rho_G R_G v_G) & = 0, \\ \partial_t (\rho v) + \partial_x (\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) & = 0, \end{cases} \quad (10.6)$$

complété de la résolution de

$$\begin{cases} \partial_t (\rho X X_k) + \partial_x (\rho X X_k v + X_k \sigma) = 0, & k = 1, K - 1, \\ \partial_t (\rho Y Y_k) + \partial_x (\rho Y Y_k v - Y_k \sigma) = 0, & k = 1, K - 1. \end{cases} \quad (10.7)$$

Soulignons que le découplage est intéressant car le système (10.6) est le système gaz-liquide tel qu'il a été étudié dans la première partie. Pour éclairer cette approche, considérons plus précisément le système (10.4).

- Si on somme les K premières équations de (10.4) entre elles d'une part, et les K dernières équations de (10.4) entre elles d'autre part, on obtient les équations de conservation de la masse de liquide et de la masse de gaz :

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_L R_L) + \partial_x (\rho_L R_L v_L) = 0, \\ \partial_t (\rho_G R_G) + \partial_x (\rho_G R_G v_G) = 0, \end{cases} \quad (10.8)$$

par définition de $\rho_L R_L$ et $\rho_G R_G$.

- Par ailleurs, en utilisant les égalités $\rho_L^k R_L^k = \rho_L R_L X_k$ et $\rho_G^k R_G^k = \rho_G R_G Y_k$, il est facile de mettre (10.4) sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_L R_L X_k) + \partial_x(\rho_L R_L X_k v_L) &= 0, & k = 1, K, \\ \partial_t(\rho_G R_G Y_k) + \partial_x(\rho_G R_G Y_k v_G) &= 0, & k = 1, K. \end{aligned} \quad (10.9)$$

- En reportant les définitions $\rho X = \rho_L R_L$ et $\rho Y = \rho_G R_G$ dans (10.9), on obtient

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho X X_k) + \partial_x(\rho X X_k v_L) &= 0, & k = 1, K, \\ \partial_t(\rho Y Y_k) + \partial_x(\rho Y Y_k v_G) &= 0, & k = 1, K. \end{aligned} \quad (10.10)$$

Or les flux peuvent se réécrire

$$\rho X X_k v_L = \rho X X_k v + X_k \sigma, \quad \rho Y Y_k v_G = \rho Y Y_k v - Y_k \sigma, \quad (10.11)$$

par application des égalités (9.4) et avec la définition $\sigma = \rho X Y \varphi$. Nous obtenons alors

$$\begin{cases} \partial_t(\rho X X_k) + \partial_x(\rho X X_k v + X_k \sigma) = 0, & k = 1, K, \\ \partial_t(\rho Y Y_k) + \partial_x(\rho Y Y_k v - Y_k \sigma) = 0, & k = 1, K. \end{cases} \quad (10.12)$$

Remarque 10.1.1 *En introduisant, dans les équations de conservation (10.9), les équations de conservation de chaque phase (10.8), on obtient des équations de transport :*

$$\begin{aligned} \partial_t X_k + v_L \partial_x X_k &= 0, & k = 1, K \\ \partial_t Y_k + v_G \partial_x Y_k &= 0, & k = 1, K, \end{aligned} \quad (10.13)$$

qui mettent en évidence 2i invariants de Riemann forts en coordonnées Eulériennes.

L'algorithme proposé devra respecter la positivité des fractions massiques sous une condition CFL. La principale difficulté vient du fait que le transport s'effectue aux vitesses v_L et v_G et non à la vitesse v moyenne.

Nous allons présenter maintenant deux méthodes numériques fondées sur le système découplé. Nous verrons qu'une extension de la méthode de Larrouturou ne fonctionne pas. Nous proposerons alors une méthode numérique fondée sur le système de Born-Infeld. Mais il s'avère que cette méthode est limitée par une condition de Whitham qui n'est pas vérifiée par toutes les lois de glissement.

10.1.1 Une extension de la méthode de Larrouturou

On s'intéresse ici au système

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_L R_L) + \partial_x(\rho_L R_L v_L) &= 0, \\ \partial_t(\rho_G R_G) + \partial_x(\rho_G R_G v_G) &= 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) &= 0, \\ \partial_t(\rho_L R_L X_k) + \partial_x(\rho_L R_L v_L X_k) &= 0, & k = 1, K - 1, \\ \partial_t(\rho_G R_G Y_k) + \partial_x(\rho_G R_G v_G Y_k) &= 0, & k = 1, K - 1. \end{cases} \quad (10.14)$$

10.1.1.1 Construction

On procède à une méthode inspirée des travaux de B. Larrouturou [42]. Nous traitons séparément les 3 premières équations des suivantes. Nous supposons qu'à l'instant n , toutes les quantités conservatives sont connues sur chaque maille :

$$(\rho c_1, \dots, \rho c_K, \rho v)_i^n. \quad (10.15)$$

L'algorithme se compose alors des étapes suivantes.

1. **Décomposition des variables** Nous appelons le modèle thermodynamique de telle sorte que l'on peut calculer les composantes “diphasiques”

$$(\rho_L R_L, \rho_G R_G, \rho v)_i^n \quad (10.16)$$

ainsi que les composantes “compositionnelles”

$$\left((\rho_L R_L X_k)_{k=1,K}, (\rho_G R_G Y_k)_{k=1,K} \right)_i^n, \quad (10.17)$$

pour toutes les mailles i .

2. **Équations diphasiques.** Nous connaissons un schéma explicite capable de procéder à la mise à jour des trois premières composantes de telle sorte que l'on peut calculer les composantes “diphasiques”

$$(\rho_L R_L, \rho_G R_G, \rho v)_i^{n+1} \quad (10.18)$$

ainsi que les flux numériques “diphasiques”

$$\mathbf{H}_{i+1/2}^1 = (\rho_L R_L v_L)_{i+1/2}^n, \quad \mathbf{H}_{i+1/2}^2 = (\rho_G R_G v_G)_{i+1/2}^n, \quad (10.19)$$

pour toutes les arêtes $i + 1/2$.

3. **Transport des constituants.** On définit les flux numériques

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{i+1/2}^4 &= \mathbf{H}_{i+1/2}^1 \times \begin{cases} (X_k)_i^n, & \text{si } \mathbf{H}_{i+1/2}^1 \geq 0, \\ (X_k)_{i+1}^n, & \text{si } \mathbf{H}_{i+1/2}^1 \leq 0, \end{cases} \\ \mathbf{H}_{i+1/2}^5 &= \mathbf{H}_{i+1/2}^2 \times \begin{cases} (Y_k)_i^n, & \text{si } \mathbf{H}_{i+1/2}^2 \geq 0, \\ (Y_k)_{i+1}^n, & \text{si } \mathbf{H}_{i+1/2}^2 \leq 0. \end{cases} \end{aligned}$$

La mise à jour des fractions massiques des constituants dans chaque phase se fait alors grâce au schéma d'évolution

$$(\rho_L R_L X_k)_i^{n+1} = (\rho_L R_L X_k)_i^n - \lambda \left(\mathbf{H}_{i+1/2}^4 - \mathbf{H}_{i-1/2}^4 \right), \quad (10.20)$$

$$(\rho_G R_G Y_k)_i^{n+1} = (\rho_G R_G Y_k)_i^n - \lambda \left(\mathbf{H}_{i+1/2}^5 - \mathbf{H}_{i-1/2}^5 \right), \quad (10.21)$$

pour les constituant $k = 1, K - 1$ et pour chaque maille i , avec $\lambda = \frac{\Delta t^n}{\Delta x}$.

4. **Recomposition des variables** La réactualisation des fractions massiques des constituants se fait par

$$(\rho c_k)_i^{n+1} = (\rho_L R_L X_k)_i^{n+1} + (\rho_G R_G Y_k)_i^{n+1}, \quad (10.22)$$

pour les constituants $k = 1, K - 1$ et pour toutes les mailles i . Le dernier constituant est évalué par

$$\rho_i^{n+1} = (\rho_L R_L)_i^{n+1} + (\rho_G R_G)_i^{n+1}, \quad (10.23)$$

$$(\rho c_K)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} - \sum_{k=1}^{K-1} (\rho c_k)_i^{n+1}. \quad (10.24)$$

Ainsi présenté, le schéma est explicite, c'est à dire précis, vis-à-vis du transport des constituants.

Nous constatons alors un avantage très important de cette technique : le gain en temps calcul. En effet, la taille du système pour lequel il est nécessaire de calculer des flux numériques est réduite : quelque soit le nombre de constituants, nous ne calculons des flux numériques que pour le système gaz-liquide de taille 3.

A ce stade, il reste à démontrer que l'étape 4. de mise à jour des fractions massiques des constituants préserve leur positivité. C'est ce point, essentiel, que nous allons développer par la suite. Nous allons constater qu'il n'est pas possible d'assurer cette contrainte, qui est pour nous minimale, dans le cadre d'un modèle à deux vitesses.

10.1.1.2 Positivité des fractions massiques des constituants

Le schéma de B. Larrouturou est construit dans le but de préserver la positivité des fractions massiques dans le cadre d'un système diphasique à une vitesse. Il est important de noter que le système traité par B. Larrouturou est le même que notre système gaz-liquide, si l'on considère le cas particulier du glissement nul, c'est à dire lorsqu'on considère une seule vitesse $v = v_L = v_G$. Dans son article [42], il fait la démonstration du fait que les mises à jours successives de la fraction massique de gaz respectent le principe du maximum de telle sorte que, pour toute maille i et pour tout pas de temps $n \geq 0$, on a l'égalité

$$\min_j Y_j^0 \leq Y_i^n \leq \max_j Y_j^0$$

sous réserve que le pas de temps vérifie une condition de type CFL. Si on veut comprendre l'application que l'on en fait ici, il est indispensable d'analyser dans le détail la démonstration qu'il propose. Elle est fondée sur la structure de la mise à jour de la densité et de la fraction massique de gaz. On suppose que le schéma numérique est tel que $\rho_i^{n+1} > 0$. Il est alors possible de démontrer que la fraction massique à l'itéré $n + 1$ est une combinaison linéaire positive des fractions massiques à l'itéré n , sous la condition CFL. Donc, si les fractions massiques sont positives à l'itéré n , elles le sont également à l'itéré $n + 1$.

Pour nous, supposons qu'à l'itéré n , nous avons :

$$\rho_i^n \geq 0, \quad Y_i^n \geq 0, \quad X_i^n \geq 0, \quad (Y_k)_i^n \geq 0, \quad (X_k)_i^n \geq 0, \quad (c_k)_i^n \geq 0, \quad (10.25)$$

pour toutes les mailles i et tous les constituants $k = 1, K$. On suppose que le schéma numérique "diphasique" est tel que

$$\rho_i^{n+1} \geq 0, \quad Y_i^{n+1} \geq 0, \quad X_i^{n+1} \geq 0. \quad (10.26)$$

Pour nous, il y a deux possibilités pour démontrer que

$$c_i^{n+1} = (X X_k)_i^{n+1} + (Y Y_k)_i^{n+1} \geq 0. \quad (10.27)$$

Soit on démontre que chaque membre est positif, d'où il suit que la somme est également positive, soit on démontre directement cette inégalité.

- Empruntons la première voie et tentons de démontrer que $(X_k)_i^{n+1} \geq 0$ et $(Y_k)_i^{n+1} \geq 0$. Par introduction de la définition $\rho X X_k = \rho_L R_L X_k$ dans (10.20), il vient

$$(\rho X X_k)_i^{n+1} = (\rho X X_k)_i^n - \lambda \left(\mathbf{H}_{i+1/2}^4 - \mathbf{H}_{i-1/2}^4 \right), \quad (10.28)$$

et de même pour les fractions massiques de gaz. Supposons maintenant que $\mathbf{H}_{i\pm 1/2}^1 \geq 0$. Alors, on a

$$(XX_k)_i^{n+1} = \frac{\left[(\rho X)_i^n - \lambda \mathbf{H}_{i+1/2}^1 \right] (X_k)_i^n + \lambda \mathbf{H}_{i-1/2}^1 (X_k)_{i-1}^n}{\rho_i^{n+1}} \quad (10.29)$$

et de même pour $(YY_k)_i^{n+1}$. Nous sommes donc amenés à imposer $(\rho X)_i^n - \lambda \mathbf{H}_{i+1/2}^1 \geq 0$ c'est à dire

$$\lambda \frac{\mathbf{H}_{i+1/2}^1}{\rho_i^n} \leq X_i^n, \quad (10.30)$$

de telle sorte que $(XX_k)_i^{n+1} \geq 0$. Il faut maintenant détailler le flux numérique sous la forme $\mathbf{H}_{i+1/2}^1 = (\rho X v + \sigma)_{i+1/2}$ où $\sigma = \rho X Y \varphi$ avec $\varphi = v_L - v_G$ est le glissement.

Nous utilisons le schéma de relaxation défini dans la première partie de cette thèse pour le système gaz-liquide, pour lequel nous avons démontré qu'il préserve la positivité des fractions massiques de liquide et de gaz : $Y_i^{n+1} \geq 0$ et $X_i^{n+1} \geq 0$. Alors le flux numérique est celui d'un schéma de Godunov

$$\mathbf{H}_{i+1/2}^1 = \rho^* X^* v^* + \Sigma^*, \quad (10.31)$$

avec $\rho^* \geq 0$ et $X^* \geq 0$.

Supposons dans un premier temps que le glissement est nul. Nous allons vérifier que, dans le cas particulier $\varphi = 0$ (qui est celui de B. Larrouturou), la condition de positivité (10.30) est

$$\lambda \frac{\rho^* v^*}{\rho_i^n} \leq 1, \quad (10.32)$$

avec ρ^* et v^* les états intermédiaires définis par (3.50). Comme le glissement est nul, $\sigma = 0$ donc, par définition, $\Sigma^* = 0$. Par ailleurs, par hypothèse, $\mathbf{H}_{i+1/2}^1 \geq 0$ donc $v^* \geq 0$. Par conséquent, la fraction massique de liquide X^* est "décentrée amont" : $X^* = X_i^n$. Ainsi, le flux numérique se simplifie en $\mathbf{H}_{i+1/2}^1 = \rho^* X_i^n v^*$. Il est alors évident que si $X_i^n = 0$, alors la condition (10.30) est trivialement vérifiée, puisque le flux $\mathbf{H}_{i+1/2}^1$ est nul. Par opposition, si $X_i^n \neq 0$, alors on peut simplifier (10.30) pour trouver la condition (10.32). Notons que, sur le plan de la stricte logique, il serait désormais nécessaire de compléter cette démonstration dans le cas où les flux $\mathbf{H}_{i\pm 1/2}^1$ ne sont pas tous positifs. Mais notre but n'est pas de faire cette démonstration, mais bien de trouver un contre-exemple dans le cas où le glissement est non nul : c'est ce que nous allons faire.

Supposons maintenant que le glissement est non nul : désormais, $\Sigma^* \neq 0$. Nous allons montrer que la condition (10.30) ne peut être vérifiée si $X_i^n = 0$ et $X_{i+1}^n \neq 0$. En effet, il n'est plus possible de démontrer que le flux numérique est nul. En particulier, si $v^* - b\tau_{\mathbf{L}}^* < 0$ et $v^* > 0$ (avec τ le co-volume défini par $\tau = 1/\rho$), la solution du problème de Riemann est $X^* = \frac{X_i^n + X_{i+1}^n}{2} + \frac{X_i^n - X_{i+1}^n}{2b} \neq 0$.

– Empruntons la seconde voie. Supposons maintenant que $\mathbf{H}_{i\pm 1/2}^{1,2}$ sont positifs ou nuls. Il vient

$$(c_k)_i^{n+1} = \frac{\left[(\rho X)_i^n - \lambda \mathbf{H}_{i+1/2}^1 \right] (X_k)_i^n + \left[(\rho Y)_i^n - \lambda \mathbf{H}_{i+1/2}^2 \right] (Y_k)_i^n + \lambda \mathbf{H}_{i-1/2}^1 (X_k)_{i-1}^n + \lambda \mathbf{H}_{i-1/2}^2 (Y_k)_{i-1}^n}{\rho_i^{n+1}}, \quad (10.33)$$

$$\begin{aligned}
 & (\rho X X_k)_i^n + (\rho Y X_k)_i^n - \lambda \left[\mathbf{H}_{i+1/2}^1 (X_k)_i^n + \mathbf{H}_{i+1/2}^2 (Y_k)_i^n \right] + \\
 & \quad + \lambda \left[\mathbf{H}_{i-1/2}^1 (X_k)_{i-1}^n + \mathbf{H}_{i-1/2}^2 (Y_k)_{i-1}^n \right] \\
 = & \frac{\quad}{\rho_i^{n+1}}, \quad (10.34)
 \end{aligned}$$

En introduisant la notation $(\rho c_k)_i^n = (\rho X X_k)_i^n + (\rho Y X_k)_i^n$, nous sommes donc amenés à imposer $(\rho c_k)_i^n - \lambda \left[\mathbf{H}_{i+1/2}^1 (X_k)_i^n + \mathbf{H}_{i+1/2}^2 (Y_k)_i^n \right] \geq 0$ c'est à dire

$$\lambda \frac{\mathbf{H}_{i+1/2}^1 (X_k)_i^n + \mathbf{H}_{i+1/2}^2 (Y_k)_i^n}{\rho_i^n} \leq (c_k)_i^n. \quad (10.35)$$

Sous cette condition, on est assuré que $(c_k)_i^{n+1} \geq 0$. De même que tout à l'heure, si le glissement est nul, la démonstration est possible et si le glissement est non nul, elle ne l'est pas.

10.1.1.3 Conclusion

Nous avons montré qu'une extension naturelle du schéma de B. Larroutou est possible mais conduit à un schéma qui ne préserve pas la positivité des fractions massiques des constituants. La raison principale est que le système traité par B. Larroutou concerne un mélange de différents gaz (de telle sorte que $\varphi = v_L - v_G = 0$) et non un mélange gaz-liquide (pour lequel $\varphi = v_L - v_G \neq 0$).

Comme la positivité est pour nous une contrainte centrale, nous abandonnons cette stratégie et nous en proposons une autre qui, comme nous allons le voir, a elle aussi ses limites.

10.1.2 Relaxation découplée par Born-Infeld

On considère le système

$$\begin{cases}
 \partial_t(\rho_L R_L) + \partial_x(\rho_L R_L v_L) & = 0, \\
 \partial_t(\rho_G R_G) + \partial_x(\rho_G R_G v_G) & = 0, \\
 \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho_L R_L v_L^2 + \rho_G R_G v_G^2 + p) & = 0, \\
 \partial_t(\rho X X_k) + \partial_x(\rho X X_k v + X_k \sigma) & = 0, \quad k = 1, K-1, \\
 \partial_t(\rho Y Y_k) + \partial_x(\rho Y Y_k v - Y_k \sigma) & = 0, \quad k = 1, K-1.
 \end{cases} \quad (10.36)$$

Il a déjà été vu que le système précédent peut se mettre sous la forme

$$\begin{cases}
 \partial_t(\rho) + \partial_x(\rho v) & = 0, \\
 \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v^2 + P) & = 0, \\
 \partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho Y v - \sigma) & = 0, \\
 \partial_t(\rho X X_k) + \partial_x(\rho X X_k v + X_k \sigma) & = 0, \quad k = 1, K-1, \\
 \partial_t(\rho Y Y_k) + \partial_x(\rho Y Y_k v - Y_k \sigma) & = 0, \quad k = 1, K-1,
 \end{cases} \quad (10.37)$$

avec $\sigma = \rho X Y \varphi$ et $P = p + \rho X Y \varphi^2$. En coordonnées Lagrangiennes, définies par le changement de variables, $dy = \rho dx - \rho v dt$, le système devient

$$\begin{cases}
 \partial_t \tau - \partial_y v & = 0, \\
 \partial_t Y - \partial_y \sigma & = 0, \\
 \partial_t v + \partial_y P & = 0, \\
 \partial_t (X X_k) + \partial_y (X_k \sigma) & = 0, \quad k = 1, K-1, \\
 \partial_t (Y Y_k) + \partial_y (-Y_k \sigma) & = 0, \quad k = 1, K-1.
 \end{cases} \quad (10.38)$$

Il est facile de démontrer que :

$$\begin{aligned} X \partial_t X_k + \sigma \partial_y X_k &= 0, & k = 1, K, \\ Y \partial_t Y_k - \sigma \partial_y Y_k &= 0, & k = 1, K. \end{aligned} \quad (10.39)$$

Ces deux dernières équations permettent d'exhiber les invariants forts du précédent système, ainsi que les valeurs propres associées.

Nous pouvons faire une analogie entre les systèmes (10.13) et (10.39). Elle montrent que les vitesses de transport des fractions massiques X_k et Y_k sont v_L et v_G en coordonnées Eulériennes et sont $\frac{\sigma}{X}$ et $-\frac{\sigma}{Y}$ en coordonnées Lagrangiennes.

On constate que les vitesses caractéristiques $-\frac{\sigma}{Y}$ et $\frac{\sigma}{X}$ peuvent donner lieu à des valeurs propres indéterminées lors de l'évaluation de la solution du problème de Riemann. En effet, si nous relaxons le système de la manière de la première partie de cette thèse, il vient que la solution du problème de Riemann fait apparaître les états intermédiaires $-\frac{\Sigma^*}{Y^*}$ et $\frac{\Sigma^*}{X^*}$. Ainsi, si $Y^* = 0$ ou $X^* = 0$, il devient impossible de définir ces fractions. C'est pourquoi nous proposons d'utiliser, pour relaxer l'équation de conservation de la fraction massique de gaz, d'utiliser la variante de Born-Infeld. Cette proposition se fonde sur l'article en annexe C qui définit le schéma dans le cas d'une équation de conservation scalaire ainsi que dans le cas du système gaz-liquide.

Nous introduisons les variables supplémentaires w et z qui représentent $-\frac{\sigma}{Y}$ et $\frac{\sigma}{X}$, c'est à dire les vitesses des phases liquide et gaz en coordonnées Lagrangiennes. Définissons donc

$$w = -\rho(1 - Y)\varphi(\mathbf{u}), \quad z = \rho Y\varphi(\mathbf{u}). \quad (10.40)$$

On décide alors de considérer plutôt le système de relaxation suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_y v = 0 \\ \partial_t v + \partial_y \Pi = 0 \\ \partial_t \Pi + a^2 \partial_y v = \lambda(P - \Pi) \\ \partial_t w + z \partial_y w = \lambda(1 - Y)(\varphi - \Phi) \\ \partial_t z + w \partial_y z = -\lambda Y(\varphi - \Phi) \\ \partial_t X_k + z \partial_y X_k = 0, & k = 1, K - 1 \\ \partial_t Y_k + w \partial_y Y_k = 0, & k = 1, K - 1. \end{cases} \quad (10.41)$$

En coordonnées Eulériennes, le système devient :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0 \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v^2 + \Pi) = 0 \\ \partial_t(\rho \Pi) + \partial_x(\rho \Pi v + a^2 v) = \lambda \rho(P - \Pi) \\ \partial_t w + (v + z\tau) \partial_x w = \lambda \rho(1 - Y)(\varphi - \Phi) \\ \partial_t z + (v + w\tau) \partial_x z = -\lambda \rho Y(\varphi - \Phi) \\ \partial_t X_k + (v + z\tau) \partial_x X_k = 0, & k = 1, K - 1 \\ \partial_t Y_k + (v + w\tau) \partial_x Y_k = 0, & k = 1, K - 1. \end{cases} \quad (10.42)$$

Tous les champs de ce système sont linéairement dégénérés. On peut envisager d'appliquer un solveur de Godunov.

10.1.2.1 Conclusion

Il a été démontré (voir l'annexe C) que cette stratégie nous contraint à vérifier que la loi de glissement vérifie une condition de Whitham. Or, nous cherchons une méthode numérique qui permette d'assurer la robustesse du schéma quelque soit la loi de glissement. C'est pourquoi cette stratégie a été abandonnée.

10.1.3 Conclusions

Nous n'avons pas développé plus avant les deux propositions précédentes.

La première technique, fondé sur une extension de la méthode de Larroutourou, n'est pas envisageable dans le cadre d'écoulements diphasiques. En effet, nous avons montré que la positivité des fractions massiques n'est pas assurée à cause de la loi de glissement.

La seconde technique, fondée sur le système de Born-Infeld, est soumise à une condition de Whitham qui est satisfaite pour certaines lois de glissement, mais pas pour toutes.

Nous cherchons alors une technique qui permette de résoudre la contradiction d'avoir un schéma qui préserve la positivité des fractions massiques des constituants pour tout loi de glissement. Nous allons voir que cette méthode existe. Elle est fondée sur une extension de la technique présentée dans la première partie. Il est ici important de noter que le calcul des coefficients de relaxation est rendu possible par le fait qu'on considère, lors du développement de Chapman-Enskog, que le p-système (les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement) et les équations d'évolution des fractions massiques sont découplées. Nous reviendrons sur cette idée par la suite.

10.2 Méthode préservant la positivité

Dans cette méthode, on se propose d'exploiter la structure des équations d'évolution des fractions massiques des constituants. La méthode est une extension de celle proposée dans le chapitre 3. Nous proposons d'approcher les solutions du système initiales par celles d'un système de relaxation dont tous les champs sont linéairement dégénérés. Cette méthode de relaxation est fondée sur une méthode de Godunov pour laquelle la résolution du problème de Riemann est triviale, donc peu coûteuse. Nous verrons qu'il est possible d'assurer la positivité de la densité et des fractions massiques des constituants, à condition d'augmenter des coefficients de relaxation. Rappelons que cela revient à introduire une diffusion numérique supplémentaire : la méthode de relaxation peut être vue comme une méthode introduisant de façon automatique la diffusion numérique nécessaire.

Nous verrons qu'il est possible, sur la base du schéma de relaxation explicite, de construire un schéma numérique semi-implicite linéaire permettant d'avoir un schéma à la fois peu coûteux et précis sur les ondes de transport de masse.

Nous proposons de considérer directement le système diphasique compositionnel isotherme sous la forme

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v^2 + P) = 0, \\ \partial_t(\rho c_k) + \partial_x(\rho c_k v + \sigma_k) = 0, \quad k = 1, K - 1, \end{cases} \quad (10.43)$$

avec les notations

$$\begin{aligned} \sigma &= \rho XY \varphi, & P &= p + \sigma \varphi, \\ \sigma_k &= -\xi_k \sigma, & \xi_k &= Y_k - X_k, \quad k = 1, K - 1. \end{aligned} \quad (10.44)$$

Dans la suite, nous noterons le précédent système

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathcal{F}(\mathbf{u}) = 0 \quad (10.45)$$

où les définitions de \mathbf{u} et \mathcal{F} sont claires.

Nous notons \mathbb{I}_{K-1} la matrice identité d'ordre $K-1$. La matrice Jacobienne de \mathcal{F} est

$$\nabla \mathcal{F}(\mathbf{u}) = \left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ -v^2 & 2v & 0 \\ \hline -c_1 v & c_1 & v \mathbb{I}_{K-1} \\ \vdots & \vdots & \\ -c_{K-1} v & c_{K-1} & \end{array} \right) + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ P_\rho & P_q & P_{\rho_1} & \dots & P_{\rho_{K-1}} \\ (\sigma_1)_\rho & (\sigma_1)_q & (\sigma_1)_{\rho_1} & \dots & (\sigma_1)_{\rho_{K-1}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\sigma_{K-1})_\rho & (\sigma_{K-1})_q & (\sigma_{K-1})_{\rho_1} & \dots & (\sigma_{K-1})_{\rho_{K-1}} \end{pmatrix}.$$

Le calcul de cette matrice requiert $3K$ opérations.

FIG. 10.1 – Détail de la matrice Jacobienne de \mathcal{F}

10.2.1 Relaxation du système

Si l'on écrit le système en coordonnées Lagrangiennes, il vient

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_y v = 0, \\ \partial_t v + \partial_y P = 0, \\ \partial_t c_k + \partial_y \sigma_k = 0, \quad k = 1, K-1. \end{cases} \quad (10.46)$$

Nous proposons de relaxer les termes non linéaires qui apparaissent dans la formulation Lagrangienne du système. Nous introduisons alors la variable supplémentaire Π qui relaxe la pseudo-pression P ainsi qu'une variable supplémentaire Σ_k qui relaxe la fonction σ_k pour chaque constituant k . Nous proposons alors d'étudier plutôt le système de relaxation

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_y v = 0, \\ \partial_t v + \partial_y \Pi = 0, \\ \partial_t \Pi + a^2 \partial_y v = \lambda(P - \Pi), \\ \partial_t c_k + \partial_y \Sigma_k = 0, \quad k = 1, K-1, \\ \partial_t \Sigma_k + b^2 \partial_y c_k = \lambda(\sigma_k - \Sigma_k), \quad k = 1, K-1. \end{cases} \quad (10.47)$$

Il doit être noté que l'on a choisi de n'introduire qu'un seul coefficient de relaxation b pour toutes les équations relaxées. Nous aurions pu choisir autant de coefficients b_k que de constituants. Si l'on opte pour cette stratégie,

1. il est plus délicat d'imposer le principe du maximum pour les constituants (voir la suite de l'étude),
2. la résolution du problème de Riemann est nettement plus complexe, à cause du grand nombre de valeurs propres,
3. il est probable que la diffusion numérique ne soit pas réduite de façon significative, à cause d'un dimensionnement très proche des fonctions σ_k et leurs dérivées.

Nous persistons donc dans notre choix d'un b unique.

Le système en coordonnées Eulériennes est alors

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v^2 + \Pi) = 0, \\ \partial_t(\rho \Pi) + \partial_x(\rho \Pi v + a^2 v) = \lambda \rho(P - \Pi), \\ \partial_t(\rho c_k) + \partial_x(\rho c_k v + \Sigma_k) = 0, \quad k = 1, K-1, \\ \partial_t(\rho \Sigma_k) + \partial_x(\rho \Sigma_k v + b^2 c_k) = \lambda \rho(\sigma_k - \Sigma_k), \quad k = 1, K-1. \end{cases} \quad (10.48)$$

Par la suite, nous noterons le précédent système

$$\partial_t \mathbf{v} + \partial_x \mathcal{G}(\mathbf{v}) = \lambda \mathcal{R}(\mathbf{v}), \quad (10.49)$$

où les définitions de \mathbf{v} , \mathcal{G} et \mathcal{R} sont claires.

La matrice Jacobienne de \mathcal{G} est

$$\nabla \mathcal{G}(\mathbf{v}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -v^2 & 2v & 0 & \\ -\Pi v & \Pi & v & \\ \hline -c_1 v & c_1 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ -c_{K-1} v & c_{K-1} & 0 & \\ -\Sigma_1 v & \Sigma_1 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ -\Sigma_{K-1} v & \Sigma_{K-1} & 0 & \end{array} v \mathbb{I}_{2(K-1)} \right) + \left(\begin{array}{ccc|c|c} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Pi \tau & 0 & \tau & & \\ -a^2 v \tau & a^2 \tau & 0 & & \\ \hline -\Sigma_1 \tau & 0 & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ -\Sigma_{K-1} \tau & 0 & 0 & & \\ \hline -b^2 c_1 \tau & 0 & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & b^2 \tau \mathbb{I}_{K-1} & \\ -b^2 c_{K-1} \tau & 0 & 0 & & \end{array} \right).$$

Le calcul de la matrice $\nabla \mathcal{G}$ requiert $11K + 6$ opérations. La matrice des vecteurs propres à droite de \mathcal{G} est

$$R(\mathbf{v}) = \left(\begin{array}{c|c|c|c|c} 1 & & 1 & & 1 \\ v - a\tau & 0 & v & 0 & v + a\tau \\ \Pi + a^2\tau & & \Pi & & \Pi + a^2\tau \\ \hline c_1 & & c_1 & & c_1 \\ \vdots & \mathbb{I}_{K-1} & \vdots & \mathbb{I}_{K-1} & \vdots \\ c_{K-1} & & c_{K-1} & & c_{K-1} \\ \hline \Sigma_1 & & \Sigma_1 & & \Sigma_1 \\ \vdots & -b \mathbb{I}_{K-1} & \vdots & b \mathbb{I}_{K-1} & \vdots \\ \Sigma_{K-1} & & \Sigma_{K-1} & & \Sigma_{K-1} \end{array} \right).$$

FIG. 10.2 – Détail de la matrice Jacobienne de \mathcal{G}

En coordonnées Lagrangiennes, le système de relaxation homogène trouve la formulation non conservative

$$\begin{cases} \partial_t(\Pi + a^2\tau) = 0, \\ \partial_t(\Pi + av) + a \partial_y(\Pi + av) = 0, \\ \partial_t(\Pi - av) - a \partial_y(\Pi - av) = 0, \\ \partial_t(\Sigma_k + b c_k) + b \partial_y(\Sigma_k + b c_k) = 0, \quad k = 1, K-1, \\ \partial_t(\Sigma_k - b c_k) - b \partial_y(\Sigma_k - b c_k) = 0, \quad k = 1, K-1. \end{cases} \quad (10.50)$$

Lemme 10.2.1 *Les valeurs propres du système (10.48) sont $v \pm a\tau$, $v \pm b\tau$ et v et sont associées à des champs linéairement dégénérés.*

PREUVE L'analyse du système (10.50) montre que les valeurs propres du système en coordonnées Lagrangiennes sont constantes et valent $\pm a$, $\pm b$, 0. Par conséquent, en coordonnées Eulériennes, les valeurs propres du système sont $v \pm a\tau$, $v \pm b\tau$ et v et tous les champs sont linéairement dégénérés. Les valeurs propres $v \pm b\tau$ sont de multiplicité $K - 1$. \square

10.2.2 Coefficients de relaxation

Nous proposons les coefficients de relaxation

$$a^2 = -P_\tau + P_v^2, \quad b = \max_{k=1, K-1} |(\sigma_k)_{c_k}|. \quad (10.51)$$

Ces coefficients sont issus du développement de Chapman-Enskog, que nous ne reportons pas ici. Il se déduit immédiatement des développements écrits dans l'article du chapitre 5.

Le détail du calcul des dérivées partielles est donné dans les figures 11.7–11.8.

Notons ici la simplicité de la technique de calcul des coefficients de relaxation. Par opposition, les calculs issus d'un développement de Chapman-Enskog couplé (c'est à dire en tenant compte du système complet) auraient été d'une complexité beaucoup plus grande, rendant la technique impossible : assurer la positivité des valeurs propres d'une matrice de taille $1 + 2K$ paraît très difficile. Cette technique est donc un point central de cette étude.

Cette simplicité est rendue possible par le fait que l'on découple, lors du développement de Chapman-Enskog, le 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.

Il faut par ailleurs noter que le développement de Chapman-Enskog ne mène à la stabilité que de façon formelle. Il s'agit d'une heuristique fondée sur le bon comportement des solutions approchées obtenues par ce schéma.

10.2.3 Solution du problème de Riemann

Considérons l'état initial

$$\mathbf{v}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{v}_L & \text{si } x < 0, \\ \mathbf{v}_R & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (10.52)$$

\mathbf{v}_L et \mathbf{v}_R étant des états constants. Notons que \mathbf{v}_L et \mathbf{v}_R sont à l'équilibre : $\Pi_\alpha = P(\mathbf{u}_\alpha)$ et $(\Sigma_k)_\alpha = \sigma_k(\mathbf{u}_\alpha)$ pour $\alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R}$.

En vertu du lemme (10.2.1), les champs sont linéairement dégénérés et la solution est donc uniquement constituée de discontinuités de contact séparant au plus 6 états constants. La technique de résolution est identique à celle du chapitre (3) et nous ne la reproduisons pas ici.

Nous adoptons les notations

$$\forall \phi \in \mathbb{R}, \quad \bar{\phi} := \frac{\phi_L + \phi_R}{2}, \quad \Delta\phi := \phi_L - \phi_R, \quad \langle \phi \rangle := \frac{\Delta\phi}{2}. \quad (10.53)$$

Posons maintenant

$$\begin{aligned} \tau_L^* &= \tau_L + \frac{\Pi_L - \Pi^*}{a^2}, & \tau_R^* &= \tau_R + \frac{\Pi_R - \Pi^*}{a^2}, \\ v^* &= \bar{v} + \frac{1}{a} \langle \Pi \rangle, & \Pi^* &= \bar{\Pi} + a \langle v \rangle, \\ c_k^* &= \bar{c}_k + \frac{1}{b} \langle \Sigma_k \rangle, & \Sigma_k^* &= \bar{\Sigma}_k + b \langle c_k \rangle, \quad k = 1, K-1. \end{aligned} \quad (10.54)$$

La solution du problème de Riemann est constituée de 6 états constants, à savoir

$$\mathbf{v}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{v}_L & \text{si } x < \mu_1 t, \\ \mathbf{v}_j & \text{si } \mu_j t < x < \mu_{j+1} t, \quad j = 1, 4, \\ \mathbf{v}_R & \text{si } \mu_5 t < x. \end{cases} \quad (10.55)$$

Nous supposons que $a > b$ car le transport des constituants est associé à une vitesse lente du système hyperbolique.

Remarquons qu'il suffit d'augmenter suffisamment a de telle sorte que $\tau_{\mathbf{L}}^* > 0$ et $\tau_{\mathbf{R}}^* > 0$. Sous ces hypothèses, les valeurs propres sont

$$\underbrace{v_{\mathbf{L}} - a\tau_{\mathbf{L}}}_{\mu_1} < \underbrace{v^* - b\tau_{\mathbf{L}}^*}_{\mu_2} < \underbrace{v^*}_{\mu_3} < \underbrace{v^* + b\tau_{\mathbf{R}}^*}_{\mu_4} < \underbrace{v_{\mathbf{R}} + a\tau_{\mathbf{R}}}_{\mu_5}$$

et les états intermédiaires sont

$$\left(\begin{array}{c} \rho_{\mathbf{L}}^* \\ \rho_{\mathbf{L}}^* v^* \\ \rho_{\mathbf{L}}^* \Pi^* \\ \rho_{\mathbf{L}}^* \{c_{k,\mathbf{L}}\}_{k=1,K-1} \\ \rho_{\mathbf{L}}^* \{\Sigma_{k,\mathbf{L}}\}_{k=1,K-1} \end{array} \right), \quad \left(\begin{array}{c} \rho_{\mathbf{L}}^* \\ \rho_{\mathbf{L}}^* v^* \\ \rho_{\mathbf{L}}^* \Pi^* \\ \rho_{\mathbf{L}}^* \{c_k^*\}_{k=1,K-1} \\ \rho_{\mathbf{L}}^* \{\Sigma_k^*\}_{k=1,K-1} \end{array} \right), \quad \left(\begin{array}{c} \rho_{\mathbf{R}}^* \\ \rho_{\mathbf{R}}^* v^* \\ \rho_{\mathbf{R}}^* \Pi^* \\ \rho_{\mathbf{R}}^* \{c_k^*\}_{k=1,K-1} \\ \rho_{\mathbf{R}}^* \{\Sigma_k^*\}_{k=1,K-1} \end{array} \right), \quad \left(\begin{array}{c} \rho_{\mathbf{R}}^* \\ \rho_{\mathbf{R}}^* v^* \\ \rho_{\mathbf{R}}^* \Pi^* \\ \rho_{\mathbf{R}}^* \{c_{k,\mathbf{R}}\}_{k=1,K-1} \\ \rho_{\mathbf{R}}^* \{\Sigma_{k,\mathbf{R}}\}_{k=1,K-1} \end{array} \right).$$

$\mathbf{v}_1 \qquad \mathbf{v}_2 \qquad \mathbf{v}_3 \qquad \mathbf{v}_4$

Les précédents vecteurs sont de taille $2K + 1$. La structure de la solution est schématisée à la figure (10.3).

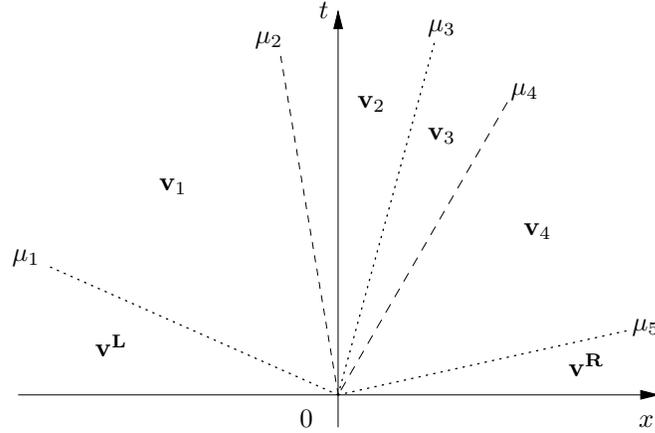


FIG. 10.3 – Solution du problème de Riemann pour le système relaxé

10.2.4 Positivité de la densité, des fractions massiques

Il est possible d'augmenter suffisamment a pour avoir $\tau_{\mathbf{L}}^*$ et $\tau_{\mathbf{R}}^*$ positifs de telle sorte que la densité ρ_i^{n+1} reste positive, comme nous l'avons déjà vu dans le chapitre 3. En effet, si a vérifie l'inégalité

$$a(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) \geq a_p(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) := \frac{\langle v \rangle + \sqrt{\langle v \rangle^2 + 4 \max(\tau_{\mathbf{L}}, \tau_{\mathbf{R}}) |\langle \Pi \rangle|}}{2 \min(\tau_{\mathbf{L}}, \tau_{\mathbf{R}})}, \quad (10.56)$$

alors $\tau_{\mathbf{L}}^*$ et $\tau_{\mathbf{R}}^*$ sont strictement positifs. Le but de ce paragraphe est de montrer qu'il est possible d'assurer un principe du maximum sur les fractions massiques des constituants, quitte à augmenter suffisamment le coefficient de relaxation b .

Notons que (10.54) définit c_k^* pour $k = 1, K - 1$ et ne définit pas c_K^* . Nous allons voir qu'en fait l'expression de ce dernier est identique aux autres.

Lemme 10.2.2 *Définissons la fraction massique intermédiaire du dernier constituant par*

$$c_K^* = 1 - \sum_{k=1}^{K-1} c_k^*. \quad (10.57)$$

Alors, on a

$$c_K^* = \overline{c_K} + \frac{1}{b} \langle \Sigma_K \rangle. \quad (10.58)$$

PREUVE

Si on insère la définition des fractions massiques des constituants (10.54) dans (10.57), il vient

$$c_K^* = 1 - \sum_{k=1}^{K-1} \overline{c_k} - \frac{1}{b} \sum_{k=1}^{K-1} \langle \Sigma_k \rangle = \overline{c_K} - \frac{1}{b} \sum_{k=1}^{K-1} \langle \Sigma_k \rangle. \quad (10.59)$$

Or il est facile de vérifier que les fonctions non-linéaires σ_k possèdent la propriété d'avoir une somme nulle

$$\sum_{k=1, K} \sigma_k(\mathbf{u}) = \left[\sum_{k=1, K} \xi_k(\mathbf{u}) \right] \sigma(\mathbf{u}) = 0. \quad (10.60)$$

Or les états gauche et droit du problème de Riemann sont à l'équilibre de telle sorte que $(\Sigma_K)_{\mathbf{L}} = \sigma_K(\mathbf{u}_{\mathbf{L}})$ et $(\Sigma_K)_{\mathbf{R}} = \sigma_K(\mathbf{u}_{\mathbf{R}})$. On voit alors que $\langle \Sigma_K \rangle = -\sum_{k=1}^{K-1} \langle \Sigma_k \rangle$. On conclut alors que c_K^* trouve l'expression (10.58). \square

Montrons maintenant qu'il est possible d'augmenter suffisamment b pour avoir $c_k^* \geq 0$ pour $k = 1, K$. En effet, nous avons vu dans le premier article de la partie 1 que cela permettait de démontrer que $(c_k)_i^{n+1} \geq 0$.

Nous allons démontrer deux théorèmes. Le premier donne, sans aucune hypothèse sur les propriétés thermodynamiques du mélange, le coefficient de relaxation b minimal permettant d'avoir des fractions massiques des constituants positifs. Dans le second, nous restreindrons notre étude aux fluides possédant une propriété thermodynamique nous permettant de diminuer le coefficient de relaxation, et donc la diffusion numérique.

Rappelons tout d'abord ce résultat.

Lemme 10.2.3 *Supposons que $(r_\alpha, s_\alpha, t_\alpha) \in \mathbb{R}^3$ avec $\alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R}$ vérifiant les trois conditions*

$$r_\alpha \in [0, 1], \quad s_\alpha \in [0, 1], \quad \overline{r s} \in [0, \frac{1}{2}]. \quad (10.61)$$

Alors, on a l'inégalité

$$|\Delta(rst)| \leq |\overline{t}| + \frac{|\Delta t|}{2}. \quad (10.62)$$

Théorème 10.2.4 *Soit $\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}$ deux états de Ω . Supposons que $a(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) \geq a_p(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}})$. Si*

$$b(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) \geq b_p(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) := |(\rho\varphi)_{\mathbf{L}} + (\rho\varphi)_{\mathbf{R}}| + |(\rho\varphi)_{\mathbf{L}} - (\rho\varphi)_{\mathbf{R}}| \quad (10.63)$$

alors $c_k^* \geq 0$ pour $k = 1, K$.

PREUVE D'après la définition, imposer $c_k^* \geq 0$ revient à trouver b tel que

$$b \geq -\frac{\langle \Sigma_k \rangle}{\overline{c_k}}. \quad (10.64)$$

L'idée principale de la preuve est de trouver une expression convenable du membre de droite, de telle sorte qu'on puisse directement appliquer le lemme (10.2.3) nous permettant d'avoir une fine estimation du majorant. On utilise la définition $\sigma_k = XY(X_k - Y_k)\rho\varphi$ et il vient :

$$\frac{\langle \Sigma_k \rangle}{\bar{c}_k} = \frac{X_{\mathbf{L}}Y_{\mathbf{L}}(X_k - Y_k)_{\mathbf{L}}(\rho\varphi)_{\mathbf{L}} - X_{\mathbf{R}}Y_{\mathbf{R}}(X_k - Y_k)_{\mathbf{R}}(\rho\varphi)_{\mathbf{R}}}{2\bar{c}_k} \quad (10.65)$$

$$= Y_{\mathbf{L}} \frac{(XX_k)_{\mathbf{L}}}{2\bar{c}_k} (\rho\varphi)_{\mathbf{L}} - Y_{\mathbf{R}} \frac{(XX_k)_{\mathbf{R}}}{2\bar{c}_k} (\rho\varphi)_{\mathbf{R}} \quad (10.66)$$

$$- X_{\mathbf{L}} \frac{(YY_k)_{\mathbf{L}}}{2\bar{c}_k} (\rho\varphi)_{\mathbf{L}} + X_{\mathbf{R}} \frac{(YY_k)_{\mathbf{R}}}{2\bar{c}_k} (\rho\varphi)_{\mathbf{R}} \quad (10.67)$$

On adopte alors les notations

$$p_\alpha = \frac{(XX_k)_\alpha}{2\bar{c}_k}, \quad q_\alpha = \frac{(YY_k)_\alpha}{2\bar{c}_k}, \quad t_\alpha = (\rho\varphi)_\alpha, \quad \alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R} \quad (10.68)$$

et il vient

$$\frac{\langle \Sigma_k \rangle}{\bar{c}_k} = \Delta(Ypt) - \Delta(Xqt). \quad (10.69)$$

On peut alors voir que l'on peut appliquer le lemme deux fois successivement, après avoir vérifié les trois hypothèses. Ces trois vérifications sont fondées sur l'hypothèse naturelle que toutes les fractions massiques des états gauche et droit sont positives à l'itération n :

$$X_\alpha \geq 0, \quad Y_\alpha \geq 0, \quad (X_k)_\alpha \geq 0, \quad (Y_k)_\alpha \geq 0, \quad \alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R}, \quad k = 1, K. \quad (10.70)$$

1. Par hypothèse, on a $Y_\alpha \in [0, 1]$ et $X_\alpha \in [0, 1]$ ce qui implique que la première hypothèse du lemme est vrai, d'abord avec $r_\alpha = Y_\alpha$, ensuite avec $r_\alpha = X_\alpha$.
2. Par hypothèse, on a $(c_k)_\alpha \geq 0$ et $(XX_k)_\alpha \geq 0$. Il est alors clair que

$$0 \leq \frac{(XX_k)_\alpha}{\underbrace{(XX_k)_{\mathbf{L}} + (YY_k)_{\mathbf{L}} + (XX_k)_{\mathbf{R}} + (YY_k)_{\mathbf{R}}}_{2\bar{c}_k}} \leq 1, \quad (10.71)$$

pour $\alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R}$. Donc $p_\alpha \in [0, 1]$. De même, $q_\alpha \in [0, 1]$.

3. Nous allons finalement montrer que $\overline{Yp} \in [0, \frac{1}{2}]$. Notons que

$$\begin{aligned} & Y_{\mathbf{L}}(XX_k)_{\mathbf{L}} + Y_{\mathbf{R}}(XX_k)_{\mathbf{R}} - (XX_k)_{\mathbf{L}} - (YY_k)_{\mathbf{L}} - (XX_k)_{\mathbf{R}} - (YY_k)_{\mathbf{R}} \\ &= (Y_{\mathbf{L}} - 1)(XX_k)_{\mathbf{L}} + (Y_{\mathbf{R}} - 1)(XX_k)_{\mathbf{R}} - (YY_k)_{\mathbf{L}} - (YY_k)_{\mathbf{R}} \\ &= -X_{\mathbf{L}}^2(X_k)_{\mathbf{L}} - X_{\mathbf{R}}^2(X_k)_{\mathbf{R}} - (YY_k)_{\mathbf{L}} - (YY_k)_{\mathbf{R}} \leq 0 \end{aligned}$$

car $Y_\alpha - 1 = -X_\alpha$. Par conséquent,

$$0 \leq Y_{\mathbf{L}}p_{\mathbf{L}} + Y_{\mathbf{R}}p_{\mathbf{R}} \leq 1. \quad (10.72)$$

Nous montrerions de même que $\overline{Xq} \in [0, \frac{1}{2}]$.

Nous appliquons donc le lemme et il vient

$$\left| \frac{\langle \Sigma_k \rangle}{\bar{c}_k} \right| \leq |\Delta(Ypt)| + |\Delta(Xqt)| \leq 2|\bar{t}| + |\Delta t| \quad (10.73)$$

ce qui conclut le théorème. \square

Remarque 10.2.5 On notera que le précédent théorème est quelque peu décevant. On constate en effet que le coefficient de relaxation est le double de celui du cas diphasique. En particulier, nous devrions retrouver le même dans le cas à 2 constituants avec $p_2^0 = 0$ et $p_1^0 \rightarrow \infty$. Le théorème suivant, qui exploite certaines propriétés thermodynamiques, permet de remédier à cette difficulté.

Théorème 10.2.6 Supposons que pour tout constituant k , pour tout couple (p, T) , on a soit $\xi_k(p, T) \in [0, 1]$ (constituant léger) ou bien $\xi_k(p, T) \in [-1, 0]$ (constituant lourd). Soit $\mathbf{u}_{\mathbf{L}, \mathbf{R}}$ deux états de Ω . Supposons que $a(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) \geq a_p(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}})$. Si

$$b(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) \geq b_p(\mathbf{u}_{\mathbf{L}}, \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) := \frac{|(\rho\varphi)_{\mathbf{L}} + (\rho\varphi)_{\mathbf{R}}|}{2} + \frac{|(\rho\varphi)_{\mathbf{L}} - (\rho\varphi)_{\mathbf{R}}|}{2} \quad (10.74)$$

alors $c_k^* \geq 0$ pour $k = 1, K$.

PREUVE Supposons dans un premier temps que $\xi_k \in [0, 1]$. On utilise la définition $\sigma_k = XY\xi_k\rho\varphi$ et il vient :

$$\frac{\langle \Sigma_k \rangle}{c_k} = \frac{(Y\xi_k)_{\mathbf{L}}}{2\bar{c}_k} X_{\mathbf{L}}(\rho\varphi)_{\mathbf{L}} - \frac{(Y\xi_k)_{\mathbf{R}}}{2\bar{c}_k} X_{\mathbf{R}}(\rho\varphi)_{\mathbf{R}} \quad (10.75)$$

On adopte alors les notations

$$r_\alpha = \frac{(Y\xi_k)_\alpha}{2\bar{c}_k}, \quad s_\alpha = X_\alpha, \quad t_\alpha = (\rho\varphi)_\alpha, \quad \alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R} \quad (10.76)$$

et il vient

$$\frac{\langle \Sigma_k \rangle}{c_k} = \Delta(rst). \quad (10.77)$$

On peut alors voir que l'on peut appliquer le lemme, après avoir vérifié les trois hypothèses. Ces trois vérifications sont fondées sur l'hypothèse que toutes les fractions massiques des états gauche et droit sont positives :

$$X_\alpha \geq 0, \quad Y_\alpha \geq 0, \quad (X_k)_\alpha \geq 0, \quad (Y_k)_\alpha \geq 0. \quad (10.78)$$

1. Nous réécrivons la fraction massique du constituant k sous la forme $c_k = X_k + \xi_k Y$, c'est à dire une somme de deux nombres positifs. Par hypothèse, on a $(c_k)_\alpha \geq 0$ et $(Y\xi_k)_\alpha \geq 0$ car $\xi_k \geq 0$. Il est alors clair que

$$0 \leq \frac{(Y\xi_k)_\alpha}{\underbrace{X_{k\mathbf{L}} + (\xi_k Y)_{\mathbf{L}} + X_{k\mathbf{R}} + (\xi_k Y)_{\mathbf{R}}}_{2\bar{c}_k}} \leq 1. \quad (10.79)$$

pour $\alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R}$. Donc $r_\alpha \in [0, 1]$.

2. Par hypothèse, on a $X_\alpha \in [0, 1]$ ce qui implique que la seconde hypothèse du lemme est vrai avec $s_\alpha = X_\alpha$.
3. Nous allons finalement montrer que $\bar{r}\bar{s} \in [0, \frac{1}{2}]$. Notons que

$$\begin{aligned} & (\xi_k Y)_{\mathbf{L}} X_{\mathbf{L}} + (\xi_k Y)_{\mathbf{R}} X_{\mathbf{R}} - X_{k\mathbf{L}} - (\xi_k Y)_{\mathbf{L}} - X_{k\mathbf{R}} - (\xi_k Y)_{\mathbf{R}}, \\ & = -X_{k\mathbf{L}} - X_{k\mathbf{R}} + (\xi_k Y)_{\mathbf{L}} (X_{\mathbf{L}} - 1) + (\xi_k Y)_{\mathbf{R}} (X_{\mathbf{R}} - 1), \\ & = -X_{k\mathbf{L}} - X_{k\mathbf{R}} - (\xi_k Y^2)_{\mathbf{L}} - (\xi_k Y^2)_{\mathbf{R}} \leq 0 \end{aligned}$$

car $X_\alpha - 1 = -Y_\alpha$. Par conséquent,

$$0 \leq r_{\mathbf{L}} X_{\mathbf{L}} + r_{\mathbf{R}} X_{\mathbf{R}} \leq 1. \quad (10.80)$$

Nous appliquons donc le lemme et il vient

$$\left| \frac{\langle \Sigma_k \rangle}{c_k} \right| \leq |\Delta(rst)| \leq |\bar{t}| + \frac{|\Delta t|}{2} \quad (10.81)$$

ce qui conclut le théorème.

Dans un deuxième temps, supposons que $\xi_k \in [-1, 0]$. On adopte alors les notations

$$r_\alpha = \frac{(-X\xi_k)_\alpha}{2c_k}, \quad s_\alpha = Y_\alpha, \quad t_\alpha = (\rho\varphi)_\alpha, \quad \alpha = \mathbf{L}, \mathbf{R} \quad (10.82)$$

et il vient

$$-\frac{\langle \Sigma_k \rangle}{c_k} = \Delta(rst). \quad (10.83)$$

Nous réécrivons la fraction massique du constituant k sous la forme $c_k = -X\xi_k + Y_k$, c'est à dire une somme de deux nombres positifs. Les mêmes arguments permettent de conclure. \square

Remarque 10.2.7 *Il faut bien noter que, sans aucune hypothèse, on a toujours $\xi \in [-1, 1]$ (voir théorème 9.2.7) : l'hypothèse du théorème précédent porte sur le signe de ξ_k .*

Il ne semble pas facile de généraliser la démonstration précédente. En particulier, il paraît difficile d'arriver au même résultat si, par exemple, on a $\xi_{k\mathbf{L}} \in [-1, 0]$ et $\xi_{k\mathbf{R}} \in [0, 1]$. Toutefois, l'hypothèse que nous proposons (la constance du signe, pour un constituant donné) est physiquement fondée puisque le modèle à 2 constituants présenté précédemment dans le chapitre 9 possède cette propriété.

10.2.5 Implication de la méthode de relaxation

La stratégie que nous proposons ici est l'extension de celle proposée dans le chapitre 5. Rappelons simplement que le schéma explicite doit respecter une condition CFL qui est contrainte par les ondes rapides, ce qui conduit en pratique à des simulations trop lentes et peu précises sur les ondes lentes. Nous cherchons alors à construire un schéma explicite sur les ondes lentes et implicite linéaire sur les ondes rapides, comme dans les travaux de Faille & Heintzé [26]. Cela est rendu possible par le fait que le système de relaxation possède des champs linéairement dégénérés : ainsi il est possible d'interpréter la méthode de Godunov comme une méthode de Roe. Dans la suite, nous nous limitons à la construction de la matrice de Roe, ce qui mène à un schéma implicite linéaire. Nous présentons dans des encadrés les informations nécessaires à la construction du schéma semi-implicite linéaire. Par ailleurs, un encadré présente les informations relatives à l'implication de l'étape de projection, qui permet de réduire la taille du système linéaire à inverser.

On considère le problème de Riemann du système de relaxation homogène ayant comme états gauche et droit $\mathbf{v}_{\mathbf{L}} = \mathbf{v}_0$ et $\mathbf{v}_{\mathbf{R}} = \mathbf{v}_5$ et comme valeurs propres $\{\mu_j\}_{j=1,5}$. L'interprétation du schéma comme une méthode de Roe est fondée sur une décomposition en éléments caractéristiques. Comme il y a 5 valeurs propres, nous allons définir 5 groupes de facteurs de normalisation et vecteurs propres. Comme les vecteurs propres sont de taille $2K + 1$, le lecteur ne sera pas surpris de voir que le lemme suivant est assez long, car il est nécessaire de détailler leurs composantes.

Lemme 10.2.8 *Soit les facteurs de normalisation*

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \rho_{\mathbf{L}}^* - \rho_{\mathbf{L}}, \\ \delta_{k+1} &= \rho_{\mathbf{L}}^*(c_k^* - c_{k,\mathbf{L}}), \quad k = 1, K-1 \\ \delta_{K+1} &= \rho_{\mathbf{R}}^* - \rho_{\mathbf{L}}^*, \\ \delta_{k+K+1} &= \rho_{\mathbf{R}}^*(c_{k,\mathbf{R}} - c_k^*), \quad k = 1, K-1, \\ \delta_{2K+1} &= \rho_{\mathbf{R}} - \rho_{\mathbf{L}}^*. \end{aligned} \quad (10.84)$$

Nous notons $\mathcal{I} = \Pi + a^2 \tau$. Soit la matrice des vecteurs propres à droite $R(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = \{r_j\}_{j=1,2K+1}$ définie par

$$R(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = \begin{pmatrix} 1 & & 1 & & 1 \\ v_L - a\tau_L & 0 & v^* & 0 & v_R + a\tau_R \\ \mathcal{I}_L & & \Pi^* & & \mathcal{I}_R \\ \hline c_{1,L} & & c_1^* & & c_{1,R} \\ \vdots & \mathbb{I}_{K-1} & \vdots & \mathbb{I}_{K-1} & \vdots \\ c_{K-1,L} & & c_{K-1}^* & & c_{K-1,R} \\ \hline \Sigma_{1,L} & & \Sigma_1^* & & \Sigma_{1,R} \\ \vdots & -b \mathbb{I}_{K-1} & \vdots & b \mathbb{I}_{K-1} & \vdots \\ \Sigma_{K-1,L} & & \Sigma_{K-1}^* & & \Sigma_{K-1,R} \end{pmatrix}.$$

Alors, les différences entre deux états consécutifs de la solution du problème de Riemann peuvent s'écrire

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0 &= \delta_1 r_1, & \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 &= \sum_{j=2}^K \delta_j r_j, \\ \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_2 &= \delta_{K+1} r_{K+1}, & \mathbf{v}_4 - \mathbf{v}_3 &= \sum_{j=K+2}^{2K} \delta_j r_j, \\ \mathbf{v}_5 - \mathbf{v}_4 &= \delta_{2K+1} r_{2K+1}. \end{aligned} \tag{10.85}$$

PREUVE L'idée principale de la preuve est d'utiliser la formule de Rankine-Hugoniot ainsi que la conservation d'invariants de Riemann bien choisis. La démonstration découle très naturellement des calculs déjà introduits dans le cas non-compositionnel. Elle est donc laissée au lecteur. \square

Proposition 10.2.9 Soit $R(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$ la matrice inversible définie précédemment. Soit $L(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = R^{-1}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$. Soit la matrice diagonale

$$\Lambda(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = \text{Diag} \{ \nu_j \}_{j=1,1+2K} = \text{Diag} \left(\underbrace{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_2}_{K-1}, \mu_3, \underbrace{\mu_4, \dots, \mu_4}_{K-1}, \mu_5 \right). \tag{10.86}$$

Alors la matrice $A^{\text{Roe}}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = (R \Lambda L)(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$ est une matrice de Roe.

Les vecteurs propres à droite de A^{Roe} sont les vecteurs $\{r_j\}_{j=1,2K+1}$

$$A^{\text{Roe}} r_j = \nu_j r_j, \quad j = 1, 2K + 1. \tag{10.87}$$

Nous définissons la valeur absolue de la matrice de Roe par $|A^{\text{Roe}}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)| = R|\Lambda|L$.

Théorème 10.2.10 Le flux numérique définit par

$$\mathbf{H}^{\text{Roe}}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = \frac{1}{2} (\mathcal{G}(\mathbf{v}_L) + \mathcal{G}(\mathbf{v}_R)) - \frac{1}{2} |A^{\text{Roe}}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)| (\mathbf{v}_R - \mathbf{v}_L)$$

satisfait l'égalité

$$\mathbf{H}^{\text{Roe}}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = \mathbf{H}^{\text{Godunov}}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R). \tag{10.88}$$

PREUVE de la proposition 10.2.9. Nous devons montrer que la matrice A^{Roe} satisfait les trois conditions de Roe. Cela va être accompli en utilisant la définition de la matrice ainsi que de simples calculs algébriques, comme nous allons le voir.

1. Par définition, la matrice $A^{Roe}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$ est diagonalisable et a comme valeurs propres $(\nu_j)_{j=1,5}$. Ses vecteurs propres à droite (resp. gauche) sont $(r_j)_{j=1,2K+1}$, les colonnes de R (resp. $(l_j)_{j=1,2K+1}$, les lignes de L). Les $2K + 1$ vecteurs propres à droite constituent une base de \mathbb{R}^{2K+1} .
2. Un calcul facile mais fastidieux permet de vérifier que $A^{Roe}(\mathbf{v}, \mathbf{v}) = \nabla \mathcal{G}(\mathbf{v})$.
3. Montrons maintenant que $A^{Roe}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)(\mathbf{v}_R - \mathbf{v}_L) = \mathcal{G}(\mathbf{v}_R) - \mathcal{G}(\mathbf{v}_L)$. Premièrement, on peut noter que, par définition (10.85), $\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_R = \sum_{j=1,5} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_{j-1}) = \sum_{j=1,2K+1} \delta_j r_j$. Il est alors facile de voir que, grâce aux égalités (10.87) et (10.85), on a

$$A^{Roe}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)(\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_R) = \sum_{j=1,2K+1} \delta_j \nu_j r_j = \sum_{j=1,5} \mu_j (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_{j-1}).$$

D'autre part, la relation de Rankine-Hugoniot donne le saut du flux relaxé sur la j -ième discontinuité

$$\mathcal{G}(\mathbf{v}_j) - \mathcal{G}(\mathbf{v}_{j-1}) = \mu_j (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_{j-1}), \quad j = 1, \dots, 5. \quad (10.89)$$

Il s'ensuit que

$$A^{Roe}(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)(\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_R) = \sum_{j=1,5} \mathcal{G}(\mathbf{v}_j) - \mathcal{G}(\mathbf{v}_{j-1}) = \mathcal{G}(\mathbf{v}_L) - \mathcal{G}(\mathbf{v}_R),$$

qui est le résultat voulu. \square

Nous venons de construire la base d'un schéma semi-implicite linéaire pour le système compositionnel. Les figures (10.2.5–10.2.5–10.2.5) permettent de compléter le portrait que nous avons brossé ici pour obtenir le schéma semi-implicite linéaire complet.

10.3 Conclusions

Nous avons proposé un schéma de relaxation préservant la positivité des fractions massiques des constituants. Ce schéma est fondé sur la relaxation des termes non-linéaires apparaissant dans le système compositionnel en coordonnées Lagrangiennes. Nous introduisons seulement 2 coefficients de relaxation, dont le calcul est simple. La méthode explicite a été étendue par le développement d'un schéma numérique semi-implicite linéaire explicite pour les ondes lentes et implicite linéaire pour les ondes rapides.

Il reste à analyser le coût de la méthode de relaxation préservant la positivité.

Nous montrons dans ce paragraphe comment calculer la matrice $\tilde{A}(\mathbf{v})$ définie de la façon suivante. Notons $A(\mathbf{v}) = \nabla \mathcal{G}(\mathbf{v})$ la Jacobienne du système de relaxation. Ses valeurs propres sont

$$\Lambda(\mathbf{v}) = \text{Diag} \left(v - a\tau, \underbrace{v - b\tau, \dots, v - b\tau}_{K-1}, v, \underbrace{v + b\tau, \dots, v + b\tau}_{K-1}, v + a\tau \right)$$

et vérifient $A(\mathbf{v}) = R(\mathbf{v})\Lambda(\mathbf{v})L(\mathbf{v})$ avec $R(\mathbf{v})$ la matrice des vecteurs propres et $L(\mathbf{v}) = R^{-1}(\mathbf{v})$. On note

$$\tilde{\Lambda}(\mathbf{v}) = \text{Diag} \left(v - a\tau, \underbrace{0, \dots, 0}_{2K-1}, v + a\tau \right)$$

et $\tilde{A}(\mathbf{v}) = R(\mathbf{v})\tilde{\Lambda}(\mathbf{v})L(\mathbf{v})$. Notons

$$\mathcal{I} = \Pi + a^2 \tau, \quad d = \frac{1}{a^2 \tau} \quad (10.90)$$

Les colonnes de la matrice $\tilde{A}(\mathbf{v}) = R\tilde{\Lambda}L = \{\tilde{A}_j\}_{j=1,2K+1}$ sont les suivantes. Les colonnes 4 à $2K+1$ sont nulles, i.e., $\tilde{A}_j = 0$ pour $j = 4, 2K+1$. Les 3 premières colonnes valent respectivement

$$\tilde{A}_1(\mathbf{v}) = d \begin{pmatrix} -\mathcal{I}v \\ -2v^2a^2\tau - \Pi(v^2 + a^2\tau^2) \\ -\mathcal{I}^2v \\ \hline -c_1\mathcal{I}v \\ \vdots \\ -c_{K-1}\mathcal{I}v \\ \hline -\Sigma_1\mathcal{I}v \\ \vdots \\ -\Sigma_{K-1}\mathcal{I}v \end{pmatrix}, \quad \tilde{A}_2(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2v \\ \mathcal{I} \\ \hline c_1 \\ \vdots \\ \hline c_{K-1} \\ \hline \Sigma_1 \\ \vdots \\ \Sigma_{K-1} \end{pmatrix}, \quad \tilde{A}_3(\mathbf{v}) = d \begin{pmatrix} v \\ v^2 + a^2\tau^2 \\ \mathcal{I}v \\ \hline c_1v \\ \vdots \\ \hline c_{K-1}v \\ \hline \Sigma_1v \\ \vdots \\ \Sigma_{K-1}v \end{pmatrix}.$$

Le calcul de la matrice $\tilde{A}(\mathbf{v})$ requiert $8K + 27$ opérations.

FIG. 10.4 – Détail de la matrice Jacobienne modifiée

Nous montrons dans ce paragraphe comment calculer la matrice définie par $|\tilde{A}^{Roe}|(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R) = (R|\tilde{\Lambda}|L)(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$ avec $|\tilde{\Lambda}| = \text{Diag}(|v_L - a\tau_L|, 0, \dots, 0, |v_R + a\tau_R|)$ et $L = R^{-1}$. La matrice $R(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$ est définie comme précédemment. Nous notons

$$\begin{aligned} \tilde{v}_L &= v_L - a\tau_L, & \tilde{v}_R &= v_R + a\tau_R, \\ \mathcal{I}_L &= \Pi_L + a^2\tau_L, & \mathcal{I}_R &= \Pi_R + a^2\tau_R, \end{aligned} \quad (10.91)$$

ainsi que

$$d = 1/[-v^*(\mathcal{I}_R - \mathcal{I}_L) - \tilde{v}_L(\Pi^* - \mathcal{I}_R) - \tilde{v}_R(\mathcal{I}_L - \Pi^*)]. \quad (10.92)$$

Soient

$$\mathbf{p}_L = d|\tilde{v}_L| \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{v}_L \\ \mathcal{I}_L \\ \hline c_{1,L} \\ \vdots \\ \hline c_{K-1,L} \\ \Sigma_{1,L} \\ \vdots \\ \Sigma_{K-1,L} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p}_R = d|\tilde{v}_R| \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{v}_R \\ \mathcal{I}_R \\ \hline c_{1,R} \\ \vdots \\ \hline c_{K-1,R} \\ \Sigma_{1,R} \\ \vdots \\ \Sigma_{K-1,R} \end{pmatrix}. \quad (10.93)$$

Les colonnes de la matrice $|\tilde{A}^{Roe}| = \{|\tilde{A}_j^{Roe}|\}_{j=1,5}$ sont les suivantes.

1. La colonne 1 est donnée par $|\tilde{A}_1^{Roe}| = \alpha \mathbf{p}_L + \beta \mathbf{p}_R$ avec $\alpha = \Pi^* \tilde{v}_R - v^* \mathcal{I}_R$ et $\beta = v^* \mathcal{I}_L - \Pi^* \tilde{v}_L$.
2. La colonne 2 est donnée par $|\tilde{A}_3^{Roe}| = \alpha \mathbf{p}_L + \beta \mathbf{p}_R$ avec $\alpha = \mathcal{I}_R - \Pi^*$ et $\beta = \Pi^* - \mathcal{I}_L$.
3. La colonne 3 est donnée par $|\tilde{A}_4^{Roe}| = \alpha \mathbf{p}_L + \beta \mathbf{p}_R$ avec $\alpha = v^* - \tilde{v}_R$ et $\beta = \tilde{v}_L - v^*$.
4. Les colonnes suivantes sont nulles, i.e., $|\tilde{A}_j^{Roe}| = 0$ pour $j = 4, 2K + 1$.

Le calcul de la matrice $|\tilde{A}^{Roe}|$ requiert $22K + 45$ opérations.

FIG. 10.5 – Détail de la matrice $|\tilde{A}^{Roe}|$.

Nous expliquons dans ce paragraphe comment, dans le cadre d'un schéma numérique semi-implicite, la technique d'implicitation de la projection permet de réduire la taille de chaque bloc du système linéaire de 1.

La technique d'implicitation de la projection consiste à lier l'incrément de la variable de relaxation $\rho\Pi$ aux incréments des variables d'équilibre de telle sorte que la méthode de relaxation conduise, avec une donnée initiale stationnaire, à un état stationnaire. Notons $\mathcal{P}(\mathbf{u}) = \rho P(\mathbf{u})$ et notons $\mathcal{P}_X(\mathbf{u})$ la dérivée partielle de cette fonction par rapport à X . Pour une maille $i = 1, I$ et un pas de temps n donnés, nous imposons

$$\begin{aligned} \delta(\rho\Pi)_i &= (\rho\Pi)_i^{n+1} - (\rho\Pi)_i^n \\ &= \mathcal{P}_\rho(\mathbf{u}_i^n) \delta\rho_i + \mathcal{P}_{(\rho v)}(\mathbf{u}_i^n) \delta(\rho v)_i \\ &\quad + \mathcal{P}_{(\rho c_1)}(\mathbf{u}_i^n) \delta(\rho c_1)_i + \dots + \mathcal{P}_{(\rho c_{K-1})}(\mathbf{u}_i^n) \delta(\rho c_{K-1})_i. \end{aligned} \quad (10.94)$$

Notons $\tilde{\mathbf{v}}$ le vecteur de taille $2K$ construit en supprimant la troisième composante du vecteur \mathbf{v}

$$\tilde{\mathbf{v}} = (\rho, \rho v, \rho c_1, \dots, \rho c_{K-1}, \rho\Sigma_1, \dots, \rho\Sigma_{K-1})^T. \quad (10.95)$$

Notons \mathcal{R}_e l'opérateur de réduction qui transforme tout vecteur ligne \mathbf{z} de taille $2K + 1$

$$\mathbf{z} = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{2K+1}) \quad (10.96)$$

en le vecteur de taille $2K$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_e(\mathbf{z}) &= (\mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_3 \mathcal{P}_\rho(\mathbf{u}_i^n), \mathbf{z}_2 + \mathbf{z}_3 \mathcal{P}_{(\rho v)}(\mathbf{u}_i^n), \\ &\quad \mathbf{z}_4 + \mathbf{z}_3 \mathcal{P}_{(\rho c_1)}(\mathbf{u}_i^n), \dots, \mathbf{z}_{K+2} + \mathbf{z}_3 \mathcal{P}_{(\rho c_{K-1})}(\mathbf{u}_i^n), \\ &\quad \mathbf{z}_{2K+1}, \dots, \mathbf{z}_{2K+1}). \end{aligned} \quad (10.97)$$

Par abus de notation, notons également \mathcal{R}_e l'opérateur qui transforme toute matrice A de taille $(2K + 1) \times (2K + 1)$ composée des lignes $\{A_i\}_{i=1,2K+1}$ en la matrice de taille $(2K) \times (2K)$ définie par

$$\mathcal{R}_e(A) = \begin{pmatrix} \mathcal{R}_e(A_1) \\ \mathcal{R}_e(A_2) \\ \mathcal{R}_e(A_4) \\ \vdots \\ \mathcal{R}_e(A_{2K+1}) \end{pmatrix}. \quad (10.98)$$

La réduction d'une telle matrice nécessite $8K^2$ opérations et $K + 1$ évaluations. Les matrices permettant de construire le système linéaire sont alors définies par

$$\tilde{\alpha}_i = \mathcal{R}_e(\alpha_i), \quad \tilde{\beta}_i = \mathcal{R}_e(\beta_i), \quad \tilde{\gamma}_i = \mathcal{R}_e(\gamma_i). \quad (10.99)$$

On note enfin par $\tilde{\mathbf{b}}$ le second membre, vecteur de taille $2K$ construit en supprimant la troisième composante du vecteur \mathbf{b} . Nous devons alors résoudre le système linéaire

$$\tilde{\mathbb{A}} \delta\tilde{\mathbf{v}} = \tilde{\mathbf{b}} \quad (10.100)$$

où la matrice $\tilde{\mathbb{A}}$ est construite à partir des matrices $\tilde{\alpha}_i, \tilde{\beta}_i, \tilde{\gamma}_i$ comme expliqué précédemment.

FIG. 10.6 – Détail de la réduction du système linéaire