Chapitre 3

Algorithme implicite pour les équations de Navier-Stokes à plusieurs pressions indépendantes

Conformément aux développements menés dans les premiers chapitres, la discrétisation des équations de Navier-Stokes multi-pression requiert deux pas distincts : une étape de prédiction, suivie d'une étape de correction visant à forcer la consistance des relations de saut généralisées au niveau discret. Sur la base des développements proposés au précédent chapitre, nous disposerons aisément d'une implicitation linéarisée de l'étape de prédiction. Il s'agit ici de proposer une implicitation linéarisée de l'étape de correction. Nous motiverons l'introduction d'une nouvelle formulation des relations de proportionnalité entre les bilans d'entropie. Elle sera comprise comme une hybridation de deux formulations utilisées dans un contexte purement explicite (voir chapitres II 2 et II 4). Par construction, cette nouvelle formulation autorisera une mise à jour implicite possédant un coût d'évaluation "quasi-optimal", et préservant la positivité des entropies spécifiques dès que la densité et l'énergie interne totale déduites de l'étape de prédiction sont positives. Par "optimal", nous entendons qu'il s'agira d'impliciter uniquement $(N-1)$ équations de transport en présence d'un terme source connu lors de la correction. Il faudra ensuite résoudre, localement sur chaque cellule, un problème algébrique dont la solution est explicitement donnée dans le cas de N lois de pression polytropiques.

3.1 Considérations algorithmiques

L'objectif de ce paragraphe est de mettre en avant un certain nombre de difficultés dans l'établissement d'une formulation implicite linéarisée en temps des relations de saut généralisées telles que formulées dans les chapitres précédents. L'analyse de ces difficultés, essentiellement liées au souci de conjuguer efficacité et stabilité (positivité des entropies corrigées), conduira à introduire une nouvelle formulation de ces relations de compatibilité, permettant de concilier ces deux contraintes.

3.1.1 A propos des relations de saut généralisées

Les chapitres 2, 4 et 3 (partie II) consacrés au développement de méthodes explicites en temps ont montré toute l'importance du respect au niveau discret des relations de saut généralisées. Différents algorithmes de type prédicteur-correcteur ont été proposés à cet effet, et reposent sur différentes formes (équivalentes au niveau continu) de ces relations de compatibilité. La plus naturelle repose sur une formulation en entropies :

$$\mu_N T_i\{\partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u\} = \mu_i T_N\{\partial_t \rho S_N(\mathbf{U}) + \partial_x \rho S_N(\mathbf{U}) u\}, \quad i = 1, ..., N-1. \quad (3.1)$$

Il s'agit dans ce cas de corriger les N entropies conformément aux $(N-1)$ relations (3.1), une fois connues la densité, l'impulsion et l'énergie totale (voir chapitre II 2). Sous cette forme, l'algorithme requiert l'inversion d'une équation non linéaire, sur chaque cellule de calcul et à chaque pas de temps. Dans le chapitre II 4, nous avons montré que la formulation équivalente en énergies internes :

$$\mu_N\{\partial_t \rho\varepsilon_i + \partial_x \rho\varepsilon_i u + p_i \partial_x u\} = \mu_i\{\partial_t \rho\varepsilon_N + \partial_x \rho\varepsilon_N u + p_N \partial_x u\}, \quad i = 1, ..., N-1, \quad (3.2)$$

déduite du second principe de la thermodynamique, conduisait à des solutions discrètes virtuellement identiques aux précédentes mais avec l'avantage d'un algorithme complètement explicite. Dans les deux cas, un argument clef permettant d'assurer la positivité des entropies et des énergies ainsi corrigées repose sur la satisfaction d'une inégalité d'entropie (ou d'énergie totale) à l'issue de l'étape de prédiction. L'examen de la formule de remise à jour des énergies internes (4.57), établie au chapitre II 4, suffit à attester qu'une violation de l'inégalité d'énergie discrète ne peut résulter qu'en une violation de la positivité des énergies internes (dès que l'une d'entre elles est suffisamment petite par exemple).
Toutes ces constructions exploitent de manière centrale la nature explicite en temps de l'avancement de la solution, tant dans l'étape de prédiction (existence d'une inégalité d'entropie) que dans la phase de correction (découplage en espace des valeurs à réactualiser). Soulignons tout d'abord qu'il est illusoire d'espérer satisfaire une inégalité d'entropie discrète à l'issue de l'implicitation linéarisée en temps de l'étape de prédiction. Cette constatation suffit déjà à remettre en cause l'intérêt des deux formulations considérées, puisqu'encore une fois, le respect de la positivité dépend directement de la validité d'une telle inégalité. Même en ignorant cette difficulté, l'implicitation des relations de proportionnalité (3.1) ou (3.2) conduit par définition à devoir exprimer implicitement les dérivées partielles en espace, par des formules aux différences portant sur l'inconnue évaluée à l'instant t^{n+1}. Ces formules doivent dès lors être linéarisées. La nature non conservative de la formulation en énergies complique singulièrement cette tâche, d'autant plus qu'elle couple de manière non triviale les trois vitesses caractéristiques de propagation. Rappelons très sommairement que le succès d'une implicitation linéarisée repose sur une bonne implicitation de chacune des informations caractéristiques. Nous avons donc choisi de ne pas aborder son traitement. Les relations (3.1) présentent l'avantage de n'impliquer qu'une seule vitesse caractéristique en conduisant à des équations de transport, équations que nous savons impliciter (la densité est connue). Toutefois, les non linéarités de l'application $\mathbf{U} \to \rho S_N(\mathbf{U})$ nécessiteraient, pour des raisons de coût, l'utilisation d'une linéarisation complexe qui au mieux conduirait à devoir considérer un système linéaire tridiagonal

par blocs $(N-1) \times (N-1)$. Même en faisant abstraction du coût calcul, il semble difficile de procéder à une linéarisation garantissant la positivité des entropies spécifiques. En ce sens, aucune des deux formulations ne donne satisfaction.

3.1.2 Vers une autre formulation des relations de saut généralisées

L'idée directrice est ici de chercher à hybrider les deux formulations précédentes (en entropies et en énergies), tout en s'efforçant de garantir sous des hypothèses les plus faibles possibles la positivité des entropies spécifiques.

La première étape est de constater que si chacune des énergies internes est inconnue, l'énergie interne totale est en revanche connue à l'issue de l'étape de prédiction, puisque par définition, la densité, l'impulsion et l'énergie totale restent inchangées au cours de l'étape de correction. Nous montrerons ci-dessous que cette propriété permettra de proposer une approximation discrète (en temps-espace) et consistante de l'expression

$$\partial_t \rho\varepsilon + \partial_x \rho\varepsilon u + p\partial_x u, \tag{3.3}$$

entièrement connue avant de procéder à l'étape de correction. Ici ε et p désignent respectivement l'énergie interne totale et la pression totale. La connaissance de cette expression est à la base des développements menés dans le chapitre II 4, et ayant abouti à l'exposé d'une méthode de correction explicite en énergies internes. Comme indiqué au paragraphe précédent, nous devons toutefois préférer à des fins d'implicitation une formulation en équations de transport sur les entropies n'impliquant qu'une seule vitesse caractéristique. Il nous faut donc rapprocher ces équations de l'expression précédente.

L'analyse des équations du système d'EDP considéré montre que ses solutions régulières vérifient

$$\partial_t \rho\varepsilon + \partial_x \rho\varepsilon u + p\partial_x u = \mu(\partial_x u)^2, \tag{3.4}$$

alors que chacune des entropies spécifiques est solution de :

$$\partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u = -\frac{\mu_i}{T_i}(\partial_x u)^2, \quad i = 1, ..., N. \tag{3.5}$$

On en déduit les N relations de proportionnalité suivantes :

$$\partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u = -\frac{\mu_i}{\mu T_i}(\partial_t \rho\varepsilon + \partial_x \rho\varepsilon u + p\partial_x u), \quad i = 1, ..., N. \tag{3.6}$$

Puisque le second membre est explicitement connu, il pourrait être tentant d'imposer les relations de saut généralisées sous la forme de ces N relations. Notons en effet qu'elles impliquent la validité des relations de saut généralisées (3.1) et donc (3.2). De plus, un tel algorithme ne nécessiterait que l'inversion de N systèmes linéaires résultant d'une implicitation linéarisée des équations de transport entrant dans le membre de gauche. Il y a toutefois deux obstacles. Rappelons tout d'abord que si la matrice impliquée possède une structure de M-matrice (voir chapitre précédent) et qu'à ce titre son inverse est une matrice positive, la positivité des S_i résulterait de l'hypothèse (naturelle d'après (3.4)) d'un membre de droite positif. Mais cette propriété (liée à la satisfaction d'une inégalité d'énergie) n'est assurée que dans le contexte d'une formulation complètement explicite (voir chapitre II 4). D'autre part, une formulation

discrète de ces N relations conduit à devoir considérer $(N+3)$ mises à jour, pour $(N+2)$ inconnues. Rappelons en effet que ρ, ρu et ρE sont déja connues à l'issue de l'étape de prédiction. Il ne peut en toute généralité en résulter qu'un conflit avec la définition de l'énergie totale, et donc avec la conservation de cette dernière quantité (voir ci-après pour les détails).
De manière à contourner ces deux obstacles, nous proposons ci-dessous d'exprimer des extensions directes des relations (3.6), construites sur $(N-1)$ fonctions des entropies spécifiques, à savoir le logarithme des rapports des $(N-1)$ premières sur la dernière. La connaissance des N entropies sera alors déduite de la connaissance de ces $(N-1)$ rapports en invoquant la définition de l'énergie totale (assurant ainsi sa conservation). Prendre le logarithme des rapports résulte évidemment du souci d'assurer la positivité de chacune des entropies spécifiques S_i. Nous montrerons dans les faits qu'à la condition que l'énergie interne totale et la densité sont toutes deux positives à l'issue de l'étape de prédiction, alors chacune des entropies spécifiques restera positive à l'issue de l'étape de correction. Soulignons pour conclure que les conditions de positivité sur la densité et l'énergie interne totale sont des conditions faibles indispensables à la poursuite des calculs (et ce déjà dans le cas d'une seule pression).

3.2 Formulation proposée

Conformément à la discussion précédente, nous proposons ci-dessous une nouvelle formulation des relations de saut généralisées (3.1) et (3.2), qui interviendra de manière centrale dans l'algorithme implicite présenté dans la section suivante.

Proposition 4
Soient $\{X_i\}_{i=1,...,N}$ les quantités définies par

$$X_i = \ln \frac{S_i}{S_N}, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{3.7}$$

avec par convention $X_N = 0$. Alors les solutions régulières du système (110) vérifient les $(N-1)$ relations de proportionnalité suivantes :

$$\partial_t \rho X_i + \partial_x \rho X_i u = \tfrac{C_i}{\mu}(\partial_t \rho\varepsilon + \partial_x \rho\varepsilon u + p\partial_x u), \quad i = 1, ..., N-1, \tag{3.8}$$

où l'on a posé :

$$\rho\varepsilon = \sum_{j=1}^{N} \rho\varepsilon_j, \quad p = \sum_{j=1}^{N} p_j, \quad \mu = \sum_{j=1}^{N} \mu_j, \tag{3.9}$$

et

$$C_i = \frac{\mu_N}{T_N S_N} - \frac{\mu_i}{T_i S_i}, \quad i = 1, ..., N-1.$$

Notons que les rapports C_i/μ dépendent par construction des rapports des viscosités et qu'en ce sens, ils restent indépendants de tout paramètre ϵ de changement d'échelle (correspondant typiquement à l'inverse du nombre de Reynolds). Muni de la preuve de ce résultat, il sera facile d'établir en conséquence :

Proposition 5
Aves les notations de l'énoncé précédent, les solutions régulières du système (110)

vérifient de manière équivalente le système d'EDP suivant :

$$\begin{cases} \partial_t\rho + \partial_x\rho u = 0, \\ \partial_t\rho u + \partial_x(\rho u^2 + p) = \partial_x(\mu\partial_x u), \\ \partial_t\rho E + \partial_x(\rho E + p)u = \partial_x(\mu u\partial_x u), \\ \partial_t\rho X_i + \partial_x\rho X_i u = \frac{C_i}{\mu}(\partial_t\rho\varepsilon + \partial_x\rho\varepsilon u + p\partial_x u), \quad i = 1, ..., N-1, \end{cases} \tag{3.10}$$

avec la relation de fermeture :

$$\rho\varepsilon = \rho E - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} = \sum_{i=1}^{N} \rho\varepsilon_i(1/\rho, S_i).$$

Démonstration
De manière à être complet, nous détaillons ci-dessous la preuve d'un résultat déjà esquissé.
Dans un premier temps, en sommant sur i les lois d'évolution sur les énergies internes $\{\varepsilon_i\}_{i=1,...,N}$ du système (110) (voir chapitre II 4 par exemple), nous obtenons directement l'égalité

$$\partial_t\rho\varepsilon + \partial_x\rho\varepsilon u + p\partial_x u = \mu(\partial_x u)^2, \tag{3.11}$$

en arguant des définitions (3.9).
Ensuite, les lois d'évolution (3.5) et la conservation de la masse présente dans le système considéré entraînent, pour les solutions régulières, la validité des lois d'évolution suivantes sur les entropies spécifiques S_i, $i = 1, ..., N$:

$$\rho(\partial_t S_i + u\partial_x S_i) = -\frac{\mu_i}{T_i}(\partial_x u)^2, \quad i = 1, ..., N,$$

de telle sorte que les propriétés élémentaires de la fonction logarithme entraînent successivement :

$$\rho(\partial_t \ln S_i + u\partial_x \ln S_i) = -\frac{\mu_i}{T_i S_i}(\partial_x u)^2, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{3.12}$$

et

$$\rho(\partial_t \ln S_N + u\partial_x \ln S_N) = -\frac{\mu_N}{T_N S_N}(\partial_x u)^2. \tag{3.13}$$

La soustraction de (3.12) et (3.13) entraîne, d'après (3.7),

$$\rho(\partial_t X_i + u\partial_x X_i) = C_i(\partial_x u)^2, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{3.14}$$

c'est-à-dire

$$\partial_t\rho X_i + \partial_x\rho X_i u = C_i(\partial_x u)^2, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{3.15}$$

en invoquant une fois de plus la conservation de la masse. Nous obtenons alors les égalités (3.8) attendues en invoquant (3.11). Ceci conclut la démonstration.

3.3 Application à une formulation explicite en temps

L'objectif de ce paragraphe est d'illustrer brièvement la discrétisation des précédentes relations de proportionnalité dans le contexte d'une formulation explicite en temps. L'examen de ces formules permettra une extension naturelle au cadre d'une formulation implicite linéarisée en temps.

Supposons connue à l'instant t^n une approximation des inconnues du système considéré. Celle-ci est avancée à la date suivante t^{n+1} en trois pas comparables à ceux détaillés dans le chapitre II 2. Les deux premiers pas consistent respectivement en une résolution de l'opérateur hyperbolique sous-jacent suivie de sa perturbation dissipative. L'objet du troisième pas est de corriger les prédictions obtenues des entropies partielles conformément aux relations de compatibilité exhibées au paragraphe précédent.

De manière à motiver l'introduction de la discrétisation proposée, il est utile de rappeler brièvement l'algorithme de mise à jour des $(N+2)$ inconnues de notre problème, résultant d'une stratégie de prédiction-correction construite sur les énergies internes partielles telle qu'analysée au chapitre II 4. Répondant aux motivations décrites lors de l'introduction, notre objectif est ici de montrer comment définir naturellement une approximation consistante de l'expression :

$$\{\partial_t \rho\varepsilon + \partial_x \rho\varepsilon u + p\partial_x u\},$$

entièrement connue avant l'étape de correction. A cette fin, rappelons que l'étape de prédiction consiste à projeter sur les constantes la densité, l'impulsion ainsi que les N énergies internes de manière à obtenir les lois d'évolution discrètes suivantes :

$$(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1-} - (\rho\varepsilon_i)_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x}\{\Delta\{\rho\varepsilon_i u\}_{j+1/2} + (p_i\partial_x u)_j^n\} = \Delta t \, "\mu_i(\partial_x u)^2",$$

où les produits non conservatifs impliqués trouvent une définition détaillée au chapitre II 4. Nous avons établi qu'en conséquence de ces projections L^2, l'énergie totale n'est pas conservée puisqu'elle décroît en norme L^1 en vertu de l'inégalité suivante :

$$\{\rho E\}_j^{n+1-} := \frac{(\rho u)_j^{n+1-\,2}}{2\rho_j^{n+1-}} + \sum_{i=1}^{N}(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1-} \leq (\rho E)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\Delta\{(\rho E+p)u\}_{j+1/2}^n.$$

Ce défaut de conservation a motivé l'introduction d'une étape de correction forçant la conservation de la densité, de l'impulsion et de l'énergie totale, pour redéfinir les N énergies internes comme solutions des $(N-1)$ relations suivantes :

$$\mu_N\{(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon_i)_j^{n+1=}\} = \mu_i\{(\rho\varepsilon_N)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon_N)_j^{n+1=}\}, \quad i=1,...,N-1,$$

complétées de :

$$\frac{(\rho u)_j^{n+1\,2}}{2\rho_j^{n+1}} + \sum_{i=1}^{N}(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} := (\rho E)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\Delta\{(\rho E+p)u\}_{j+1/2}^n.$$

Ici et conformément au chapitre II 4, nous avons posé :

$$(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1=} = (\rho\varepsilon_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\{\Delta\{\rho\varepsilon_i u\}_{j+1/2}^n + (p_i\partial_x u)_j^n\}, \quad i=1,...,N.$$

Des manipulations algébriques simples ont alors conduit aux N réactualisations suivantes :

$$(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1} = (\rho\varepsilon_i)_j^{n+1=} + \frac{\mu_i}{\mu}\{(\rho\varepsilon)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon)_j^{n+1=}\}, \quad i = 1, ..., N,$$

où nous avons posé successivement et par définition

$$(\rho\varepsilon)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{{(\rho u)_j^{n+1}}^2}{2\rho_j^{n+1}}, \tag{3.16}$$

puis :

$$(\rho\varepsilon)_j^{n+1=} = \sum_{l=1}^{N}(\rho\varepsilon_l)_j^{n+1=} = (\rho\varepsilon)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\{\Delta\{\rho\varepsilon u\}_{j+1/2}^n + \sum_{i=1}^{N}(p_i\partial_x u)_j^n\}.$$

Ces N formules de remise à jour constituent par construction une discrétisation consistante des relations de proportionnalité suivantes :

$$\mu\{\partial_t\rho\varepsilon_i + \partial_x\rho\varepsilon_i u + p_i\partial_x u\} = \mu_i\{\partial_t\rho\varepsilon + \partial_x\rho\varepsilon u + p\partial_x u\}, \quad i = 1, ..., N, \tag{3.17}$$

en vertu de la définition des $(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1=}$. Ainsi tout se passe comme si nous disposions de $(N+3)$ formules de mise à jour, respectivement pour $\rho, \rho u, \rho E$ et les N énergies internes, pour seulement $(N+2)$ inconnues. La linéarité de l'énergie totale (comprise comme fonction des inconnues discrètes) relativement à chacune des énergies internes est ici responsable de l'absence de conflit entre les $(N+3)$ égalités précédentes, au sens où l'égalité suivante a bien lieu :

$$(\rho E)_j^{n+1} = \{\rho E\}(\rho_j^{n+1}, (\rho u)_j^{n+1}, \{(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1}\}_{1\leq i\leq N}).$$

Munis de ces remarques simples, tentons de répondre aux motivations développées lors de l'introduction de ce chapitre en substituant aux équations gouvernant les énergies internes leurs homologues exprimés en entropies. Arguant du second principe de la thermodynamique, les N relations de proportionnalité (3.17) s'écrivent de manière équivalente sur le plan continu :

$$\partial_t\rho S_i + \partial_x\rho S_i u = \frac{\mu_i}{\mu T_i}\{\partial_t\rho\varepsilon + \partial_x\rho\varepsilon u + p\partial_x u\}, \quad i = 1, ..., N. \tag{3.18}$$

Une discrétisation brutale de ces identités consisterait à envisager la procédure de correction suivante :

$$(\rho S_i)_j^{n+1} = (\rho S_i)_j^{n+1=} + \frac{\mu_i}{\mu(T_i)_j^n}\{(\rho\varepsilon)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon)_j^{n+1=}\}, \quad i = 1, ..., N, \tag{3.19}$$

avec par construction :

$$(\rho S_i)_j^{n+1=} = (\rho S_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\Delta\{\rho S_i u\}_{j+1/2}^n, \quad i = 1, ..., N.$$

Dans (3.19), $(\rho\varepsilon)_j^{n+1=}$ et $(\rho\varepsilon)_j^{n+1}$ conservent les définitions précédentes.
Toutefois, considérer simultanément les N formules de remise à jour (3.19) nécessiterait de comprendre désormais chaque énergie interne selon :

$$(\rho\varepsilon_i)_j^{n+1} = \{\rho\varepsilon_i\}(\frac{1}{\rho_j^{n+1}}, (S_i)_j^{n+1}), \quad i = 1, ..., N.$$

Les non linéarités impliquées dans ces N formules rentrent en règle générale en conflit avec la définition de l'énergie totale, imposant la satisfaction de :

$$(\rho\varepsilon)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{{(\rho u)_j^{n+1}}^2}{2\rho_j^{n+1}} = \sum_{i=1}^{N} (\rho\varepsilon_i)_j^{n+1}.$$

En d'autres termes, privilégier les N formules de mise à jour (3.19) se traduit par une violation de la conservation de l'énergie totale :

$$\{\rho E\}(\rho_j^{n+1}, (\rho u)_j^{n+1}, \{(\rho S_i)_j^{n+1}\}_{1\le i\le N}) \neq (\rho E)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\Delta\{(\rho E + p)u\}_{j+1/2}^n.$$

Il serait certes possible de ne considérer que les $(N-1)$ premières mises à jour dans (3.19) et de réactualiser la dernière énergie interne $(\rho\varepsilon_N)_j^{n+1}$ (et donc $(S_N)_j^{n+1}$) en exigeant la conservation de l'énergie totale :

$$(\rho\varepsilon_N)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{{(\rho u)_j^{n+1}}^2}{2\rho_j^{n+1}} - \sum_{i=1}^{N-1} \{\rho\varepsilon_i\}(1/\rho_j^{n+1}, (S_i)_j^{n+1}).$$

Toutefois, il n'y a aucune raison pour qu'une telle remise à jour définisse une énergie interne positive dans le contexte des schémas implicites linéarisés en temps. Nous excluons donc cette stratégie.
Ces remarques justifient la formulation des relations de compatibilité construites sur les $(N-1)$ entropies X_i. En effet, une extension directe de la précédente discussion à cette nouvelle formulation conduit à définir les $(N-1)$ formules de mise à jour :

$$(\rho X_i)_j^{n+1} = (\rho X_i)_j^{n+1=} + \frac{(C_i)_j^n}{\mu}\{(\rho\varepsilon)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon)_j^{n+1=}\}, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{3.20}$$

avec

$$(\rho X_i)_j^{n+1=} = (\rho X_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\Delta\{\rho X_i u\}_{j+1/2}^n, \quad i = 1, ..., N-1.$$

De sorte à définir chacune des entropies $(S_i)_j^{n+1}$, il s'agit ensuite de résoudre en l'inconnue $(S_N)_j^{n+1}$ l'équation suivante valable localement sur chaque cellule :

$$\sum_{i=1}^{N} \rho_j^{n+1}\varepsilon_i(1/\rho_j^{n+1}, (S_N)_j^{n+1}\exp((\rho X_i)_j^{n+1}/\rho_j^{n+1})) = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{{(\rho u)_j^{n+1}}^2}{2\rho_j^{n+1}}, \tag{3.21}$$

pour obtenir, d'après (3.7) :

$$(\rho S_i)_j^{n+1} = \rho_j^{n+1}(S_N)_j^{n+1}\exp((\rho X_i)_j^{n+1}/\rho_j^{n+1}), \quad i = 1, ..., N-1. \tag{3.22}$$

Nous montrerons plus tard que la solution du problème algébrique considéré existe et est bien positive dès que la densité et l'énergie interne totale le sont. Cette hypothèse est manifestement plus faible que celle exhibée en faisant choix des entropies S_i comme ci-dessus. Qui plus est, nous verrons que sous l'hypothèse de N lois de pression polytropiques, la solution du problème algébrique est explicitement connue.

Afin de convaincre le lecteur du bien-fondé de l'approche explicite que nous venons

de décrire, nous proposons de reprendre la première simulation effectuée dans le chapitre II 2. Nous comparons la solution numérique générée par la présente approche construite sur la nouvelle formulation des relations de compatibilité, à celle obtenue par la technique de correction déduite d' une formulation directe en ρS_i (voir (3.1) et chapitre II 2). Pour le cas test considéré, les énergies internes $\{\varepsilon_i\}_{i=1,\dots,N}$ sont associées à des gaz parfaits polytropiques (les coefficients adiabatiques sont notés $\{\gamma_i\}_{i=1,\dots,N}$), de telle sorte que la nouvelle procédure de correction est explicite (ainsi qu'annoncé). Dans les figures présentées ci-dessous, nous appelons donc correction non linéaire l'approche du chapitre II 2 (puisqu'elle nécessite la résolution d'un problème algébrique non linéaire) et par opposition, correction linéaire la mise à jour explicite (3.20)-(3.21)-(3.22).
Nous faisons par ailleurs le choix $N = 3$ et renvoyons le lecteur au chapitre II 2 pour la définition exacte de la donnée initiale du problème de Riemann considéré.
Comme l'illustre la figure 3.1, les deux approches donnent des résultats tout à fait analogues. Ils sont en bon accord avec la solution exacte attendue et ce contrairement à la solution générée par une technique classique (sans étape de correction). Ceci suffit à illustrer la robustesse de la nouvelle stratégie de correction proposée.

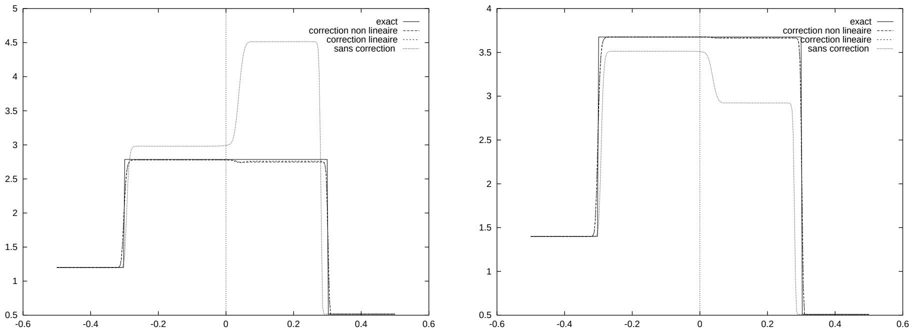

FIG. 3.1 – *Pressions 1 et 2 pour plusieurs corrections*

3.4 Application à une formulation implicite en temps

3.4.1 Algorithme

Nous décrivons ci-dessous une version implicite linéarisée en temps de la précédente étape de correction. Les deux premiers pas, dévolus à l'opérateur du premier ordre puis à l'opérateur du second ordre, reçoivent une formulation implicite linéarisée en temps déduite des précédents chapitres et brièvement résumée ci-après pour conclure. A l'issue du premier pas, nous pouvons évaluer la réactualisation partielle de l'énergie interne totale selon :

$$(\rho\varepsilon)_j^{n+1=} = \sum_{i=1}^{N} \rho\varepsilon_i(\rho_j^{n+1=}, (S_i)_j^{n+1=}), \tag{3.23}$$

où les valeurs prédites $(S_i)_j^{n+1=}$ ont été obtenues conformément à l'implicitation découplée du bloc transport des entropies (voir chapitre précédent pour plus de détails).

Rappelons que l'algorithme proposé préserve la positivité de chacune des entropies de sorte que la formule précédente a bien un sens. Au terme du second pas, nous disposons des valeurs définitivement réactualisées ρ_j^{n+1}, $(\rho u)_j^{n+1}$, $(\rho E)_j^{n+1}$, et sommes donc en mesure de définir à cette même date l'énergie interne totale :

$$(\rho\varepsilon)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{((\rho u)_j^{n+1})^2}{2\rho_j^{n+1}}.$$

Ces deux quantités étant connues avant correction des entropies spécifiques S_i, nous suggérons d'impliciter en temps l'algorithme proposé en considérant :

$$\begin{aligned}(\rho X_i)_j^{n+1} - (\rho X_i)_j^n + \lambda\Delta(\{\rho u\}_{j+1/2}^{n,+}(X_i)_j^{n+1} + \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-}(X_i)_{j+1}^{n+1}) = \\ \tfrac{(C_i)_j^n}{\mu}((\rho\varepsilon)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon)_j^{n+1=}), \quad i = 1, ..., N-1.\end{aligned} \tag{3.24}$$

Nous avons donc choisi ici une implicitation linéarisée en temps immédiate des formules des flux de Larrouturou :

$$\{\rho X_i u\}_{j+1/2} = \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,+} \times (X_i)_j^{n+1} + \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-} \times (X_i)_{j+1}^{n+1}, \tag{3.25}$$

où classiquement :

$$X^+ = \max(X, 0), \quad X^- = \min(X, 0), \quad \forall\ X \in I\!R.$$

Les flux numériques $\{\rho u\}_{j+1/2}^n$ sont associés à la méthode de Relaxation décrite dans le chapitre 1 et sont connus à l'issue du premier pas (puisque rentrant dans la définition du résidu explicite sur la variable ρ).
Notons qu'une analyse simple de consistance au sens des différences finies permet de se convaincre que $\{(\rho\varepsilon)_j^{n+1} - (\rho\varepsilon)_j^{n+1=}\}/\Delta t$ réalise bien une approximation en temps-espace de l'expression $\partial_t\rho\varepsilon + \partial_x\rho\varepsilon u + p\partial_x u$.
La mise en œuvre correspondante pour le calcul des inconnues $\{(X_i)_j^{n+1}\}_{j\in Z}$ consiste, pour chaque $i = 1, ..., N-1$, en la résolution d'un système linéaire dont la matrice possède une structure tridiagonale à coefficients scalaires. De manière plus précise et d'après (3.24), une ligne courante j de cette matrice est constituée des éléments a_j, b_j et c_j vérifiant :

$$\begin{aligned} a_j &= -\tfrac{\Delta t}{\Delta x}\{\rho u\}_{j-1/2}^{n,+}, \\ b_j &= \rho_j^{n+1} + \tfrac{\Delta t}{\Delta x}(\{\rho u\}_{j-1/2}^{n,+} - \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-}), \\ c_j &= \tfrac{\Delta t}{\Delta x}\{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-}. \end{aligned}$$

Cette matrice est une M-matrice à diagonale strictement dominante (indépendamment de la condition CFL). Elle est donc inversible sous des conditions aux limites *adhoc*, ce qui garantit l'existence et l'unicité des quantités $(X_i)_j^{n+1}$ ainsi définies. Disposant localement des $(N-1)$ quantités $(X_i)_j^{n+1}$, nous sommes alors en mesure de résoudre localement sur chaque cellule le problème algébrique (3.21) permettant de définir les valeurs réactualisées des entropies selon (3.22) (voir la justification ci-dessous).

Ceci achève la description de l'implicitation de l'étape de correction.

3.4.2 Positivité des entropies

L'énoncé suivant assure l'existence et l'unicité d'une solution S_N strictement positive du problème algébrique (3.21), dès que la densité et l'énergie interne totale sont positives à l'issue du premier pas. En conséquence de cela, chacune des entropies spécifiques reste positive sous cette hypothèse faible à l'issue de l'étape de correction implicite (voir en effet (3.22)). Ceci justifie la stratégie adoptée.

Proposition 6
Soit $(\rho, \rho u, \rho E, \{\rho X_i\}_{i=1,...,N})$ *un vecteur donné de* $I\!R^{N+3}$ *tel que*

$$\rho > 0, \quad (\rho E) - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} > 0, \tag{3.26}$$

et par convention $\rho X_N = 0$. *Soit* $S_N \to f(S_N)$ *l'application de* $I\!R^{+\star} \to I\!R$ *définie par*

$$f(S_N) = (\rho E) - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} - \sum_{i=1}^{N} \rho\varepsilon_i(1/\rho, S_N \exp((\rho X_i)/\rho)). \tag{3.27}$$

Alors, il existe un unique $S_N^\star \in I\!R^{+\star}$ *tel que* $f(S_N^\star) = 0$.

Nous verrons dans la démonstration ci-dessous que l'application f ainsi définie est strictement concave et strictement croissante sur $I\!R^{+,\star}$. En conséquence, un algorithme de Newton permet de déterminer rapidement et précisément la solution $S_N^\star \in I\!R^{+\star}$ recherchée.

Démonstration
Par dérivation de l'application f définie par (3.27), nous obtenons l'inégalité :

$$f'(S_N) = -\sum_{i=1}^{N} \rho \exp((\rho X_i)/\rho) \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial S_i}(1/\rho, S_N \exp((\rho X_i)/\rho)) > 0,$$

puisque par hypothèse,

$$\rho > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial S_i}(1/\rho, S_N \exp((\rho X_i)/\rho)) = -T_i(1/\rho, S_N \exp((\rho X_i)/\rho)) < 0.$$

Nous obtenons facilement en dérivant une seconde fois la fonction f l'égalité

$$f''(S_N) = -\sum_{i=1}^{N} \rho \exp(2(\rho X_i)/\rho) \frac{\partial^2 \varepsilon_i}{\partial^2 S_i}(1/\rho, S_N \exp((\rho X_i)/\rho)),$$

c'est-à-dire $f''(S_N) < 0$ par convexité des énergies internes $(\tau, S_i) \to \varepsilon(\tau, S_i)$ pour tout $i = 1, ..., N$. L'application f est donc strictement croissante et strictement concave. Les hypothèses asymptotiques de Weyl vérifiées par les énergies internes $\{\varepsilon_i\}_{i=1,...,N}$ assurent que pour tout $i = 1, ..., N$:

$$\lim_{S_i \to 0} \varepsilon_i(\tau, S_i) = +\infty, \quad \lim_{S_i \to +\infty} \varepsilon_i(\tau, S_i) = 0,$$

de telle sorte que, d'après (3.26) :

$$\lim_{S_N \to 0} f(S_N) = -\infty, \qquad \lim_{S_N \to +\infty} f(S_N) = \rho E - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} > 0.$$

L'existence et l'unicité de la solution de l'équation $f(S_N) = 0$ sont assurées. Ceci conclut la démonstration.

3.4.3 Le cas polytropique

Nous vérifions ici que sous l'hypothèse de N lois de pression polytropiques, la résolution du problème algébrique local (3.21) fixant la dernière entropie admet une solution explicite. A cette fin, il convient de faire un choix particulier de lois d'état consistant à considérer les entropies spécifiques suivantes :

$$s_i = \frac{p_i}{\rho^{\gamma_i}}, \quad \gamma_i > 1, \quad i = 1, ..., N.$$

Un tel choix nous fait certes perdre la propriété de stricte convexité des énergies internes associées (la preuve du précédent théorème tombe donc) mais autorise une résolution explicite du problème considéré garantissant toujours la positivité des entropies recherchées et sous les mêmes hypothèses. En effet, il suffit de constater que l'énergie interne totale s'écrit :

$$\rho\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{\gamma_i - 1} = s_N \times \{\sum_{i=1}^{N} \frac{\rho^{\gamma_i}}{\gamma_i - 1} \exp(X_i)\},$$

de sorte que, lorsque la densité et l'énergie interne totale sont positives, nous avons $s_N > 0$. Ici nous avons évidemment défini $X_i = \ln(s_i/s_N)$.

3.5 Description de l'algorithme implicite complet

Nous résumons brièvement dans cette section la formulation implicite linéarisée en temps de chacun des trois pas constituant une itération (voir chapitre II 2). Notre objectif est de remarquer qu'une fois la première itération accomplie, il n'est plus utile dans la pratique de procéder à la résolution du bloc transport des entropies dans la phase de prédiction (voir chapitre 2 pour plus de détails). En anticipant la discussion, nous pouvons en effet tirer profit du découplage entre l'étape de prédiction et l'étape de correction. Il est ainsi possible d'exploiter la connaissance des entropies corrigées au terme de l'itération précédente de manière à évaluer, lors du premier pas de l'itération courante, la correction des résidus explicites (voir formules (2.47)-(2.48)) ainsi que l'énergie interne totale prédite (voir formule (3.23)). La pratique a montré que cette simplification conduit à un algorithme stable présentant le bénéfice de n'avoir à résoudre à chaque itération que N systèmes linéaires tridiagonaux scalaires (contre $2N - 1$ sinon) et d'un système linéaire tridiagonal par blocs de taille 3×3. Le coût de l'algorithme définitif est en ce sens optimal.

Premier pas : opérateur convectif $(t^n \to t^{n+1=})$
Nous suggérons d'utiliser lors de ce premier pas l'implicitation linéarisée en temps,

décrite au chapitre 2, du système Euler multi-pression. Conformément à ce chapitre, l'implicitation linéarisée en temps du bloc hydrodynamique requiert une réactualisation des entropies spécifiques de manière à rendre compte de l'implicitation linéarisée de la projection sur la variété d'équilibre (voir la définition des résidus explicites corrigés (2.47)-(2.48)). Après la première (quelques) itération(s), nous suggérons de tirer profit du découplage entre ce premier pas prédictif et le pas correctif en utilisant la connaissance des entropies corrigées à l'issue de l'itération précédente pour évaluer les résidus explicites corrigés (2.47)-(2.48). La pratique justifie un tel mode opératoire.

Deuxième pas : opérateur diffusif ($t^{n+1=} \to t^{n+1-}$)
La procédure décrite dans le chapitre II 2 pour résoudre l'opérateur du second ordre étant déjà implicite, nous pouvons la conserver sans aucune modification. Le coût calcul correspondant est particulièrement intéressant puisqu'il consiste en la résolution d'un unique système linéaire inversible permettant d'évaluer les vitesses discrètes $(u_j^{n+1-})_{j\in Z}$ et dont la matrice en j possède une structure tridiagonale scalaire. Les évolutions implicites ρ_j^{n+1-}, $(\rho u)_j^{n+1-}$, $(\rho E)_j^{n+1-}$ et $(\rho S_i)_j^{n+1-}$, $i = 1, ..., N-1$, sont ensuite explicitement données (voir chapitre II 2 pour les détails). Notons simplement que dans les simulations numériques $2D$ menées dans le contexte du code CELHYO, les deux premières étapes n'en constituent qu'une seule, au prix d'un algorithme d'implicitation de l'opérateur diffusif légèrement modifié (et non discuté ici car classique).

Troisième pas : étape de correction ($t^{n+1-} \to t^{n+1}$)
Elle a fait l'objet de la section précédente.

3.6 Expériences numériques

Le principal objectif de cette section consiste à tester la stabilité de l'implicitation proposée de l'étape de correction, qui est la seule réelle nouveauté de la section précédente. Celle de la méthode de Relaxation intervenant au titre de première étape a déjà été testée (avec succès) dans le chapitre 1.

Nous proposons d'effectuer des simulations numériques bi-dimensionnelles. La description en une dimension d'espace de la procédure numérique s'étend naturellement au cas multi-dimensionnel, en invoquant l'invariance par rotation des équations. Pour plus de détails sur ce point, nous renvoyons le lecteur au chapitre 1 dans lequel une telle stratégie a déjà été adoptée, où plus généralement à [57].
Nous approchons plusieurs écoulements stationnaires autour d'un cylindre, supersoniques à l'infini amont. Pour cela, nous utilisons un maillage structuré avec ni points de discrétisation sur la paroi du cylindre et nj points de discrétisation sur l'axe Ox (direction de la ligne d'arrêt). L'ordre 2 d'approximation en espace est obtenu par une approche MUSCL sur les variables primitives, à savoir la densité, la quantité de mouvement et les pressions partielles $\{p_i\}_{i=1,...,N}$. Le limiteur de pente utilisé est celui proposé par Van Albada et al. ($\phi(r) = (r^2+r)/(1+r^2)$ avec des notations classiques). Pour chaque cas test, après avoir précisé les données initiales correspondantes, nous présentons les iso-valeurs du champ de densité. Les distributions des pressions sur la ligne d'arrêt seront également présentées.

Nous proposons ci-dessous trois simulations numériques : les deux premières sont réalisées dans le régime asymptotique d'un nombre de Reynolds infini, la dernière est

menée pour un nombre de Reynolds (construit sur le rayon du cylindre) de 10^5. Nous nous sommes placés dans le contexte le plus défavorable de rapports de viscosités égaux à l'unité (voir les chapitres précédents et également Berthon [10]).
L'intérêt des deux premières simulations est de tester la robustesse de l'implicitation linéarisée de l'étape de correction indépendamment de l'implicitation linéarisée des contributions diffusives portant sur l'impulsion et l'énergie totale. Notons que si le nombre de Reynolds est infini, la procédure de correction doit être considérée puisque les $(N-1)$ rapports C_i/μ sont indépendants de ce nombre.
Concernant les conditions aux limites relatives aux deux premiers cas tests, nous utilisons les conditions aux limites de type Euler suivantes :

- condition de glissement pour le vecteur vitesse sur la paroi du cylindre,
- condition supersonique pour la sortie,
- condition de symétrie sur la ligne d'arrêt.

La troisième simulation consiste quant à elle en un véritable calcul Navier-Stokes (hormis les lois de Fourier ici négligées), avec les conditions aux limites suivantes :

- condition d'adhérence pour le vecteur vitesse sur la paroi du cylindre,
- condition supersonique pour la sortie,
- condition de symétrie sur la ligne d'arrêt.

Nous utilisons pour ce calcul une loi de viscosité de Sutherland et fixons toutes les viscosités égales :

$$\mu_i = (1.458.10^{-6} T_N^{3/2})/(110.4 + T_N), \quad i = 1, ..., N,$$

de telle sorte qu'une fois de plus, les rapports des viscosités en considération sont tous égaux à 1.

Nous décrivons maintenant les données initiales correspondantes à chacune de ces trois simulations, en notant $\omega = (u, v) \in I\!R^2$ le champ de vitesse dans le repère usuel (O, Ox, Oy).

Expérience 1
Pour ce premier cas test, nous considérons $N = 2$ pressions partielles p_1 et p_2 associées respectivement aux coefficients adiabatiques $\gamma_1 = 1.3$ et $\gamma_2 = 1.2$. Le maillage utilisé (et représenté sur la figure 3.2) est tel que $ni = 32$ et $nj = 41$. Le champ arrivant sur le cylindre est caractérisé par les valeurs suivantes données en unités internationales :

Expérience 1

	ρ	u	v	p_1	p_2
Champ amont	7.032e-4.	4318.	0.	36.	70.

Le nombre de Mach correspondant est environ égal à 10.

Expérience 2
Nous posons $N = 3$, $\gamma_1 = 1.4$, $\gamma_2 = 1.3$ et $\gamma_3 = 1.2$. Le maillage correspondant (voir

figure 3.5) est tel que $(ni, nj) = (32, 88)$. Le champ amont vérifie :

Expérience 2

	ρ	u	v	p_1	p_2	p_3
Champ amont	4.018e-4.	964.	0.	10.	26.	40.

Le nombre de Mach associé est proche de 2.

Expérience 3

Pour ce cas test, nous considérons trois pressions partielles associées aux coefficients adiabatiques $\gamma_1 = 1.4$, $\gamma_2 = 1.3$ et $\gamma_3 = 1.2$. Le maillage est représenté sur la figure 3.8. Il vérifie $ni = 60$ et $nj = 48$. Le champ amont considéré est le suivant :

Expérience 3

	ρ	u	v	p_1	p_2	p_3	T_3
Champ amont	4.018e-4.	1150.	0.	10.	20.	40.	335.23

Le nombre de Mach est environ égal à 2.35 tandis que le nombre de Reynolds pour ce calcul est de l'ordre de 10^5.

Présentation des résultats

Avant de présenter les solutions stationnaires obtenues pour ces différents problèmes, nous tenons à rapporter une difficulté opératoire. A cette fin, mentionnons que notre initialisation de la solution discrète consiste à choisir un champ uniformément constant, prescrit par les conditions d'écoulement à l'infini amont. En conséquence, le choc discret attendu prend naissance à la paroi, puis s'en détache pour venir se stationnariser à sa position finale à l'amont du cylindre. Nous avons constaté expérimentalement (au moins pour l'expérience 3) que tant que le choc discret n'avait pas quitté la paroi, la procédure d'implicitation de l'étape de correction s'est révélée être instable sauf à recourir à des petits nombres CFL (typiquement de l'ordre de 1). Dans la pratique, nous avons choisi de faire converger rapidement l'algorithme vers une solution quasi-stationnaire en désactivant la procédure de correction. Une fois cette première solution obtenue, nous avons brutalement rétabli cette procédure de correction pour de nouveau converger en temps. Nous n'avons alors pas rencontré de difficultés particulières : le nombre CFL retrouve rapidement la valeur qu'il possédait à convergence de la première solution. Soulignons que cette première solution est fort éloignée de la solution finale attendue (comme l'attestent les résultats 1D avec et sans correction). En ce sens, l'implicitation de l'étape de correction semble être robuste. Nous privilégions ici une erreur de codage informatique que nous ne sommes pas parvenus à localiser, même si nous suspectons un interfaçage défectueux de nos routines avec le code CELHYO dans le traitement des conditions aux limites paroi.

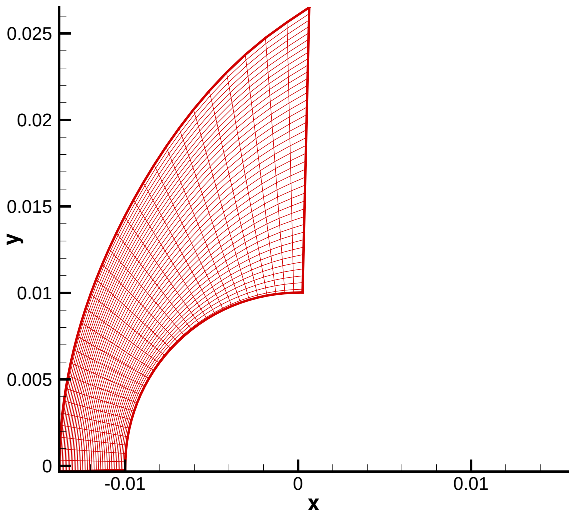

FIG. 3.2 – *Expérience 1. Maillage 32×41*

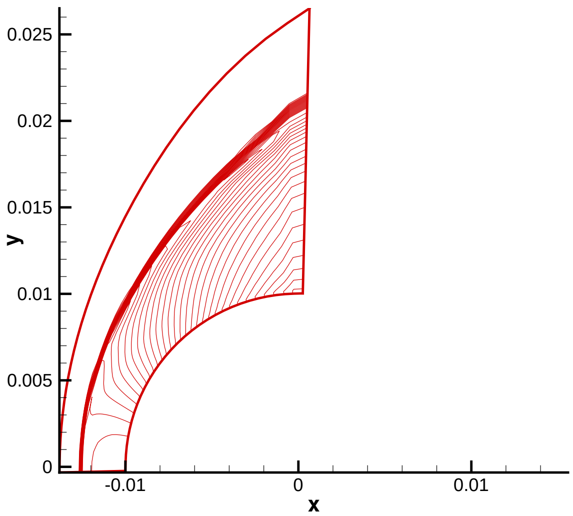

FIG. 3.3 – *Expérience 1. Densité : iso-valeurs*

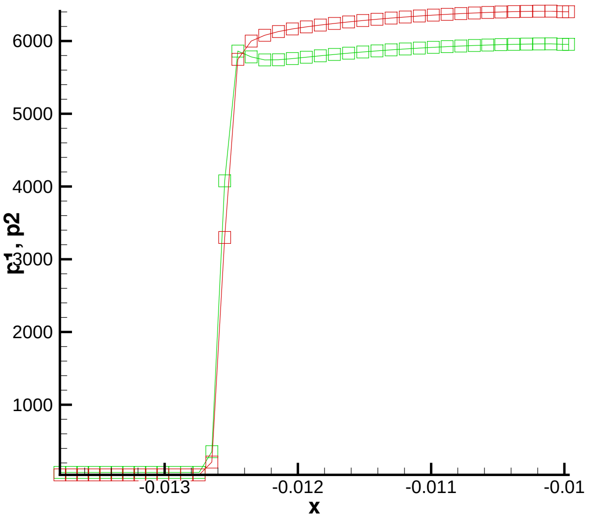

Fig. 3.4 – *Expérience 1. Pressions sur la ligne d'arrêt*

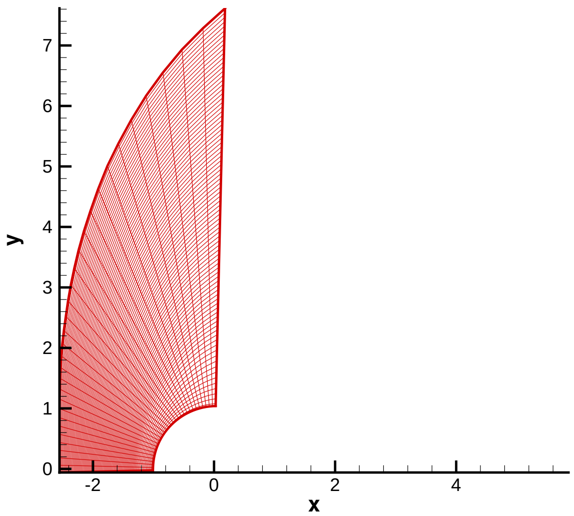

Fig. 3.5 – *Expérience 2. Maillage 32×88*

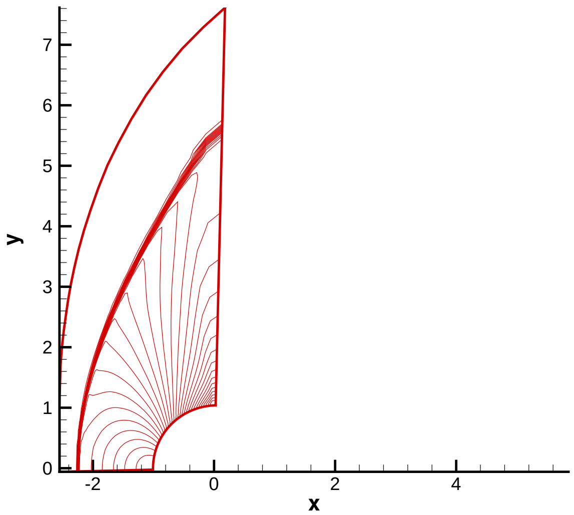

FIG. 3.6 – *Expérience 2. Densité: iso-valeurs*

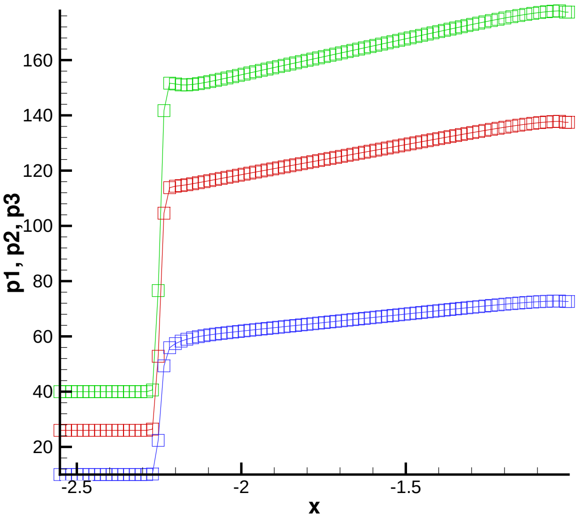

FIG. 3.7 – *Expérience 2. Pressions sur la ligne d'arrêt*

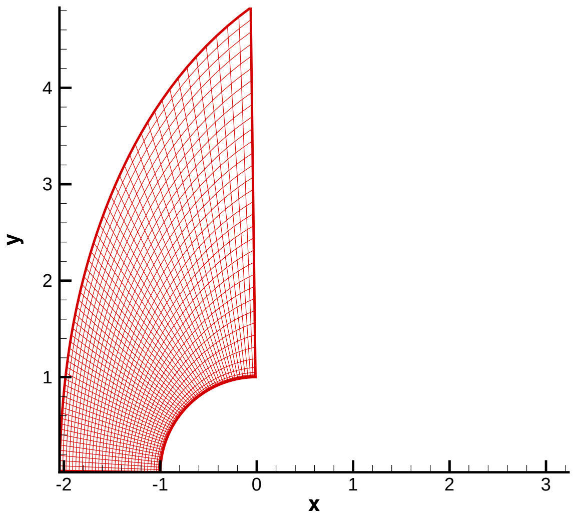

Fig. 3.8 – *Expérience 3. Maillage 60×48*

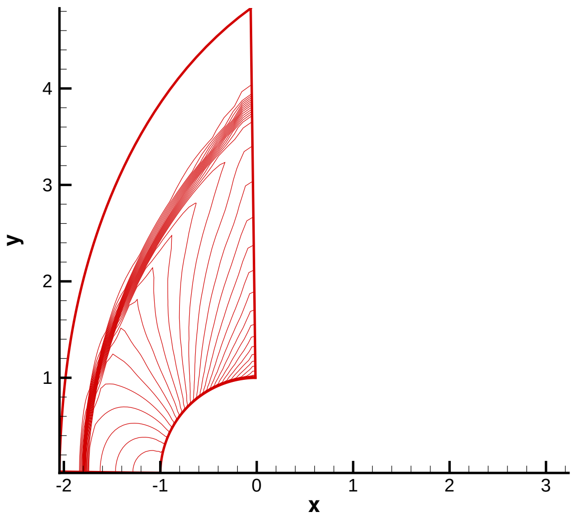

Fig. 3.9 – *Expérience 3. Densité : iso-valeurs*

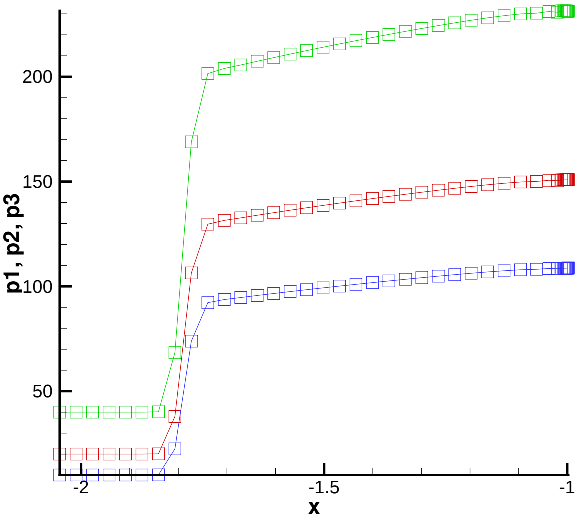

FIG. 3.10 – *Expérience 3. Pressions sur la ligne d'arrêt*