NNT : 2018SACLX015

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À
L'ECOLE POLYTECHNIQUE

École Doctorale n°579
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géo-sciences - SMEMaG
Spécialité de doctorat : Mécanique des fluides

Par

M. Alexis Marboeuf

Schémas ALE multi-matériaux totalement conservatifs pour l'hydrodynamique

Thèse présentée et soutenue publiquement à l'Ecole Polytechnique, le 8 mars 2018.

Composition du Jury :

M. Dominique CHAPELLE	Directeur de recherches, INRIA	Président du jury
M. Nathaniel R. MORGAN	Research scientist, LANL	Rapporteur
M. Frédéric LAGOUTIÈRE	Professeur, Université Claude Bernard Lyon 1	Rapporteur
Mme Edwige GODLEWSKI	Professeur, UPMC Paris 6	Examinatrice
M. Antoine LLOR	Directeur de recherches, CEA	Examinateur
M. Patrick LE TALLEC	Professeur, Ecole Polytechnique	Directeur de thèse
Mme Alexandra CLAISSE	Ingénieur de recherche, CEA	Encadrante de thèse

université PARIS-SACLAY

ÉCOLE DOCTORALE
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

Titre : Schémas ALE multi-matériaux totalement conservatifs pour l'hydrodynamique

Mots clés : hydrodynamique compressible, Arbitrary-Lagrangian-Eulerian, conservation énergie, onde de choc, cohérence thermodynamique, géométrie axisymétrique

Résumé : Ce sujet de thèse s'inscrit dans le cadre des études actuellement menées au CEA/DAM concernant des schémas numériques ALE (Arbitrary-Lagrangian-Eulerian) de type « Lagrange + Projection », dans le contexte des simulations hydrodynamiques mutli-matériaux en grandes déformations.
Les schémas décalés en temps et en espace sont très utilisés dans les codes industriels. Ils sont robustes et permettent une bonne approximation des comportements complexes. Ils sont cependant connus pour ne pas conserver exactement l'énergie totale. Cela pose un problème dans le traitement des chocs, sur maillages raffinés ou dans la simulation des milieux réactifs.
En 2016, des travaux originaux on été proposés par A. Llor et coll. pour rendre conservatif ce type de schéma dans un contexte purement lagrangien, notamment en proposant une correction pour retrouver la conservation de l'énergie totale.
Dans cette thèse, on propose d'étendre ce schéma lagrangien dans un contexte ALE multi-matériaux (avec interface), en garantissant la conservation de l'énergie totale, le respect du second principe de la thermodynamique et la robustesse. De nombreux cas tests ont été menés (en 2D plan et en 2D axisymétrique) et comparés aux méthodes existantes afin de montrer la pertinence de cette approche.

Title : Conservative multi-material ALE schemes for Hydrodynamics

Keywords : compressible Hydrodynamics, Arbitrary-Lagrangian-Eulerian, energy conservation, shock wave, thermodynamic consistency, axisymmetric geometry

Abstract : This PhD subject comes within actual studies managed by CEA/DAM about ALE (Arbitrary-Lagrangian-Eulerian) schemes (with a splitting of Lagrangian and Remapping steps) in the context of hydrodynamic simulations.
Space- and Time-Staggered schemes are widely used in industrial codes for their simplicity and robustness despite their known lack of exact energy conservation. This is a major drawback in presence of strong shocks. Among all existing schemes, none of them meet the expectations of robustness, conservation, thermodynamic consistency (both shocks and relaxations capture), accuracy and adaptibility to complex behaviors. Recently, some novel works have been proposed by A. Llor *et al.* in order to make conservative this type of scheme in a Lagrangian context. Current remap methods, necessary in large deformations, do not guarantee simultaneously total energy conservation and thermodynamic consistency. This work aims at extending this conservative Lagrangian Space- and Time-Staggered scheme to a multi-material ALE methodology, keeping its good properties (conservation, accuracy, thermodynamic consistency, robustness) intact. Classical, but demanding, test cases have been performed (both in plane and axisymmetric 2D geometries) and have been compared to existing numerical methods in order to assess the relevance of our approach.

Université Paris-Saclay
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin, France

Remerciements

Bien que très enrichissant, un travail de thèse a également son lot d'échecs, de frustrations et de remises en question. C'est aussi, et surtout, ce qui contribue à la qualité de cette formation. Dans ces moments difficiles, il est important de ne pas être seul. Que ce soit d'un point de vue professionnel ou personnel, je me rends compte de la chance que j'ai eu de pouvoir compter sur de nombreuses personnes tout au long de ces trois années de thèse. Ces quelques paragraphes me permettent d'exprimer toute ma gratitude envers ces personnes, qui méritent bien plus.

Tout d'abord, je tiens à remercier chaleureusement Alexandra Claisse et Patrick Le Tallec pour m'avoir donné ma chance et accordé leur confiance. Je ne serais pas là sans eux. Leurs nombreux conseils ont été très précieux pendant ces trois ans de thèse, en particulier durant cette première année compliquée. Même à ce moment, j'ai pu compter sur leur soutien, leur patience et leur disponibilité. Le fait que ce travail peut maintenant être soutenu atteste de la qualité de l'encadrement que j'ai reçu.

Un grand merci à Antoine Llor qui m'a également beaucoup apporté. Il a été très présent du début à la fin et est à l'origine de nombreuses idées décrites dans ce manuscrit. La patience dont il a fait preuve m'a permis d'assimiler de nombreuses notions d'hydrodynamique, de thermodynamique, de calcul tensoriel et bien d'autres.

Je remercie tout particulièrement les rapporteurs Frédéric Lagoutière et Nathaniel Morgan pour le temps qu'ils m'ont consacré et la clarté de leur rapport. Thank you Nathaniel Morgan for your time and your clear report. It is a great pleasure to have you in my PhD committee. Je remercie également Dominique Chapelle pour avoir accepté de présider le jury de thèse. C'est un honneur de compter Edwige Godlewski parmi les examinateurs de ce travail. Un grand merci à elle.

Merci à mes deux laboratoires d'accueil au CEA et à l'École Polytechnique. Côté CEA, je remercie Stéphane Bernard et Jean-Philippe Perlat qui m'ont accepté au sein de leur service et laboratoire respectif. Je tiens aussi à mentionner la gentillesse et la bonne humeur de Claire Boullier qui m'a beaucoup aidé dans les démarches administratives. Je les remercie en particulier pour ce « fameux » week-end où j'ai, en vain, tenté de traverser l'Atlantique. Côté Polytechnique, un grand merci au Laboratoire de Mécanique des Solides (LMS) et à tous ses membres pour leur accueil.

Ces trois années auraient été bien plus ternes sans les stagiaires, doctorants et post-doctorants du LMS et du CEA. Je regrette de ne pas avoir été plus présent au LMS parce j'y ai passé de très bons moments ! Je me souviendrai pendant longtemps de cette semaine au colloque national en calcul des structures à Giens. En plus de montrer mes qualités (déplorables) de danseur, cette semaine a également été l'occasion de rencontrer d'autres doctorants et doctorantes (Marine, Quentin, Sami, Rogers) avec lesquels je me suis beaucoup lié. Je remercie chaleureusement tous ceux avec qui j'ai partagé la plupart de mon temps au CEA : ceux qui sont maintenant passés du côté obscur (Rémi, Hoby, Alan, Thibaud, Thibaut, Raphaël, Guillaume, Clément, Nicolas), ceux qui sont partis explorer la galaxie lointaine très lointaine (Christelle, Matthieu dit « MSP », Paul dit « Polau », Julien, Mathilde...) et bien sûr les padawans (Mathieu, Florian dit « Phlawryan », Grégoire dit « Grégou Tatillon », Marie, Lucile, Jean-Cédric dit « JC^2 », Giovanni et Audrey). Une pensée particulière pour Mathieu, dit « le Bistre », et pour Marie, dit « la Folle », qui ont partagé le bureau avec moi. Même si Mathieu a passé son temps à répandre son « hate flux » et même si Marie préfère parler aux nombreuses personnes présentes dans sa tête, je tiens à les remercier chaleureusement pour ces très bons moments. Merci à mes colocs Gauthier (également passé du côté obscur) et à sa copine Laura pour les presque trois années que l'on a passé ensemble dans le 14ème. Malgré les inévitables disputes et divergences, j'en garde un bon souvenir.

Je remercie également tous mes amis ; qu'ils soient de Vendée, de Nantes, du Gers, de Paris et d'ailleurs. Je tiens à m'excuser auprès de certains (en particulier les vendéens), que j'ai très peu vu et auxquels j'ai donné peu de nouvelles durant ces trois années de thèse. J'espère me rattraper à l'avenir ! Un grand merci à Pauline et à tout le groupe géomatique de Cergy. Nos soirées du jeudi soir à la Méca, placées sous le signe de la Chouffe, me manquent terriblement. Merci également à Emmanuelle et à ses ami(e)s, avec qui j'ai passé de super moments.

Enfin, je remercie ma famille. Elle m'a toujours soutenu quoiqu'il arrive, depuis le début de mes études. J'ai toujours pu compter sur mes parents et ma sœur, en particulier pendant ma thèse, et ce malgré le peu de nouvelles que j'ai donné durant trois ans.

Un grand merci à tous !

Table des matières

Table des matières v

1 Introduction 1

1.1 Motivations . . . 1
1.2 Lagrangian Hydrodynamics . . . 1
1.3 Axisymmetric geometry . . . 3
1.4 Numerical schemes for Hydrodynamics . . . 4
1.4.1 Discrete properties . . . 4
1.4.2 ALE methodology . . . 5
1.4.3 "Lagrange + Remap" schemes : state-of-the-art . . . 8
1.4.3.1 Space- and Time-Staggered discretizations . . . 8
1.4.3.2 Space-Staggered and Time-Centered discretizations . . . 10
1.4.3.3 Space- and Time-Centered discretizations . . . 12
1.5 Present approach . . . 13
1.5.1 Lagrangian phase . . . 13
1.5.2 Remapping phase . . . 15
1.5.3 Summary . . . 16
1.5.4 Some ALE numerical results . . . 16
1.6 Overview of this work . . . 17

2 Schémas numériques lagrangiens CSTS 19

2.1 Introduction . . . 19
2.2 Cadre multi-matériaux . . . 20
2.3 Intégrale d'action discrète et application du principe de moindre action . . . 22
2.4 Schéma CSTS à masses nodales constantes non diagonales . . . 23
2.4.1 Intégrale d'action discrète . . . 23
2.4.2 Équation discrète de quantité de mouvement et modèle de fermeture 24
2.4.3 Prédicteur/correcteur pour l'équation de quantité de mouvement . . . 27
2.4.4 Équation discrète d'énergie cinétique . . . 28
2.4.5 Équation discrète d'énergie interne . . . 29

2.4.6 Construction de l'énergie interne décalée . . . 32
2.4.7 Propriétés du schéma . . . 34
2.4.7.1 Conservation de la masse . . . 34
2.4.7.2 Consistance . . . 34
2.4.7.3 Conservation de la quantité de mouvement . . . 35
2.4.7.4 Conservation de l'énergie totale . . . 35
2.4.7.5 Cohérence thermodynamique . . . 36
2.5 Schéma CSTS à masses nodales variables . . . 37
2.5.1 Intégrale d'action discrète . . . 37
2.5.2 Équation discrète de quantité de mouvement et modèle de fermeture 39
2.5.3 Prédicteur/correcteur pour l'équation de quantité de mouvement . . 41
2.5.4 Équation discrète d'énergie cinétique . . . 43
2.5.5 Équation discrète d'énergie interne . . . 43
2.5.6 Construction de l'énergie interne décalée . . . 46
2.5.7 Propriétés du schéma . . . 48
2.5.7.1 Conservation de la masse . . . 48
2.5.7.2 Consistance de la quantité de mouvement . . . 48
2.5.7.3 Conservation de la quantité de mouvement . . . 49
2.5.7.4 Conservation de l'énergie totale . . . 50
2.5.7.5 Cohérence thermodynamique . . . 51
2.6 Conclusion du chapitre . . . 52

3 Géométrie **55**
3.1 Généralités . . . 55
3.2 Calcul des volumes axisymétriques V_c . . . 57
3.2.1 Expressions explicites . . . 57
3.3 Construction des masses de coin m_{cp} . . . 58
3.3.1 Définitions des volumes de contrôle V_{cp} . . . 58
3.3.2 Expressions explicites . . . 59
3.3.3 Propriétés . . . 61
3.4 Construction des vecteurs de volume de coin $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ . . . 62
3.4.1 Expressions explicites . . . 62
3.4.2 Propriétés . . . 62
3.5 Construction des vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ . . . 64
3.5.1 Expressions explicites . . . 64
3.5.2 Propriétés . . . 64
3.6 Vérification des hypothèses de consistance pour le schéma VNM . . . 65
3.7 Dépendances radiales des quantités géométriques . . . 66
3.7.1 Dépendances radiales et préservation des symétries . . . 66

3.7.2 Analyse des termes de l'équation de quantité de mouvement 68
3.7.3 Analyse des termes de l'équation d'énergie interne 74
3.7.4 Résumé 76
3.8 Conclusion du chapitre 77

4 Construction et analyse des termes dissipatifs 79
4.1 Terme de pseudo-viscosité 79
4.1.1 Principe de la méthode et cahier des charges 79
4.1.2 Construction du terme de pseudo-viscosité et propriétés 81
4.2 Terme d'anti-dérive 85
4.2.1 Origine des modes de déformations non physiques 85
4.2.2 Corrections d'anti-dérive en vitesse 88
4.2.2.1 Principe 88
4.2.2.2 Propriétés 89
4.2.3 Corrections d'anti-dérive en force 90
4.2.3.1 Principe 90
4.2.3.2 Propriétés 91
4.2.4 Corrections d'anti-dérive par filtrage inertiel 93
4.2.4.1 Principe 93
4.2.4.2 Propriétés 99
4.3 Conclusion du chapitre 100

5 Résultats numériques lagrangiens en géométrie axisymétrique 103
5.1 Généralités 103
5.2 Tube à choc de Sod 107
5.2.1 Présentation des cas test 107
5.2.1.1 Tube à choc de Sod plan 107
5.2.1.2 Tube à choc de Sod sphérique 107
5.2.2 Solution de référence 108
5.2.3 Résultats numériques 109
5.2.3.1 Tube à choc de Sod plan 109
5.2.3.2 Tube à choc de Sod sphérique 110
5.3 Compression isentropique de Kidder 111
5.3.1 Présentation du cas test 111
5.3.2 Solution de référence 111
5.3.3 Résultats numériques 115
5.4 Onde de choc de Noh 118
5.4.1 Présentation des cas test 118
5.4.1.1 Onde de choc de Noh plan 118

5.4.1.2 Onde de choc de Noh sphérique . . . 118
5.4.2 Solution de référence . . . 120
5.4.3 Résultats numériques . . . 121
5.4.3.1 Onde de choc plane de Noh . . . 121
5.4.3.2 Onde de choc de Noh sphérique sur maillages polaires . . . 121
5.4.3.3 Onde de choc de Noh sphérique sur maillage cartésien . . . 123
5.5 Onde de choc de Sedov . . . 127
5.5.1 Présentation du cas test . . . 127
5.5.2 Solution de référence . . . 127
5.5.3 Résultats numériques . . . 128
5.6 Conclusion du chapitre . . . 132

6 Extension des schémas CSTS à la méthodologie ALE 135
6.1 Introduction au schéma ALE . . . 135
6.2 Phase de régularisation et de projection à l'instant $t^{n+1/2}$ . . . 136
6.2.1 Introduction . . . 136
6.2.2 Attentes sur la phase de projection . . . 138
6.2.3 Méthode de Dukowicz . . . 139
6.2.4 Projection sur le maillage primal . . . 140
6.2.4.1 Aspect multi-matériaux . . . 140
6.2.4.2 Définition des quantités centrées projetées . . . 142
6.2.5 Projection sur le maillage dual . . . 144
6.2.6 Résultats intermédiaires sur la phase de projection . . . 146
6.2.6.1 Conservation des quantités projetées . . . 146
6.2.6.2 Conservation de la quantité de mouvement . . . 147
6.2.6.3 Conservation de l'énergie totale . . . 148
6.2.6.4 Cohérence thermodynamique . . . 149
6.2.6.5 Préservation d'un champ de vitesse constant . . . 150
6.2.6.6 Continuité de la projection . . . 150
6.3 Transfert de masse et erreur d'énergie cinétique . . . 151
6.3.1 Introduction . . . 151
6.3.2 Transfert de masse . . . 152
6.3.3 Corrections de vitesse . . . 154
6.3.4 Corrections de l'énergie interne . . . 156
6.4 Propriétés de l'algorithme ALE global . . . 159
6.4.1 Conservation de la quantité de mouvement . . . 160
6.4.2 Conservation de l'énergie totale . . . 160
6.4.3 Respect de la cohérence thermodynamique . . . 160
6.4.4 Continuité du schéma ALE . . . 161

6.5 Conclusion du chapitre 162

7 Résultats numériques en formulation ALE **165**

7.1 Généralités 165
7.2 Tube à choc de Sod en géométrie axisymétrique 168
7.2.1 Présentation du cas test 168
7.2.2 Solutions de référence 168
7.2.3 Résultats numériques 169
7.3 Vortex isentropique 169
7.3.1 Présentation du cas test 169
7.3.2 Solution de référence 172
7.3.3 Résultats numériques 172
7.4 Onde de choc sphérique de Sedov 175
7.4.1 Présentation du cas test 175
7.4.2 Solution de référence 175
7.4.3 Résultats numériques 175
7.5 Point triple en géométrie axisymétrique 178
7.5.1 Présentation du cas test 178
7.5.2 Solution de référence 178
7.5.3 Résultats numériques 179
7.6 Interaction choc-bulle 182
7.6.1 Présentation du cas test 182
7.6.1.1 Géométrie plane 182
7.6.1.2 Géométrie axisymétrique 182
7.6.2 Solution de référence 183
7.6.3 Résultats numériques 183
7.6.3.1 Géométrie plane 183
7.6.3.2 Géométrie axisymétrique 183
7.7 Conclusion du chapitre 186

8 Conclusion & Perspectives **187**

A Démonstration des résultats du Chapitre 2 **189**

A.1 Démonstration de la consistance du schéma CCNM 189
A.2 Démonstration de la cohérence thermodynamique du schéma VNM 191

B Application des conditions aux limites **197**

C Démonstration des résultats du Chapitre 3 **199**
C.1 Vérification des volumes axisymétriques V_c . . . 199
C.2 Verification des vecteurs de volume de coin $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ . . . 201
C.3 Vérification des vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ . . . 202
C.4 Vérification des hypothèses de consistance pour le schéma VNM . . . 204
C.4.1 Approximation du volume de coin V_{cp}^{M} au premier ordre . . . 204
C.4.2 Vérification des hypothèses de consistance . . . 204
C.4.3 Calcul explicite des variations de masse sur maillage régulier . . . 207
C.5 Expressions des forces pour un mouvement purement axial . . . 208
C.6 Expressions des masses nodales pour un mouvement purement axial . . . 210
C.7 Expression des flux de quantité de mouvement pour un mouvement purement axial . . . 213
C.8 Expression de la divergence discrète de la vitesse pour un mouvement purement axial . . . 218
C.9 Expression des termes masses variables de l'énergie interne pour un mouvement purement axial . . . 219

D Démonstration des résultats du Chapitre 6 **223**
D.1 Analyse de l'erreur due au transfert de masse . . . 223
D.1.1 Approximation du volume V_p^{M} au premier ordre . . . 223
D.1.2 Écart entre les volumes V_p^{D} et V_p^{M} . . . 224
D.1.3 Consistance de la densité nodale ρ_p . . . 225
D.2 Cohérence thermodynamique de la correction en énergie interne . . . 227
D.3 Continuité de la correction en énergie interne . . . 229
D.4 Conservation de la quantité de mouvement du schéma ALE . . . 230
D.5 Conservation de l'énergie totale du schéma ALE . . . 232

Bibliographie **235**

Notations

$\mathcal{A}$: action integral
$\boldsymbol{x}$: Eulerian coordinate
$\boldsymbol{u}$: velocity
m : mass
$\boldsymbol{\mu}$: momentum
$\boldsymbol{f}$: anti-hourglassing force
v : specific volume
V : volume
dV : infinitesimal volume
A : surface
dA : infinitesimal surface
$\boldsymbol{n}$: outward normal
ρ : density
p : pressure
q : artificial viscosity
e : specific internal energy
s : specific entropy
T : temperature
c^s : sound speed
φ : material index
$\mathcal{E}$: total energy
$\mathcal{K}$: kinetic energy
$\mathcal{I}$: internal energy
l : characterstic length
t : time
Δt : time step
$\cdot^n$: integer time index
$\cdot^{n+1/2}$: half time index

Δx : space step
$\cdot_c$: cell index
$\cdot_p$: node index
$P(c)$: set of all nodes p in a cell c
$C(p)$: set of all cells c surrounding a node p
$Q(p)$: set of all nodes q sharing a cell with node p
z : axial component in axisymmetric geometry
r : radial component in axisymmetric geometry

Chapitre 1

Introduction

1.1 Motivations

Many CEA's applications require the simulation of compressible, non-miscible multi-material fluid flows. Lagrangian Hydrodynamics was the first framework used—by the Defense Industry [1]—to numerically compute the evolution of such systems. Although the first calculations date back to the 50's, multi-material Hydrodynamics is still challenging today and represent a huge area of research in Computational Fluid Dynamics (CFD). Indeed, hydrodynamic flows may involve simultaneously : (i) an arbitrary number of non-miscible materials ; (ii) both strong shocks and isentropic process ; (iii) large deformations ; and (iv) high transfers between kinetic and internal energies. All this work is dedicated to the construction of a numerical method solving Lagrangian equations for Hydrodynamics. We pay a special attention on some crucial numerical properties—conservations, thermodynamic consistency, robustness—required for the simulation of these demanding flows.

This introduction is organized as follows : (i) we introduce Lagrangian Hydrodynamics and the axisymmetric geometry ; (ii) numerical Hydrodynamics schemes are presented and a state-of-the-art is reviewed ; (iii) we describe our approach ; and (iv) an overview of this work is given.

1.2 Lagrangian Hydrodynamics

Hydrodynamics obeys the usual Euler's equations. Neglecting heat sources and heat conduction, justified for very fast evolutions, the local form of these equations in the

Lagrangian coordinates writes

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{dt} = -\rho\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}, & \text{mass conservation,} \quad (1.1a) \\ \rho\,\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}p, & \text{momentum conservation,} \quad (1.1b) \\ \rho\,\frac{de}{dt} = -p\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}, & \text{internal energy evolution.} \quad (1.1c) \end{cases}$$

We consider here the specific internal energy evolution instead of the total energy conservation law to focus on entropy variation (refer to [2, 3] for a total energy formulation). The Lagrangian frame greatly simplifies Euler's equations since it is the only frame of reference for which the advective terms cancel [3]. Positions and velocities are related thanks to the geometric definition

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{u}, \tag{1.2}$$

used to update Lagrangian positions $\boldsymbol{x}$. For Hydrodynamics, the specific internal energy e is usually a function of the two independant state variables v and s, *i.e.* $e = e(v\,,s)$, which is called the complete equation of state (EOS). Partial derivatives of the specific internal energy define the absolute temperature T and the thermodynamic pressure p

$$T = \frac{\partial e}{\partial s}\Big|_p, \tag{1.3}$$

$$p = -\frac{\partial e}{\partial v}\Big|_s. \tag{1.4}$$

The second relation (1.4) is an incomplete EOS written in the form $p = \mathrm{EOS}(v\,,e)$ is used to close the system (1.1a)-(1.1b)-(1.1c). By construction of the specific internal energy $e = e(v\,,s)$, we get $de = \frac{\partial e}{\partial v}\big|_s\,dv + \frac{\partial e}{\partial s}\big|_p\,ds$. With the following identity $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\rho^2}\,\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{\rho}\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}$, we obtain the well known Gibbs relation :

Gibbs Relation. *The specific entropy variation ds is*

$$\rho\,T\,ds = \rho\,de + p\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}. \tag{1.5}$$

We remind here the Second Principle of Thermodynamics.

Second Principle of Thermodynamics. *For an adiabatic process that relates one equilibrium state to another, the total entropy can only increase [4], i.e.*

$$\frac{d}{dt}\int_{V(t)} \rho\,s\,dV \geq 0, \tag{1.6}$$

for any closed Lagrangian volume $V(t)$.

Note that $\frac{d}{dt}\int_{V(t)} \rho\,s\,dV = 0$ for a perfect isentropic (adiabatic and reversible) process. We close this introduction by recalling the usual conservation results for mass, momentum

and total energy for any Lagrangian volume $V(t)$, mainly consisting in writing Euler's equations in the integral form.

For any Lagrangian closed volume $V(t)$, the total mass of the system $m(t) = \int_{V(t)} \rho \, dV$ is conserved

$$\frac{d}{dt} m(t) = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \, dV = 0. \tag{1.7}$$

By definition of the density $\rho = \frac{dm}{dV}$, mass conservation also writes $\rho \, dV = \rho_0 \, dV_0$ implying that, for all scalar quantity b and for all closed Lagrangian volume $V(t)$

$$\int_{V(t)} \rho \, \frac{db}{dt} \, dV = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \, b \, dV. \tag{1.8}$$

For all Lagrangian volume $V(t)$, the total momentum of the system $\boldsymbol{\mu}(t) = \int_{V(t)} \rho \, \boldsymbol{u} \, dV$ satisfies

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\mu}(t) = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \, \boldsymbol{u} \, dV = - \int_{\partial V(t)} p \, \boldsymbol{n} \, dS. \tag{1.9}$$

For all Lagrangian volume $V(t)$, the total energy of the system $\mathcal{E}(t) = \mathcal{K}(t) + \mathcal{I}(t)$ satisfies

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}(t) = - \int_{\partial V(t)} p \, \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} \, dS, \tag{1.10}$$

where $\mathcal{K}(t) = \int_{V(t)} \frac{1}{2} \rho \, \boldsymbol{u}^2 \, dV$ and $\mathcal{I}(t) = \int_{V(t)} \rho \, e \, dV$ are respectively the total kinetic energy and the total internal energy.

1.3 Axisymmetric geometry

Hydrodynamic 3D flows with a θ-invariance in cylindrical coordinates $(r \, , \theta \, , z)$ are of great interest at the CEA. In that case, the reduction to 2D problems in the $(r \, , z)$ plane provides a significant computational benefit. The mesh plane therefore represents the radial section of a 3D flow with cylindrical symmetry around a central axis, generally labeled z. A domain $\Omega(t)$ in axisymmetric geometry is therefore a torus generated by the rotation of a surface $A(t)$ around the z-axis (see figure 1.1). Expressing the gradient and the divergence operators in cylindrical coordinates for every scalar b and vector $\boldsymbol{a} = a_z \, \boldsymbol{e}_z + a_\theta \, \boldsymbol{e}_\theta + a_r \, \boldsymbol{e}_r$ quantities

$$\boldsymbol{\nabla} b = \frac{\partial b}{\partial z} \boldsymbol{e}_z + \frac{1}{r} \frac{\partial b}{\partial \theta} \boldsymbol{e}_\theta + \frac{\partial b}{\partial r} \boldsymbol{e}_r, \tag{1.11}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{a} = \frac{\partial a_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} + a_r \right) + \frac{\partial a_z}{\partial z}, \tag{1.12}$$

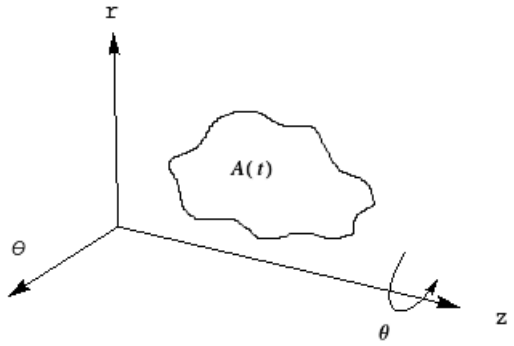


FIGURE 1.1 – Rotation of the surface $A(t)$ in the $(r\,,z)$ plane around the z-axis generates the computational domain in axisymmetric geometry.

yields the following Euler's equations in the $(r\,,z)$ plane

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{dt} = -\,\rho\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right), & \text{(1.13a)} \\ \rho\frac{du_z}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial z}, & \text{(1.13b)} \\ \rho\frac{du_r}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial r}, & \text{(1.13c)} \\ \rho\frac{de}{dt} = -\,p\,\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right). & \text{(1.13d)} \end{cases}$$

The main difficulty here is to properly discretize the $\frac{1}{r}$ terms. Errors in these terms result in strong and non-physical singularities, especially near the z-axis where r is close to zero : see subsection 1.4.1 for more details. Note finally that the total momentum in axisymmetric geometry writes $\boldsymbol{\mu}(t) = \left(\int_{V(t)} \rho\, u_z\, dV\right) \boldsymbol{e}_z$ using the θ-invariance and depends only on the axial component. The axial momentum is thus conserved but not necessarily the apparent radial pseudo-momentum [5].

1.4 Numerical schemes for Hydrodynamics

1.4.1 Discrete properties

To deal with all the features introduced in section 1.1, numerical hydrodynamic schemes have to meet the following requirements : (i) local mass conservation (ensured by the Lagrangian assumption) ; (ii) momentum conservation (only for the axial component in axisymmetric geometry) ; (iii) total energy conservation which is critical for capturing strong shocks [6] ; and (iv) entropy increase for non-smooth flows. Point (iv) is the compliance with the Second Principle of Thermodynamics (1.6) which plays an important role for robustness, especially for complex EOSs. The capture of isentropic flows—meaning the conservation of entropy—complements the second principle. Both of these properties are termed thermodynamic consistency in this PhD dissertation. Note that the thermodynamic consistency terminology may also include the total energy conservation (First Principle of

the Thermodynamics) [7].

Robustness in Lagrangian descriptions is primarily limited by mesh distortions that appear in strongly sheared and vortical flows. Furthermore, even for smooth flows, distortions can still appear as so-called "non-physical" or "hourglass" modes. As a consequence of these mesh distortions, fundamental symmetries are breaking on some flows of great interest. In particular, for inertial confinement fusion (ICF) simulations in axisymmetric geometry, Rayleigh-Taylor instabilities may be amplified by the loss of the spherical symmetry [8–10], degrading even more the mesh and leading to unacceptably large errors in the numerical solution. The reader can refer to [11] for an example of such singularity. An other example of symmetry breaking in axisymmetric geometry is considered and studied in this work. In that case, some numerical results are provided on a simple flow and a solution to preserve the planar symmetry is proposed : see chapters 3 and 5.

It is well-known that satisfying all these properties simultaneously is a difficult task. As an example, considering 2D meshes where nodes are connected by straight lines, Whalen shows in [12] that one cannot preserve energy, entropy and sphericity at the same time, even on equal-angle polar meshes aligned with the flow. Therefore, one has to emphasise some properties, which depend on the problem, at the expense of others. As an example, in this work, the emphasis is put on thermodynamic consistency—crucial for CEA's applications—and the constraint of the strict momentum conservation is relaxed.

1.4.2 ALE methodology

Principle Prior to the introduction of Arbitrary-Lagrangian-Eulerian (ALE) methods [13, 14], the mesh motion was restricted to a Lagrangian evolution—where the mesh follows the fluid—or an Eulerian evolution—where the mesh is fixed throughout the calculation. Although Lagrangian methods present a lot of advantages, they are also prone to severe mesh tangling and cannot capture large deformations, vorticity or shear. At best, these large mesh distortions result in a loss of accuracy but, in general, they break the calculation down long before reaching the final time. On the other hand, Eulerian methods can handle such deformations since the mesh is fixed but they fail to maintain sharp interfaces and produce diffusive solutions. Noticing that Eulerian and Lagrangian are only two particular mesh motions, ALE techniques sucessfully combine the best of the two previous approaches by allowing the mesh to move with an arbitrary velocity. A full and recent review of ALE schemes is available in [3].

Direct vs indirect ALE In the context of ALE simulations, additionnal advective terms—inevitably appearing in the system (1.1a)-(1.1b)-(1.1c) since the mesh does not necessarly move with the fluid velocity—can be taken into account directly in the PDEs or can be solved in a seperate step [15]. The first case, usually termed "direct ALE" in the

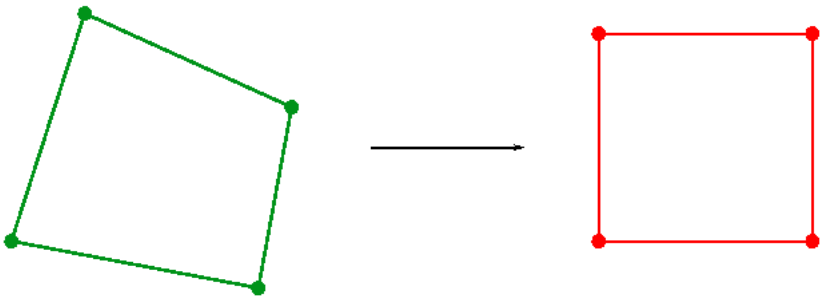


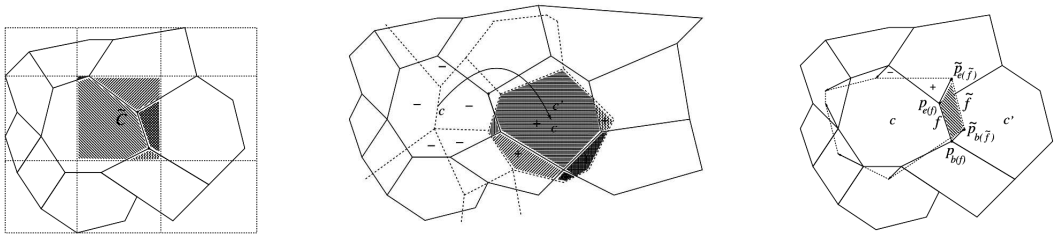
FIGURE 1.2 – A cell distorded by the flow or by "non-physical" modes is regularized.

literature [16–18], is computationally more efficient than the second one but introduces more complexity in discrete equations since all terms are treated at the same time. In particular, the least action principle—also used in this work—is taken in [17, 18] as a guideline when deriving the scheme in order to handle such complexity. This procedure allows the authors of [17, 18] to ensure an overall compatibility between all discrete terms.

"Lagrange + Remap" methodology We only consider in this work "indirect ALE" or "Lagrange + Remap", largely used at CEA. The ALE algorithm is commonly split into three steps : (i) a Lagrangian update of variables where the mesh moves with the fluid velocity ; (ii) a rezoning (or regularization) phase where the mesh quality is improved ; and (iii) a remapping phase consisting in a conservative transfer of the fields from the Lagrangian to the rezoned mesh. This separation introduces appreciable advantages : (i) it reduces the overall algorithm complexity ; (ii) existing and well-known Lagrangian solvers can be naturally extended to the ALE methodology by simply adding rezoning and remapping phases ; (iii) it allows to preserve good properties of these Lagrangian solvers in terms of thermodynamic consistency. The latter is usually achieved by a monotone remapping of the internal energy. In this case, the remapped internal energy is constrained to stay positive through non-linear mechanisms [19, 20]. Note that the repair paradigm [21–23]—see chapter 6 for more details—or flux corrected transport (FCT) [24–26] can also be used for that purpose.

Rezoning phase Rezoning consists in improving the computational mesh quality—to prevent concave cells for instance—degraded by the flow or the "non-physical" modes : see figure 1.2. The reader can refer to [27–30] for rezoning algorithms. While it is not discussed in this dissertation, the analysis of chapter 6 can apply even with connectivity changes between Lagrangian and rezoned meshes. Such a rezoning can be found in [31].

Remapping phase The remapping phase is required in order to transfer the fields from the Lagrangian mesh to the rezoned mesh. A discrete field η on the Lagrangian mesh $\{c\}$ is transfered, with a second-order accuracy, on the rezoned mesh $\{\tilde{c}\}$ through the following



(a) (b) (c)

FIGURE 1.3 – Three differents methods to transfer quantities from the Lagrangian mesh to the rezoned mesh : (a) intersection-based remap where the computation of geometric intersections (dashed regions) is needed ; (b) flux-based remap where the new quantity in the regularized cell c is interpreted as his old value—*i.e.* in the Lagrangian cell c—plus contributions (fluxes) indicated by "-" (loss) or "+" (gain) ; (c) swept region-based remap where fluxes are approximated thanks to the swept-regions (dashed for the face f) of cell's faces. Picture extracted from [3].

relation [32, 33] :

$$\eta_{\tilde{c}} = \sum_{c} \int_{\tilde{c}\cap c} \left[\eta_c + (\boldsymbol{\nabla}\eta)_c \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c)\right] dV. \tag{1.14}$$

Three methods can be considered to evaluate the previous integral. Following the terminology of [3, § 9.1.4], these methods are :

— Intersection-based remap : exact intersections $\tilde{c} \cap c$ and integrations of the integral (1.14) are performed. This is the most general and robust approach but it is computationally expensive ;

— Flux-based remap : the integral (1.14) is formulated as the value of the field η in the cell $\tilde{c}$ in its Lagrangian configuration plus contributions (fluxes) from the other Lagrangian cells. The method is more efficient but is restricted to meshes with identical connectivities ;

— Swept region-based remap : fluxes are approximated with swept-regions of the cell's faces. This is the most efficient approach but it requires small displacements between Lagrangian and rezoned meshes, in addition with identical connectivities.

These three methods are summarized in figure 1.3 extracted from [3]. Note that the flux-based approach can be seen as an intersection-based remap since fluxes can be determined with exact intersections between the two meshes.

In a non-miscible multi-material framework, the issue of tracking sharp interfaces necessarily arise. Indeed, the knowledge of material positions is required in order to remap material quantities, preventing materials' diffusion over several cells. Commonly, interfaces are geometrically reconstructed using advected volume fractions [34–36] (Volume of Fluid methods), sometimes coupled with additional informations [37, 38] (Moment of Fluid methods). It is worth mentioning the work of Després *et al.* [39] where materials are advected in a non-diffusive way without reconstructing interfaces.

Most of the methods and algorithms described here are beyond the scope of this work. Existing methods are thus used to provide numerical results of chapter 7 : (i) the Jun's algorithm [29] is considered for the rezoning ; (ii) exact intersections are performed to remap quantities ; (iii) monotonicity is ensured thanks to the method of Van Leer [19] ; and (iv) materials' diffusion is avoided with the Volume of Fluid interface reconstruction method of Youngs [36].

1.4.3 "Lagrange + Remap" schemes : state-of-the-art

A state-of-the-art on "Lagrange + Remap" methods is proposed here, based on [3, 40]. *Throughout the present work "ALE" will designate "Lagrange + Remap" unless otherwise specified.* This subsection does not intend to be comprehensive. This is actually difficult knowing the number of methods and algorithms—both reported and unreported—developed since the 1950s. The goal is to give an overview of major difficulties in constructing a numerical hydrodynamic method. Most of these difficulties are still present today and some of them are treated in this PhD dissertation. In particular, this state-of-the-art shows that the thermodynamic consistency is still largely unexplored in the literature, partially justifying the focus on this property. The subsection is organized following three discretizations largely used in hydrodynamic schemes : (i) Space- and Time-Staggered (STS) ; (ii) Space-Staggered and Time-Centered or Staggered-Grid Hydro (SGH) ; (iii) Space- and Time-Centered or Cell-Centered Hydro (CCH).

1.4.3.1 Space- and Time-Staggered discretizations

Space- and Time-Staggered (STS) schemes have pioneered the computer simulation with the seminal work of von Neumann & Richtmyer from 1944 to 1950 [1, 41–43]. Their scheme, designated as VNR here, was originally developed in 1D with a finite difference point of view. The choice of a STS discretization—see figure 1.4 for a 1D example—was probably firstly motivated by simplicity and inspired by the original scheme of Delambre [44] or Verlet [45]. The space-staggering of variables is therefore convenient to evolve the mesh since the method is Lagrangian. Knowing the computational capabilities at this time, time-staggering was also crucial in order to achieve *a* second order cheaply. In addition, the internal energy formulation used in STS discretizations simplifies greatly compliance with the Second Principle of Thermodynamics (1.6), making these schemes robust. Her simplicity and robustness made the success of the method, considered in this work. Therefore, further developments [46–49] followed the VNR scheme, together with the first issues : conservation, symmetry, robustness, mesh distortions, etc... In particular, first 2D simulations raised a lot of questions [49].

We first emphasize that the lack of energy conservation motivated the time-centering of variables since 1965-1970, also simplifiying the ALE extension with the unambiguous

remapping at integer labeled time steps t^n. Consequently, significant developments—not to say the most important in some area—concerning space-staggering issues were mostly done in the context of Staggered Grid Hydro (SGH). They include, among others, the "DeBar kinetic energy fix" [50], staggered remap issues or the elimination of hourglass modes : see subsection 1.4.3.2. Let us now describe these developments and issues in terms of the properties enumerated in subsection 1.4.1.

Conservation In a Lagrangian context, although mass and momentum conservation are already fully satisfied in the VNR scheme, the situation for the total energy is more complex. Indeed, the time-staggering of the velocity—and the kinetic energy by extension—with respect to the internal energy implies a non-trivial definition of the total energy. This energy non-conservation issue was studied in 1D by Trulio & Trigger [51] in 1961 but the first satisfactory answer came from Burton in 1991 [52], at the price of a modified time stepping with respect to the original VNR scheme. He also highlighted the concept of corner masses and forces, largely re-used in the context of SGH (see subsection 1.4.3.2). More recently, Llor *et al.* [53] provide a generalization of Burton's work, showing that Lagrangian STS schemes, including VNR like time steppings, can actually be made to conserve total energy. These conservation extensions are referred as Conservative STS (CSTS) in this PhD dissertation and represent the starting point of this work.

From an ALE point of view, it seems that no effort were provided to develop a conservative remapping since that property was already not fullfilled in the Lagrangian step.

Robustness and entropy The internal energy formulation facilitates compliance with the Second Principe of Thermodynamics (1.6)—at least to the scheme's order—making STS discretizations robust. Note that the lack of energy conservation also participates to this robustness for pre-Burton STS schemes. The basic concept of artificial viscosity, introduced by von Neumann & Richtmyer and still persisting today, is strongly linked to this robustness. As explained in [54] for example, the artificial viscosity is a pressure-like term, usually denoted as q, added in momentum and internal energy equations (1.1b)-(1.1c) to produce dissipation. It first took the form of a scalar quadratic term with respect to the velocity jump [1]. Several improvements and understanding on this scalar artificial viscosity term are due to Lanshoff, Rosenbluth or Kurapatenko [55–57] (see chapter 4 and [54] for more details).

With 2D simulations comes the first tensorial artificial viscosity [58]—to only dissipate along the shock direction—and the first observations of hourglass modes in the STS context [58, 59].

To handle large deformations, Noh [60] started to consider a mix between Eulerian and Lagrangian mesh motions as early as 1964, followed by Pracht [48] eleven years later.

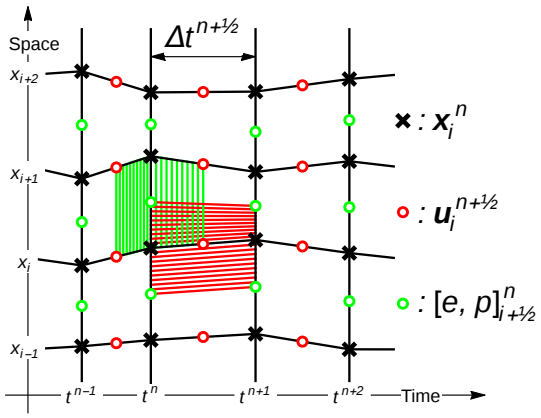


FIGURE 1.4 – A full staggered scheme in 1D. Density and thermodynamic variables are defined at cell center $\boldsymbol{x}_c = \boldsymbol{x}_{p+1/2}$ and at integer time t^n. Kinetic variables are defined at vertex $\boldsymbol{x}_p$ and at half time $t^{n+1/2}$.

Symmetry First attempts for 2D simulations necessarily led the authors of [49] to the symmetry preservation issue. In particular, the question of the spherical symmetry preservation in axisymmetric geometry was already formulated. For that purpose, Wilkins proposed in [47] the first "area-weighted" scheme. The momentum equation is integrated with the infinitesimal surface $dA = dr\,dz$ instead of the "true" 3D infinitesimal volume $dV = 2\,\pi\,r\,dr\,dz$. It preserves the spherical symmetry but fails to conserve momentum and indroduces incompatibilites with the "true" 3D momentum on the axis $r = 0$. Other classical choices of nodal mass proposed by Kolsky [61], Goad [46] or Pracht [48] naively adapted to axymmetric geometry—and thus integrated on the infinitesimal volume dV which is termed "volume-weighted"—overcome these difficulties but break the spherical symmetry. Note that, in axisymmetric geometry, the choice of Kolsky is simply the "volume-weighted" version of what Wilkins proposed. For these reasons, classical choices of node masses are abandoned in this work and an other "volume-weighted" formulations, based on the preservation of planar symmetries, is proposed in chapter 3. These node masses are variable in time—except for Kolsky and only in axisymmetric geometry for Wilkins—but this was not noticed by the authors and even less taken into account. Only Burton recognized that fact as a source of errors [52, § 1, Introduction] in 1991, especially in axisymmetric geometry.

1.4.3.2 Space-Staggered and Time-Centered discretizations

The choice of centering all variables at the same time tackles the total energy definition issue and naturally simplifies its conservation. But almost all other questions, adressed for STS discretizations in subsection 1.4.3.1, still remain for Space-Staggered and Time-Centered (SGH) schemes. In particular, the paper series [62–65] of Caramana *et al.* discussed several improvements including the total energy conservation, hourglass control

or artificial viscosity. It is worth mentioning that Caramana *et al.* reuse the choice of Pracht [48]—adapted to 2D and only computed on the reference configuration—concerning the node mass definition. A more detailed discussion is carried in chapter 6 concerning the staggered remap issues presented here and the link with our work.

High-order methods have been developed in the context of SGH using finite difference [66], finite volume [67], finite element [11, 68] (based on previous low-order algorithms [69–72]) or discontinuous Galerkin [73, 74] approaches. By increasing the overall accuracy, these high-order extensions naturally improve some important properties such as capture of isentropic flows or symmetry preservation—see [11] for an axisymmetric formulation of high-order SGH discretizations on curvilinear meshes. Of course, a better accuracy also implies an additional computational cost.

Conservation Because of the internal energy formulation, special care has been taken to ensure energy conservation for Lagrangian SGH schemes : (i) the support operator method [75, and references therein]—using variational approaches—or mimetic discretizations [76] mimick vectorial relations on the gradient and the divergence at the discrete level ; and (ii) compatible discretizations [62, 77] constrain the pressure work to match between the kinetic and internal energies. The latter is used in [53] and the present work.

For ALE methods, some issues arise in a space-staggered context when remapping fields. In particuliar, one has to deal with inconsistencies between centered and staggered fields in order to conserve compatible definitions of mass and momentum with the Lagrangian phase. This is achieved through global constraint optimization both for flux-based [78, 79] and for intersection-based [80] remap. The total energy conservation is ensured by the classical "DeBar kinetic energy fix" [50]. It consists in adding the kinetic energy error due to the remapping in the internal energy. Of course, this implies some precautions which are discussed in the next paragraph.

Robustness and entropy An artificial viscosity term and hourglass mode control are still necessary in SGH schemes. The artificial viscosity is improved [64, 81, 82], keeping the tensorial form introduced by Schultz [58], while hourglass control is developed from the simplest correction [83] to more complex and general ones [63, 84, 85]. Note that Cell-Centered Grid Hydro (CCH) discretizations—see the next subsection—also motivated some study on the internal consistency in the context of SGH [86, 87], including the so-called Geometric Conservation Law (GCL).

When using a monotone remapping, robustness and entropy questions are almost only related to the "DeBar kinetic energy fix". Unfortunately, these questions are not well documented, with the notable exception of [3, 88] where the authors recognize [3, § 9.3] that : "In principle, the kinetic energy fix can produce negative internal energies". The remapping only being a transfer of information from one mesh to another, entropy—as

any other field—has to be preserved as much as possible. In this spirit, Bailey *et al.* [89] proposed to minimize the kinetic energy error (based on [90]) for flux-based remap. After the DeBar correction, it is also possible to constrain the internal energy to be positive thanks to the repair paradigm [21–23], provided that remapping is dissipative [23].

Symmetry The time centering of variables does not solve the symmetry preservation issue. In particular, Caramana and Whalen proposed in [65] an algorithm that preserves cylindrical (in plane 2D) and spherical (in axiymmetric geometry) symmetries, even on uneven angle polar grids. However, this is done by modifying the pressure force discretization, possibly leading to entropy violation through geometric errors on volume variations.

To extend such improvements to the ALE methodology, a remap preserving the spherical symmetry on equi-angular polar grids is presented in [5] for axisymmetric geometry.

1.4.3.3 Space- and Time-Centered discretizations

Space- and Time-Centered or Cell-Centered Hydro (CCH) discretizations have become fashionable since the 2000s with the work of Després, Mazeran [91–93] and Maire *et al.* [94, 95] in France. Similar developments follow in the USA [96–98], in England [99] or in China [100]. These finite volume schemes are based on the strong mathematical background firstly provided by Lax alone [101] and in collaboration with Wendroff [102, 103] a couple of years after. Godunov [104] also played an important role by giving the initial impetus for the usage of Riemann solvers. See [105] for a review.

Conservation Contrary to STS and SGH approaches, the internal energy evolution (1.1c) is replaced here by the total energy conservation law. Conservation of energy is thus straightforward, which is probably the first motivation to consider such discretizations. If a numerical method is also written in conservation form for the Euler system, the Lax-Wendroff Theorem [102, 103] stated that it converges toward a weak solution provided that the method is consistent and stable. Note that this theorem does not imply that a consistent and stable numerical scheme converges toward the physical (entropic) weak solution.

Robustness and entropy An early attempt of CCH discretizations has been developed by Dukowicz [106] at the Los Alamos National Laboratory. But the method does not respect the GCL. In other words, the two volume variations involved in the method—one defined by the node coordinates and the other defined in the flux terms—are incompatible. This greatly impacts the robustness of the method since it creates spurious motions and

entropy violations. Actually, the approach of Després and Mazeran is the first finite volume scheme that satisfied the GCL.

CCH methods are known to be over-dissipative. In particular, Riemann solvers produce entropy even in expansion and some algorithms try to reduce this error [98, 107]. CCH discretizations also suffer from hourglass-type motions and some techniques are thus required to eliminate, or limit, these mesh distortions [96, 108, 109]. Note finally that the link between Riemann solvers and the artificial viscosity of STS and SGH has been explored by Christensen [110] and Dukowicz [111].

A benefit of CCH is the absence of staggered fields. In the case of an ALE extension, one has only to remap centered fields, which greatly simplifies the algorithm and avoids possible incompatibilities between staggered and centered fields (see subsection 1.4.3.2).

Symmetry Some works in the context of CCH are related to the limiting process for vectors and tensors. The limiting component by component breaks the symmetry of a spherical flow—even on a equi-angle polar grid—justifying the development of frame invariant limiters [87, 112, 113].

1.5 Present approach

The aim of this work is to extend the Lagrangian CSTS scheme of [53] to axisymmetric geometry and to the ALE methodology. Following the "Lagrange + Remap" spirit, this section is splitted into two parts : the Lagrangian and the remapping phases. The rezoning stage is omited here since it is well beyond the scope of this work : see subsection 1.4.2.

1.5.1 Lagrangian phase

Variational approaches As in [17, 18, 53], Hamilton's least action principle [114] is used here. Variational principles are well-recognized as a fruitful approach to derive continuous equations of motion for a large range of systems—including Hydrodynamics [115] and Mechanics [116]—as well as numerical schemes [117]. Variational numerical integrators are mostly derived in a semi-discrete way [118, 119]. However, the derivation here is performed with a fully discrete formulation of the action integral [17, 18, 53, 120].

Variational numerical integrators offer numerous benefits. One of them is simplecticity [121, 122], meaning that volume is conserved in the phase space. This property ensures a geometric compatibility in the derived numerical scheme which is crucial for thermodynamic consistency. Indeed, isentropic flows—which correspond to purely geometric process since $e = e[v]$—are naturally captured when using simplectic integrators.

Multi-materials discrete action integral This work falls into the concept of the numerical mimetism [123], which consists in transposing some important physical constraints into discrete equations. The mimetic approach is not applied here on the PDE's but rather on the underlying least action principle. First of all, the multi-materials aspect is handled with non-miscibility and iso-deformation assumptions. In this framework, a discrete STS action integral is then constructed and the stationarity provides the discrete momentum equation : see chapter 2, section 2.1 for the complete derivation procedure.

The only degree of freedom in this derivation is the choice of the kinetic energy, restricted of course to a quadratic form of velocities. Therefore, the procedure forbids the modification of pressure forces, involving the so-called corner vectors $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ firstly introduced by Goad [46]. Any attempt to modify these forces may lead to geometric incompatibilites and associated entropy violations of possibly lower order than the scheme's.

Mesh distortions More precisely, we have to construct a node mass matrix to define the kinetic energy. Two "volume-weighted" node mass matrices are proposed in chapter 2 to reduce mesh distortions.

The first definition removes the "mass-lumped" assumption, commonly made for second-order staggered discretizations. The node mass matrix is then determined with a finite element approach [68] on the reference configuration.

The second definition introduces variable node masses, based on control volumes computed on the actual configuration [120]. It is shown here that, in axisymmetric geometry, classical definitions of Kolsky [61], Goad [46], Pracht [48] or Caramana *et al.* [62]—naively adapted to axisymmetric geometry—produce strong singularities near the axis $r = 0$. In this work, these singularities are illustrated on a pure axial flow computed on a cartesian mesh. We use this example to build a new control volume, avoiding these singularities and thus preserving the plane symmetry.

An anti-hourglassing filter [120, 124] is also proposed in this work. This correction satisfies all the requirements : precision, conservations and thermodynamic consistency.

Variable node masses In the case of variable masses, the least action principle is fundamental as it provides the guideline to simultaneously conserve total energy and preserve thermodynamic consistency (thanks to the simplecticity). Mass variations are properly taken into account through momentum fluxes, coming from the least action principle [120]. Note that these mass variations are ignored by Wilkins [47] (for axisymmetric geometry), Goad [46] and Pracht [48] as mentioned in subsection 1.4.3.1. These corrective terms—of the form $\frac{1}{2}\frac{\partial m}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{u}^2$ when mass depends explicitly on positions—are well-known in the variable mass system literature [125]. Pesce and Casetta comment [125, § I Introduction] about these corrections : "Ignoring this term may be attributed as the main cause of misleading derivations and of many misinterpretations". There is, however, a major difference between

our work and the variable mass systems of [125] : the mass is constant in the continuous limit since we consider a Lagrangian evolution. Consequently, momentum fluxes can be interpreted as a discretization error in the momentum equation to simultaneously preserve energy and entropy.

Despite the mass variation, the numerical scheme is consistent with the continuous momentum equation (1.1b). While variable mass effects are negligible for smooth flows on regular meshes, the corrective variable mass terms can become dominant : (i) in non-smooth regions ; (ii) on distorded meshes ; (iii) near the axis $r = 0$ in axisymmetric geometry.

1.5.2 Remapping phase

To extend our CSTS Lagrangian scheme to the ALE methodology, we develop a conservative and thermodynamically consistent staggered remapping. Our method is second-order accurate and satisfies other traditional constraints [78, 79] : (i) DeBar consistency [50] ; (ii) continuity with the Lagrangian scheme ; and (iii) monotonicity. Inevitably, some basic and classical concepts are re-used, including the limiting process of Van Leer [19] or the interface reconstruction method of Youngs [36], as enumerated in subsection 1.4.2. We consider here three new approaches for ensuring the thermodynamic consistency and the total energy conservation [126].

Velocity and internal energy corrections Even an accurate remapping with exact mesh intersections and exact integrations affects both the momentum and the kinetic energy because of nodal mass relocalizations and velocity remapping. These errors are removed here thanks to corrections, both on the velocity and the internal energy. We propose two explicit and local velocity corrections, each of them focusing either on the momentum or on the entropy. This shows that there is no ideal correction and a choice has to be made. Such as in the Lagrangian phase, entropy is prefered over strict momentum conservation. The velocity is thus corrected to cancel the kinetic energy error, due to the remapping, wherever it happens to be negative. This error is then added to the internal energy, as recommended by DeBar [50], to ensure a strict total energy conservation. Note that the velocity correction plays exactly the same role as momentum fluxes in the Lagrangian phase. This proper control of entropy is achieved at the expense of the strict momentum conservation, which is now conserved to second-order.

Isentropic internal energy gradient Keeping in mind that the entropy field s should be preserved during remapping—all the necessary entropy is deposed by the artificial viscosity in the Lagrangian phase—we construct the internal energy gradient assuming that $\boldsymbol{\nabla} s = \mathbf{0}$ [127–131]. Hence, only second-order residue can be added to the entropy s during the remapping of the internal energy. This leads to a specific formulation for the

internal energy gradient which is proportional to the limited density gradient. This choice relaxes the monotonicity constraint on the internal energy so as to enforce the preservation of isentropic flows to second-order. The idea of introducing more physics in the limiting process at the expense of a strict monotonicity was already explored recently by Roe *et al.* [132]. Indeed, quoting Roe [132, § I, Introduction] : "One incidental point is that we do not regard very small overshoots, around one percent, as unacceptable. Perhaps there are examples where such a small overshoot might trigger a premature reaction, say, but generally the effect of other modeling errors, ignorance of physical constants, or simply truncation error, are likely to be at least equally blameworthy. Therefore we put more stress on maintaining a compact stencil than on exactly satisfying bounds".

Time-staggered remapping Since entropic features of our Lagrangian CSTS scheme are written here at half time $t^{n+1/2}$, a time-staggered remapping facilitates the overall proof of thermodynamic consistency. However, this choice is not unique : total energy conservation and thermodynamic consistency can be achieved with rezoning and remapping steps at integer labeled times t^n.

1.5.3 Summary

The numerical ALE method described in this PhD dissertation is second-order accurate, conservative, thermodynamically consistent and robust. These four fundamental properties are achieved thanks to the following novelties :

Lagrangian phase

— Variable node masses ;
— Anti-hourglass method based on inertial filtering ;

Remapping phase

— Remapping at half time $t^{n+1/2}$
— Corrections both on velocity and internal energy ;
— Isentropic construction of the internal energy gradient.

1.5.4 Some ALE numerical results

We present here two numerical results of chapter 7 obtained with the method overviewed in this section. These two results illustrate the good properties of our ALE CSTS scheme.

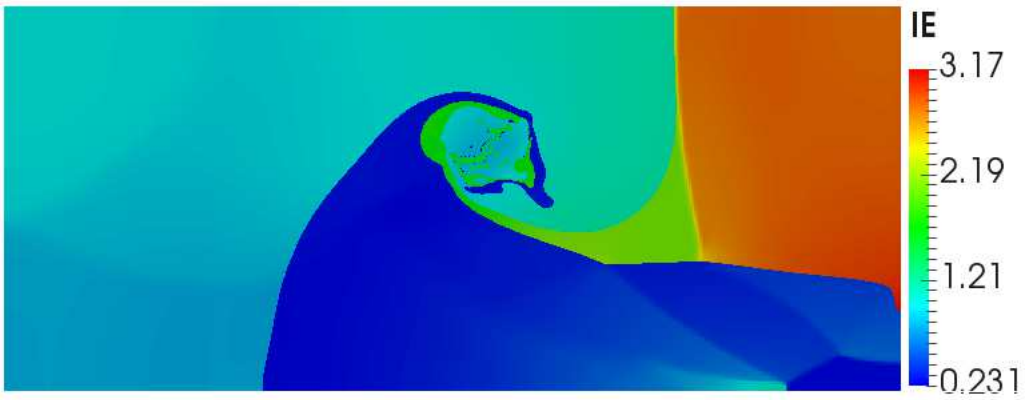
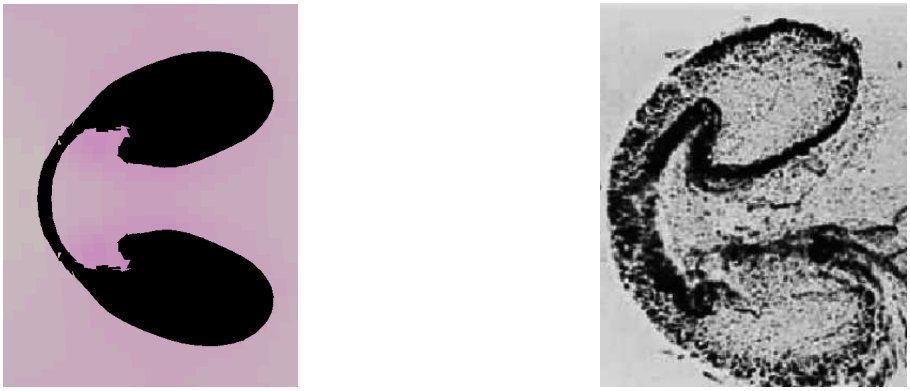


FIGURE 1.5 – Axisymmetric triple point problem with the ALE CSTS algorithm : internal energy map at the final time on a fixed 490×210 grid.



(a) ALE CSTS (b) Schlieran diagram from [137]

FIGURE 1.6 – Cylindrical shocked He bubble with the ALE CSTS algorithm on a 180×50 mesh : (a) density map for the ALE CSTS scheme ; and (b) Schlieran diagram from [137].

Axisymmetric triple point problem The demanding multi-material triple point problem [31, 133–135] is performed in axisymmetric geometry in chapter 7. An ALE mesh motion is required in this test case since a Lagrangian calculation fails to capture the vortex because of mesh tangling. Figure 1.5 shows the capability of our algorihm to correctly capture vorticity and materials' interfaces in a robust manner.

Cylindrical Shock-bubble interaction The numerical simulation of a shocked Helium bubble in air [5, 79, 133, 136] is interesting since experimental results are avalaible [137, 138]. Figure 1.6 shows a good agreement with the experimental result for the bubble shape.

1.6 Overview of this work

This PhD dissertation is organized as follows : (i) two multi-material Lagrangian CSTS schemes—associated with two node mass matrices—are derived thanks to the

least action principle in chapter 2 ; (ii) the momentum consistency, conservations and the thermodynamic consistency results are formulated in chapter 2 ; (iii) chapter 3 presents explicit expressions for geometric terms in axisymmetric geometry ; (iv) dissipative terms—taking the form of an artificial viscosity and anti-hourglassing forces—are constructed in chapter 4 ; (v) Lagrangian numerical results in axisymmetric geometry are presented to assess the scheme's properties in chapter 5 ; (vi) we extend the Lagrangian CSTS schemes with variable node masses to the ALE methodology in chapter 6 ; and (vii) our ALE algorithm is validated with several classical—but demanding—test cases in chapter 7.

The work described in this PhD dissertation was presented at several conferences :

- September 2015 : Numerical Methods for Multi-Material Fluid Flow (MULTIMAT 2015), oral talk by A. Claisse, Würzburg (Germany) ;
- September 2015 : Numerical Methods for Multi-Material Fluid Flow (MULTIMAT 2015), poster, Würzburg (Germany) ;
- September 2015 : 15$^{\text{th}}$ International Workshop on Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows, oral talk, Cargèse (France) ;
- June 2016 : European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS), oral talk, Crete (Greece) ;
- October 2016 : Journées HPC et modèles numériques avancés, oral talk, Cargèse (France)
- May 2017 : 13$^{\text{ième}}$ colloque national en calcul des structures, oral talk, Giens (France) ;
- September 2017 : Numerical Methods for Multi-Material Fluid Flow (MULTIMAT 2017), oral talk, Santa Fe (USA).

Two papers are also in preparation :

- "Reducing mesh distortions and asymmetries in space-staggered Lagrangian hydro-schemes : variable node masses and momentum filtering", A. Claisse, A. Llor, P. Le Tallec and A. Marboeuf, to be submitted ;
- "Conservative and entropy controlled remap for ALE simulations in very large deformations", A. Claisse, P. Le Tallec and A. Marboeuf, to be submitted.

Chapitre 2

Schémas numériques lagrangiens CSTS

Ce chapitre est consacré à la construction de discrétisations décalées en temps et en espace, précises à l'ordre deux, et conservatives (en masse, quantité de mouvement et énergie totale). La méthode de dérivation basée sur le principe de moindre action et utilisée dans le travail d'A. Llor et coll. [53] est reprise ici. Cette méthode est valide quelle que soit la géométrie considérée (2D plan, 2D axisymétrique, 3D). Deux nouvelles définitions de la masse nodale sont présentées ainsi que la prise en compte de l'aspect multi-matériaux. Ces schémas sont ensuite analysés pour déterminer leurs propriétés. Le travail présenté en section 2.5 de ce chapitre fait l'objet d'un article en cours de rédaction [120].

2.1 Introduction

On construit dans ce chapitre deux schémas numériques pour l'hydrodynamique, d'ordre deux, décalés en temps et en espace, et conservatifs. Ces deux schémas ne sont pas obtenus par une approche classique type différences finies, volumes finis ou éléments finis sur les équations locales (1.1a) à (1.1c). Ils sont basés sur le principe de moindre action discret utilisé dans le travail de Llor et coll. [53]. Des liens entre cette approche et les méthodes classiques existent tout de même. En particulier, la discrétisation de l'action peut être vue comme une méthode de type volumes finis en espace et en temps [53]. Le principe de dérivation mis en place dans cette thèse est le suivant : (i) l'équation de quantité de mouvement est déduite de l'application du principe de moindre action sur une action discrète ; (ii) les termes dissipatifs sont ajoutés ; (iii) un processus de prédiction/correction est appliqué sur l'équation de quantité de mouvement pour garder un schéma explicite avec une cohérence thermodynamique à l'ordre deux ; (iv) l'évolution de l'énergie cinétique—définie dans l'action par sa forme quadratique définie positive—est obtenue à partir de l'équation de quantité de mouvement ; et (v) l'équation d'évolution pour l'énergie interne est déduite de façon à strictement conserver l'énergie totale [62]. Il est important de noter

que le seul degré de liberté dans ce principe est le choix de l'énergie cinétique—et donc de la masse nodale—dans l'action discrète. Ce principe interdit donc la modification des forces—faisant intervenir les vecteurs de volume de coin introduit par Goad [46]—comme cela a pu être fait pour la préservation des symétries [65] par exemple. Toute tentative de modification de ces forces peut amener à des erreurs dans l'entropie, *via* la variation de volume intervenant dans le travail de la pression.

Le principe décrit est appliqué à deux définitions différentes pour les masses nodales conduisant aux deux schémas numériques distincts de ce chapitre. Les deux matrices de masse considérées dans ce chapitre correspondent à un enrichissement des choix classiques—souvent limiter à une matrice de masse diagonale et constante—dans le but de combattre les distorsions du maillage.

Le principe de dérivation décrit ici est valide quelle que soit la géométrie considérée (2D plan, 2D axisymétrique ou 3D). Les schémas construits dans ce chapitre peuvent alors être appliqués pour simuler des écoulements en dimension arbitraire sur un maillage quelconque. Pour autant, on se focalise dans cette thèse sur des écoulements 2D (plan et axisymétrique) sur des mailles quadrangulaires.

On commence ce chapitre en présentant le cadre multi-matériaux en section 2.2. La discrétisation de l'intégrale d'action est ensuite décrite en section 2.3. Les deux schémas numériques sont construits dans les sections 2.4 et 2.5. Ces deux sections sont conclues par les propriétés de conservation et de cohérence thermodynamique respectives des deux schémas.

2.2 Cadre multi-matériaux

On précise tout d'abord que l'hypothèse lagrangienne est appliquée à l'échelle de la maille, soit $m_c = \text{constante}$. Dans le cadre multi-matériaux, une seule et même maille peut contenir plus d'un matériau. Elle est alors appelée maille mixte (voir figure 2.1). Afin de pouvoir construire la pression commune en fonction des pressions partielles dans une telle maille, on introduit une hypothèse d'iso-déformation et d'absence de mélange entre les matériaux. On considère donc, dans une maille mixte, que le taux de déformation d_c^φ du matériau φ est égal au taux de déformation d_c de la maille.

Définition 2.1. *La fraction volumique du matériau φ dans une maille mixte c, notée f_c^φ, est définie par*

$$f_c^\varphi = \frac{V_c^\varphi}{V_c}, \tag{2.1}$$

où V_c^φ est le volume occupé par le matériau φ dans la maille mixte c.

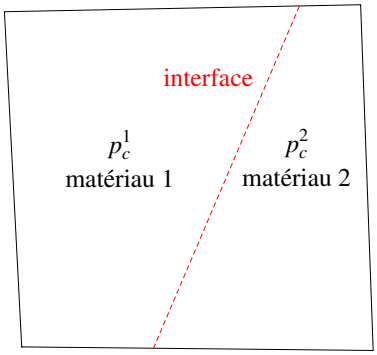


FIGURE 2.1 – Exemple d'une maille quadrangulaire mixte c contenant deux matériaux 1 et 2 avec les pressions partielles p_c^1 et p_c^2.

Les fractions volumiques vérifient

$$\sum_{\varphi} f_c^{\varphi} = 1. \tag{2.2}$$

L'hypothèse d'iso-déformation implique en particulier que

$$\frac{1}{V_c^{\varphi}} \frac{d\,V_c^{\varphi}}{dt} = \mathrm{trace}\,(\mathsf{d}_c^{\varphi}) = \mathrm{trace}\,(\mathsf{d}_c) = \frac{1}{V_c} \frac{d\,V_c}{dt}, \tag{2.3}$$

d'où on déduit l'invariance des fractions volumiques en temps dans un processus lagrangien à iso-déformation

$$d\,f_c^{\varphi} = \frac{d\,V_c^{\varphi}}{V_c} - V_c^{\varphi} \frac{d\,V_c}{V_c^{\varphi}} = f_c^{\varphi} \left(\frac{d\,V_c^{\varphi}}{V_c^{\varphi}} - \frac{d\,V_c}{V_c} \right) = 0. \tag{2.4}$$

Sous cette hypothèse, les variations de volumes par matériau s'obtiennent également très facilement

$$d\,V_c^{\varphi} = \frac{V_c^{\varphi}}{V_c}\, d\,V_c = f_c^{\varphi}\, d\,V_c. \tag{2.5}$$

L'hypothèse d'iso-déformation et d'absence de mélange permet de décomposer l'énergie interne spécifique globale e_c en fonction des contributions e_c^{φ} venant de chaque matériau φ.

Définition 2.2. *L'énergie interne globale e_c est construite dans une maille mixte c à partir des énergies internes partielles e_c^{φ} par la relation*

$$m_c\, e_c = \sum_{\varphi} m_c^{\varphi}\, e_c^{\varphi}. \tag{2.6}$$

La décomposition introduite dans la relation (2.6) intervient dans la construction de l'intégrale d'action discrète dans un cadre multi-matériaux. Les relations similaires sur la pression et la pseudo-viscosité, complétant le modèle de fermeture, sont déduites après

application du principe de moindre action à partir des hypothèses mises en place dans cette section.

2.3 Intégrale d'action discrète et application du principe de moindre action

Définition 2.3. *Dans un cadre multi-matériaux, l'intégrale d'action discrète pour une évolution lagrangienne et isentropique, notée $\mathcal{A}$, est donnée par*

$$\mathcal{A}\big[\{\boldsymbol{x}_p^n\},\{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\}\big] = \sum_n \Big\{ \mathcal{K}^{n+1/2}\,\Delta t^{n+1/2} - \sum_{c,\varphi} m_c^\varphi\, e^\varphi[v_c^{\varphi,n}]\, \frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2} \Big\}. \tag{2.7}$$

Le choix de considérer des variables décalées en temps implique naturellement une définition de l'énergie cinétique $\mathcal{K}^{n+1/2}$ au demi-pas de temps $t^{n+1/2}$, tandis que l'énergie interne e est quant à elle définie au pas de temps entier t^n. Il faut noter qu'on choisit une formulation « volume-weighted » de l'intégrale d'action (2.7) en géométrie axisymétrique. En effet, les masses m_c et l'énergie cinétique $\mathcal{K}^{n+1/2}$ proviennent d'une intégration utilisant le vrai volume infinitésimal $dV = r\,dr\,dz$. On diffère alors du choix classique de Wilkins [47] correspondant à une formulation « area-weighted » où l'intégration sur l'équation de quantité de mouvement est faite avec l'élément de surface $dA = dr\,dz$. Une formulation « area-weighted » a été testée—non déduite du principe de moindre action—mais la perte de la conservation de la quantité de mouvement, la définition non évidente des masses sur l'axe $r = 0$ et surtout la modification des forces de pression a conduit à l'abandon de cette formulation. Les positions et les vitesses sont reliées dans la définition suivante.

Définition 2.4. *La position des nœuds et les vitesses sont liées par la relation de conservation géométrique discrétisée en temps :*

$$\boldsymbol{x}_p^{n+1} = \boldsymbol{x}_p^n + \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\ . \tag{2.8}$$

On note que la relation (2.8) peut être aisément séparée en deux parties

$$\boldsymbol{x}_p^{n+1/2} = \boldsymbol{x}_p^n + \tfrac{1}{2}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}, \tag{2.9}$$

$$\boldsymbol{x}_p^{n+1} = \boldsymbol{x}_p^{n+1/2} + \tfrac{1}{2}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}. \tag{2.10}$$

La variation de l'intégrale d'action (2.7), due à la variation de la position des nœuds $\delta\boldsymbol{x}_p^n$,

s'écrit :

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{A} &= \sum_{n,p}\left(\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}}\cdot\delta\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial\boldsymbol{x}_p^{n}}\cdot\delta\boldsymbol{x}_p^{n}\right)\\ &= \sum_{n,p}\left(\frac{\partial\mathcal{A}}{\Delta t^{n-1/2}\,\partial\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}-\frac{\partial\mathcal{A}}{\Delta t^{n+1/2}\,\partial\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}}+\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial\boldsymbol{x}_p^{n}}\right)\cdot\delta\boldsymbol{x}_p^{n}.\end{aligned}\tag{2.11}$$

La seconde égalité provient de la relation (2.8). En appliquant le principe de moindre action, c'est-à-dire $\delta\mathcal{A}=0$, $\forall\delta\boldsymbol{x}_p^n$, on obtient l'analogue discret de l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\frac{\partial\mathcal{A}}{\Delta t^{n-1/2}\,\partial\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}-\frac{\partial\mathcal{A}}{\Delta t^{n+1/2}\,\partial\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}}+\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial\boldsymbol{x}_p^{n}}=0.\tag{2.12}$$

Cette dernière équation constitue le point de départ pour dériver les deux schémas numériques des deux sections suivantes. En effet, l'équation de quantité de mouvement discrète est directement déduite de l'équation (2.12) d'Euler-Lagrange après y avoir reporté l'expression de l'intégrale d'action $\mathcal{A}$. On rappelle que cette intégrale d'action est entièrement déterminée par l'énergie cinétique et donc par la matrice de masse choisie.

2.4 Schéma CSTS à masses nodales constantes non diagonales

Le premier schéma CSTS décrit ici est basée sur une matrice de masse non diagonale de type éléments finis [68]. Cette matrice de masse est également constante et calculée sur la configuration de référence. Dans la suite, ce schéma sera désigné par CCNM.

2.4.1 Intégrale d'action discrète

On commence par construire l'énergie cinétique à l'aide de la matrice de masse constante et non diagonale.

Définition 2.5. *On définit l'énergie cinétique totale comme la forme quadratique définie positive suivante :*

$$\mathcal{K}^{n+1/2}=\sum_p\mathcal{K}_p^{n+1/2}=\sum_p\tfrac{1}{2}\left[\sum_q M_{pq}\,\boldsymbol{u}_q^{n+1/2}\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}=\tfrac{1}{2}\sum_{p,q}M_{pq}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_q^{n+1/2},\tag{2.13}$$

où les coefficients constants M_{pq} sont définis par

$$M_{pq}=\int_{\Omega_0}\rho_0\,\psi_p\,\psi_q\,dV_0.\tag{2.14}$$

La fonction ψ_p désigne la p-ième fonction (isoparamétrique et affine) de base de l'espace des éléments finis $\mathbb{Q}_1$, et Ω_0 est la configuration initiale.

L'énergie cinétique $\mathcal{K}^{n+1/2}$, définie dans l'équation (2.13), peut se réécrire à l'aide de la matrice de masse, notée $\tilde{M}$, formée des coefficients M_{pq}. On note que la matrice de masse $\tilde{M}$ est la matrice intervenant dans une discrétisation de type éléments finis du terme d'accélération. Dans la suite, on utilisera la notation suivante :

Notation 2.1.

$$\left[\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}\right]_p = \sum_q M_{pq}\,\boldsymbol{u}_q, \tag{2.15}$$

où

$$\tilde{\boldsymbol{u}} = (\boldsymbol{u}_p)_{1\le p\le \textit{Nombre de nœuds}}\ ,\ \tilde{M} = (M_{pq})_{1\le p,q\le \textit{Nombre de nœuds}}. \tag{2.16}$$

L'énergie cinétique $\mathcal{K}^{n+1/2}$ devient donc

$$\mathcal{K}^{n+1/2} = \tfrac{1}{2}\,{}^{\mathrm{t}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}. \tag{2.17}$$

La notation introduite ici est intensivement utilisée dans la suite pour exprimer la quantité de mouvement ou l'énergie cinétique.

Remarque 2.1. *L'objet $\tilde{\boldsymbol{u}}$ est le vecteur dont la taille correspond au nombre de nœuds du maillage et composé des vitesses $\boldsymbol{u}_p$: c'est donc un vecteur formé de tenseurs d'ordre 1. La matrice $\tilde{M}$ est la matrice carrée dont la taille correspond également au nombre de nœuds dans le maillage et formée de coefficients scalaires. La produit de $\tilde{M}$ par $\tilde{\boldsymbol{u}}$ est donc un produit matriciel duquel résulte un objet de la même nature que $\tilde{\boldsymbol{u}}$. La notation (2.1) signifie simplement que l'on prend la $p^{ième}$-composante du produit matriciel $\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}$: l'objet $\left[\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}\right]_p$ est alors un tenseur d'ordre 1 tout comme la vitesse $\boldsymbol{u}_p$.*

L'intégrale d'action discrète (2.7) devient

$$\begin{aligned}\mathcal{A}\big[\{\boldsymbol{x}_p^n\},\{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\}\big] \\ = \sum_n \Big\{\tfrac{1}{2}\sum_{p,q} M_{pq}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_q^{n+1/2}\,\Delta t^{n+1/2} - \sum_{c,\varphi} m_c^\varphi\, e^\varphi[v_c^{\varphi,n}]\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}\Big\}.\end{aligned} \tag{2.18}$$

2.4.2 Équation discrète de quantité de mouvement et modèle de fermeture

On reprend l'équation d'Euler-Lagrange (2.12)

$$\frac{\partial\mathcal{A}}{\Delta t^{n-1/2}\,\partial\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}} - \frac{\partial\mathcal{A}}{\Delta t^{n+1/2}\,\partial\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}} + \frac{\partial\mathcal{A}}{\partial\boldsymbol{x}_p^n} = 0.$$

On injecte l'expression de l'intégrale d'action (2.18) dans l'équation d'Euler-Lagrange (2.12) pour obtenir l'équation de quantité de mouvement non dissipative. Lors du calcul du terme $\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \boldsymbol{x}_p^n}$, on retrouve $m_c^\varphi \frac{\partial e_c^\varphi}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ qui se simplifie de la façon suivante

$$m_c^\varphi \frac{\partial e_c^\varphi}{\partial \boldsymbol{x}_p} = m_c^\varphi \frac{\partial e_c^\varphi}{\partial v_c^\varphi} \frac{\partial v_c^\varphi}{\partial v_c} \frac{\partial v_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = -m_c f_c^\varphi p_c^\varphi \frac{\partial v_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = -f_c^\varphi p_c^\varphi \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = -p_c^\varphi \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^\varphi, \tag{2.19}$$

car $p_c^\varphi = -\frac{\partial e_c^\varphi}{\partial v_c^\varphi}$ (loi d'état en pression (1.4)) et

$$\frac{\partial v_c^\varphi}{\partial v_c} = \frac{\partial V_c^\varphi / m_c^\varphi}{\partial V_c / m_c} = \frac{m_c}{m_c^\varphi} \frac{V_c^\varphi}{V_c} \frac{\partial V_c^\varphi / V_c^\varphi}{\partial V_c / V_c} = \frac{m_c}{m_c^\varphi} f_c^\varphi. \tag{2.20}$$

Concernant le terme $\frac{\partial \mathcal{A}}{\Delta t^{n-1/2} \partial \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}$, il suffit de remarquer que la matrice $\tilde{M}$ est symétrique pour obtenir

$$\frac{\partial \mathcal{A}}{\Delta t^{n-1/2} \partial \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}} = \left[\tilde{M}\, \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right]_p.$$

L'équation de quantité de mouvement discrète non dissipative est alors

$$\left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\right)\right]_p + \sum_{c \in C(p)} \sum_\varphi p_c^{\varphi,n} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} = 0.$$

On ajoute finalement les termes dissipatifs sous la forme d'un terme de pseudo-viscosité par maille q_c^φ et de forces d'anti-dérive $\boldsymbol{f}_{cp}^\varphi$ par matériau φ. La pseudo-viscosité est traitée de manière identique à la pression. Ces termes sont définis dans le chapitre 4 par les relations (4.10) et (4.34). On obtient

$$\left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\right)\right]_p + \sum_{c \in C(p)} \sum_\varphi \left[(p_c^{\varphi,n} + q_c^{\varphi,n}) \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} = 0\ . \tag{2.21}$$

Les vecteurs de volume de coin $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ apparaissent naturellement dans une discrétisation des équations d'Euler [46] et définissent la variation de volume

$$dV_c = \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{u}_p\, \Delta t.$$

Leur calcul est explicité en géométrie axisymétrique dans le chapitre 3. On obtient directement la variation de volume par matériau

$$dV_c^\varphi = \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^\varphi \cdot \boldsymbol{u}_p\, \Delta t,$$

avec

$$\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^\varphi = f_c^\varphi \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}, \tag{2.22}$$

qui est une conséquence de la relation (2.5). Les hypothèses d'absence de mélange et d'iso-déformation, après application du principe de moindre action, permettent donc d'obtenir naturellement le modèle de fermeture dans une maille mixte.

Définition 2.6. *Les relations pour construire les pression et pseudo-viscosité globales d'une maille mixte sont*

$$p_c = \sum_\varphi f_c^\varphi \, p_c^\varphi, \text{ et } q_c = \sum_\varphi f_c^\varphi \, q_c^\varphi, \tag{2.23}$$

sous l'hypothèse d'iso-déformation et en l'absence de mélange.

Avec cette dernière définition et une construction des forces d'anti-dérive $\boldsymbol{f}_{cp}^\varphi$ respectant

$$\boldsymbol{f}_{cp} = \sum_\varphi \boldsymbol{f}_{cp}^\varphi, \tag{2.24}$$

l'équation de quantité de mouvement (2.21) devient

$$\left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right)\right]_p = \sum_{c\in C(p)} \left[(p_c^n + q_c^n)\, \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2}. \tag{2.25}$$

On retrouve le modèle de fermeture équi-compressibilité proposé par Bakhrakh et coll. [139] en 1984 et discuté dans [140] par exemple. Ce modèle a l'avantage d'être très simple à implémenter. Cependant, l'hypothèse d'équi-compressibilité est clairement fausse en général—considérer le cas de l'eau et de l'air par exemple—et d'autres modèles sont alors proposés. Dans le cadre de cette thèse, où seuls des résultats en gaz parfaits sont présentés, avec des coefficients adiabatiques γ^φ proches entre les différents matériaux, les erreurs dues à la différence de compressibilité sont présentes mais marginales. Aucun traitement supplémentaire—tel que la relaxation de pression—est alors effectué. Le modèle de fermeture devra cependant être amélioré lorsque des équations d'états plus complexes seront utilisées.

Remarque 2.2. *Comme dans toute discrétisation de type éléments finis, chaque passage dans l'équation (2.25) demande donc la résolution de deux—un par composante de vitesse—systèmes linéaires creux.*

2.4.3 Prédicteur/correcteur pour l'équation de quantité de mouvement

Les termes dissipatifs dépendent des vitesses, des positions des nœuds et de l'énergie interne spécifique, autrement dit

$$q_c^n = \underline{\mathcal{Q}}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^n\right\}, \left\{\boldsymbol{x}_p^n\right\}, e_c^n\right] \text{ et } \boldsymbol{f}_{cp}^n = \mathcal{F}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^n\right\}, \left\{\boldsymbol{x}_p^n\right\}, e_c^n\right].$$

Pour plus de détails, le lecteur peut se reporter au chapitre 4. Pour plus de clarté dans les notations, on omettra dans la suite la dépendance de $\underline{\mathcal{Q}}$ et $\mathcal{F}$ par rapport à la position $\{\boldsymbol{x}_p\}$ et par rapport à l'énergie interne e_c mais elles doivent être gardées en tête. La définition naturelle de la vitesse centrée $\boldsymbol{u}_p^n$ est

$$\boldsymbol{u}_p^n = \tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right). \tag{2.26}$$

Ce choix implique que les termes dissipatifs sont implicites. Afin de rendre l'équation (2.25) explicite, la solution la plus évidente consiste à prendre finalement $\boldsymbol{u}_p^n = \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}$. Dans ce cas, le demi-pas de temps de retard sur la vitesse peut amener à une production d'entropie au premier ordre seulement, réduisant la robustesse du schéma (instabilités non linéaires). Pour remédier à ces difficultés, on utilise un processus de prédiction/correction sur l'équation de quantité de mouvement (2.25). La matrice de masse étant constante, le processus est identique à celui présenté dans [53] et s'écrit

$$\left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{*n+1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right)\right]_p = \sum_{c\in C(p)} \left[\left(p_c^n + q_c^{n-1/2}\right)\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}\right]\frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n+1/2}}{2}, \tag{2.27a}$$

où $q_c^{n-1/2} = \underline{\mathcal{Q}}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right\}\right]$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2} = \underline{\mathcal{Q}}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right\}\right]$,

$$\left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right)\right]_p = \sum_{c\in C(p)} \left[\left(p_c^n + q_c^n\right)\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n+1/2}}{2}, \tag{2.27b}$$

où $q_c^n = \underline{\mathcal{Q}}\left[\left\{\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\right\}\right]$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^n = \mathcal{F}\left[\left\{\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\right\}\right]$.

En terme de notations : $\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2}$, $q_c^{n-1/2}$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}$ sont les termes de vitesse, de pseudo-viscosité et d'anti-dérive prédits tandis que q_c^n et $\boldsymbol{f}_{cp}^n$ sont les termes de pseudo-viscosité et d'anti-dérive corrigés.

Remarque 2.3. *Quatre résolutions de systèmes linéaires sont donc nécessaires au cours d'une itération en temps si on veut garantir une production d'entropie à l'ordre du schéma. En reprenant les notations de la remarque 2.1, les deux premiers systèmes linéaires à résoudre sont d'inconnues $\tilde{u}_\alpha^{*n+1/2}$, ce qui correspond à la phase de prédiction, et les deux*

derniers sont d'inconnues $\tilde{u}_\alpha^{n+1/2}$, correspondant à la phase de correction. L'indice α désigne ici une composante de la vitesse : $\alpha = x$ ou y en géométrie plane et $\alpha = z$ ou r en géométrie axisymétrique.

2.4.4 Équation discrète d'énergie cinétique

L'équation d'évolution de l'énergie cinétique est obtenue en multipliant l'équation (2.27b) par $\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)$

$$\begin{aligned}
&\tfrac{1}{2}\left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right)\right]_p \cdot \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right) \\
&\quad = \tfrac{1}{2}\left[\tilde{M}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\right]_p \cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \tfrac{1}{2}\left[\tilde{M}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\right]_p \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \\
&\qquad - \tfrac{1}{2}\left[\tilde{M}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right]_p \cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \tfrac{1}{2}\left[\tilde{M}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right]_p \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \\
&\quad = \sum_{c\in C(p)} \left[(p_c^n + q_c^n)\,\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n+1/2}}{2}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

La matrice $\tilde{M}$ étant symétrique, on peut écrire

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\,{}^{\mathrm{t}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} &= \sum_{p,q} \tfrac{1}{2} M_{pq}\,\boldsymbol{u}_q^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \\
&= \sum_{p,q} \tfrac{1}{2} M_{qp}\,\boldsymbol{u}_q^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \\
&= \tfrac{1}{2}\,{}^{\mathrm{t}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}.
\end{aligned}$$

On a alors

$$\tfrac{1}{2}\,{}^{\mathrm{t}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2} - \tfrac{1}{2}\,{}^{\mathrm{t}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} = 0, \tag{2.29}$$

ce qui permet d'obtenir, après avoir sommé la relation (2.28) sur les nœuds p

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}^{n+1/2} - \mathcal{K}^{n-1/2} &= \sum_p \left(\mathcal{K}_p^{n+1/2} - \mathcal{K}_p^{n-1/2}\right) \\
&= \sum_p \sum_{c\in C(p)} \left[(p_c^n + q_c^n)\,\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n+1/2}}{2}.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Remarque 2.4. *L'énergie cinétique globale $\mathcal{K}^{n+1/2}$ n'est jamais numériquement calculée mais sa définition intervient dans le raisonnement pour construire l'énergie interne.*

2.4.5 Équation discrète d'énergie interne

On reprend ici le raisonnement effectué dans [53] pour construire l'équation d'évolution d'énergie interne. Pour assurer la conservation de l'énergie totale, l'équation d'énergie interne doit être compatible [62] avec l'énergie cinétique définie par la relation (2.30), c'est-à-dire que le membre de droite de l'équation d'énergie interne doit être exactement opposé à celui de l'équation (2.30) à un terme de flux en temps près. On peut donc écrire

$$\underbrace{\sum_c m_c(e_c^{n+1}-e_c^n)}_{\text{énergie interne}} = \underbrace{-\sum_p \left(\mathcal{K}_p^{n+1/2}-\mathcal{K}_p^{n-1/2}\right)}_{\text{énergie cinétique}} + \underbrace{\sum_c \sum_{p\in P(c)} \phi_{cp}^{n+1/2}}_{\text{terme de flux en temps}}. \tag{2.31}$$

En injectant la relation (2.30) dans l'équation (2.31), on trouve

$$\begin{aligned}\sum_c m_c(e_c^{n+1}-e_c^n) &= \underbrace{-\sum_p \sum_{c\in C(p)} \left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}}_{\text{Terme A}} \\ &\quad + \underbrace{\sum_c \sum_{p\in P(c)} \phi_{cp}^{n+1/2}}_{\text{Terme de flux en temps}}.\end{aligned}$$

Le terme A est développé et réarrangé après avoir échangé les sommes sur les indices p et c :

$$\begin{aligned}\mathrm{A} &= -\sum_c \sum_{p\in P(c)} \left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2} \\ &= \sum_c \sum_{p\in P(c)} \Big\{ -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ &\qquad -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} \\ &\quad +\tfrac{1}{4}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2})\Big\}.\end{aligned}$$

Après toutes ces modifications sur le terme A et en se ramenant à une maille locale, on obtient l'équation d'évolution d'énergie interne suivante :

$$\begin{aligned} m_c(e_c^{n+1} - e_c^n) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ & -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ & -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} \\ & +\tfrac{1}{4}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2}) + \phi_{cp}^{n+1/2}\Big\}. \end{aligned}$$

Parmi tous les choix possibles de flux $\phi_{cp}^{n+1/2}$, on sélectionne celui permettant d'obtenir une équation en énergie interne la plus simple tout en restant aussi proche que possible de $e_c^n = e(v_c^n)$. Pour cela, on applique quatre principes :

— consistance thermodynamique : $de \simeq -p\,dv$;
— localité : même indice de maille c et pas d'indice en temps inférieur à $n-1$;
— causalité : pas d'indice en temps supérieur à $n+1$;
— une précision en $\mathcal{O}\left(\Delta x^2, \Delta t^3\right)$.

On remarque que

$$\tfrac{1}{4}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2}) = \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

sous l'hypothèse d'une variation régulière du pas de temps $\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2} = \mathcal{O}(\Delta t^2)$. Il suffit alors de prendre

$$\begin{aligned} & -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ & \quad -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} + \phi_{cp}^{n+1/2} \\ & = -\Big[(p_c + q_c)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} + \boldsymbol{f}_{cp}\Big]^{n+1/2}\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}, \end{aligned} \tag{2.32}$$

pour respecter la consistance thermodynamique à l'ordre du schéma en temps. On prend donc le flux $\phi_{cp}^{n+1/2}$ suivant :

$$\begin{aligned} \phi_{cp}^{n+1/2} = & -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^{n+1} + q_c^{n+1})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ & +\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Au final, l'équation d'évolution de l'énergie interne s'écrit :

$$
\begin{aligned}
& m_c(e_c^{n+1}-e_c^n) \\
&= \sum_{p\in P(c)} \Big\{ \underbrace{-\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1} + (p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}}_{\text{Terme B}} \\
&\qquad \underbrace{+\tfrac{1}{4}\Big[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2})}_{\text{Terme C}} \Big\}\,. \qquad (2.34)
\end{aligned}
$$

Il faut noter que : (i) en omettant les forces d'anti-dérive, le terme B correspond à l'approximation de $-(p+q)\,dV$ dans la maille c à l'ordre 3 en temps ; (ii) le flux $\phi_{cp}^{n+1/2}$, que l'on doit ajouter à B pour retrouver une partie de l'équation (2.30), vient du décalage d'un demi-pas de temps entre l'énergie cinétique et l'énergie interne et peut donc être vu comme un flux en temps ; et enfin (iii) le terme C correspond aux termes restant de l'énergie cinétique (2.30) et assure la conservation de l'énergie totale lorsque le pas de temps est variable. On modifie la relation (2.34), afin de la rendre explicite, de la façon suivante :

$$
\begin{aligned}
& m_c\left(e_c^{n+1}-e_c^n\right) \\
&= \sum_{p\in P(c)} \Big\{ -\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1/2} + (p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\
&\qquad + \tfrac{1}{4}\Big[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2}) \\
&\qquad\qquad \underbrace{-\tfrac{1}{2}\Big[(q_c^n-q_c^{n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n} - \boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}\Big]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}}_{\text{Terme D}} \Big\}. \qquad (2.35)
\end{aligned}
$$

Les termes q_c^{n+1} et $\boldsymbol{f}_{cp}^{n+1}$ dépendent de la vitesse prédite $\boldsymbol{u}_p^{*,n+3/2}$ qui n'est pas encore disponible à ce moment du calcul. Ils sont donc remplacés par $q_c^{n+1/2}$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^{n+1/2}$ dans l'équation (2.35) afin de rester explicite en temps. Dans le but de rester conservatif, le terme D est ajouté pour le calcul de e_c^{n+1}. Il correspond à l'énergie manquante dans e_c^n dû au remplacement de q_c^n et $\boldsymbol{f}_{cp}^n$ par $q_c^{n-1/2}$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}$ au pas de temps précédent. L'équation (2.35) d'évolution d'énergie interne obtenue est identique à celle de [53]. Ceci s'explique par le fait que la matrice de masse est constante. Le prédicteur/correcteur modifie également le flux en temps (2.33).

Définition 2.7. *Le flux en temps $\phi_{cp}^{n+1/2}$ en prédicteur/correcteur est défini par*

$$
\begin{aligned}
\phi_{cp}^{n+1/2} = & -\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1/2}\Big]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\
& + \tfrac{1}{2}\Big[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}. \qquad (2.36)
\end{aligned}
$$

2.4.6 Construction de l'énergie interne décalée

Afin d'analyser les propriétés de conservation en énergie totale $\mathcal{E}$ du schéma, il faut définir les énergies cinétique et interne au même temps. Deux choix s'offrent à nous [53] : (i) soit on définit l'énergie cinétique au temps t^{n+1} ; (ii) soit on définit l'énergie interne au temps $t^{n+1/2}$. Dans un cadre où le prédicteur/correcteur est utilisé, cela signifie que

$$\mathcal{E}^{n+1} = \sum_p \underbrace{\left[\mathcal{K}_p^{n+1/2} + \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{2}\left[(p_c^{n+1} + q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\right]}_{\text{énergie cinétique au temps } t^{n+1}} + \sum_c m_c e_c^{n+1}, \quad (2.37)$$

ou

$$\mathcal{E}^{n+1/2} = \sum_p \mathcal{K}_p^{n+1/2} + \sum_c \underbrace{\left[m_c e_c^{n+1} + \sum_{p\in P(c)} \tfrac{1}{2}\left((p_c^{n+1} + q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1}\right)\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\right]}_{\text{énergie interne au temps } t^{n+1/2}}. \quad (2.38)$$

Comme dans [53], on choisit ici de définir l'énergie totale au demi-instant $t^{n+1/2}$ grâce à la relation (2.38) : voir la sous-section 2.4.7 concernant la conservation de l'énergie totale. Cela implique la nécessité de calculer une énergie interne décalée $e_c^{n+1/2}$. Elle est implicitement définie dans la relation (2.38) à partir de e_c^{n+1}. Il est tout de même plus commode de définir cette énergie interne décalée de façon explicite, autrement dit à partir de e_c^n. Pour cela, on remarque que

$$m_c(e_c^{n+1/2} - e_c^n) = m_c(e_c^{n+1} - e_c^n) - m_c(e_c^{n+1} - e_c^{n+1/2}),$$

et on obtient

$$\begin{aligned} m_c\left(e_c^{n+1/2} - e_c^n\right) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ &-\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ &+ \tfrac{1}{4}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2}) \\ &- \tfrac{1}{2}\left[(q_c^n - q_c^{n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n - \boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\Big\}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

On déduit directement à partir de l'équation (2.38) que

$$m_c\,(e_c^{n+1} - e_c^{n+1/2}) = \sum_{p\in P(c)} -\tfrac{1}{2}\left[\left(p_c^{n+1} + q_c^{n+1/2}\right)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}. \quad (2.40)$$

La relation entre la pression et l'énergie interne étant propre à chaque matériau φ, l'énergie interne est également évaluée par matériau. On reprend simplement les relations (2.39) et (2.40) et on ajoute l'indice matériau φ

$$\begin{aligned} m_c^\varphi\left(e_c^{\varphi,n+1/2} - e_c^{\varphi,n}\right) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ &-\tfrac{1}{2}\left[(p_c^{\varphi,n} + q_c^{\varphi,n})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ &+\tfrac{1}{4}\left[(p_c^{\varphi,n} + q_c^{\varphi,n})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\right]\cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2}) \\ &-\tfrac{1}{2}\left[(q_c^{\varphi,n} - q_c^{\varphi,n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n} - \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n-1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\Big\}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

et

$$m_c^\varphi\,(e_c^{\varphi,n+1} - e_c^{\varphi,n+1/2}) = \sum_{p\in P(c)} -\tfrac{1}{2}\left[\left(p_c^{\varphi,n+1} + q_c^{\varphi,n+1/2}\right)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n+1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}. \quad (2.42)$$

Tous les termes introduits dans les deux équations précédentes ont déjà été définis. La dernière relation (2.42) est donc à coupler avec la relation suivante utilisant une demi-équation d'état propre au matériau φ

$$p_c^{\varphi,n+1} = \mathrm{EOS}^\varphi\left(\rho_c^{\varphi,n+1}, e_c^{\varphi,n+1}\right), \quad (2.43)$$

afin de fermer le système.

Remarque 2.5. *On ne considère dans cette thèse que des équations d'états de type « gaz parfait » : $p = (\gamma - 1)\rho\, e$. Bien que les solutions exactes du système (2.42)-(2.43) existent pour ces équations d'état simples, un algorithme de Newton est tout de même utilisé en pratique pour chaque matériau φ. L'objectif à plus long terme est bien sûr d'appliquer le schéma mis en place dans cette thèse à des équations d'états plus générales.*

On rappelle que l'énergie interne globale est construite avec la relation de fermeture (2.6)

$$m_c\, e_c = \sum_\varphi m_c^\varphi\, e_c^\varphi.$$

Le flux en temps partiel est également identique à celui de la définition 2.7 et il suffit

d'ajouter un indice matériau

$$\phi_{cp}^{\varphi,n+1/2} = -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^{\varphi,n+1} + q_c^{\varphi,n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n+1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} + \tfrac{1}{2}\left[(p_c^{\varphi,n} + q_c^{\varphi,n})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}. \tag{2.44}$$

2.4.7 Propriétés du schéma

Grâce à la matrice de masse constante, les démonstrations de conservation et de cohérence thermodynamique sont très proches du travail effectué dans [53].

2.4.7.1 Conservation de la masse

L'hypothèse lagrangienne classique $m_c =$ constante permet de déduire la conservation de la masse à l'échelle du domaine.

2.4.7.2 Consistance

Bien que l'on peut considérer ici le principe de moindre action et la consistance de l'intégrale discrète, la démonstration de la consistance du schéma CCNM se fait de manière classique en partant de l'équation (2.25) de quantité de mouvement discrète.

Théorème 2.1. *Le schéma est consistant en géométrie axisymétrique et en géométrie plane.*

Démonstration. Voir annexe A section A.1. □

Remarque 2.6. *En utilisant une formule d'intégration à un point pour estimer le terme d'accélération dans le calcul de consistance (A.1) de l'annexe A.1, on démontre que l'on a*

$$\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\,\tfrac{du^\alpha}{dt}\psi_p\,r\,dr dz = \sum_{c\in C(p)} A_c\left(\tfrac{1}{4}\,r_c\,\rho_c\,\tfrac{du^\alpha}{dt}(\boldsymbol{x}_c) + k\times\mathcal{O}(\Delta x^2)\right)$$

avec k proportionnelle à la dérivée seconde en espace de $\rho\,\frac{du^\alpha}{dt}\psi_p\,r$ et $\boldsymbol{x}_c$ le centre de la maille plane A_c où la fonction de forme prend la valeur $\frac{1}{4}$. De même, on trouve

$$m_c = \int_{A_c}\rho\,r\,dr\,dz = A_c(\rho_c\,r_c + k'\times\mathcal{O}(\Delta x^2)).$$

On en déduit en approchant la valeur de l'accélération en $\boldsymbol{x}_c$ par sa valeur en $\boldsymbol{x}_p$

$$\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\,\tfrac{du^\alpha}{dt}\psi_p\,r\,dr dz = \sum_{c\in C(p)}\tfrac{1}{4}\,m_c\left(\tfrac{du^\alpha}{dt}(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x) + \tfrac{k}{\rho_c\,r_c}\times\mathcal{O}(\Delta x^2)\right). \tag{2.45}$$

Ceci démontre en particulier qu'un schéma de type « Wilkins » [47, 61] avec $m_p = \sum_{c\in C(p)} \frac{m_c}{4}$ *est consistant sur un maillage axisymétrique.*

2.4.7.3 Conservation de la quantité de mouvement

Définition 2.8. *La quantité de mouvement, naturellement définie au temps* $t^{n+1/2}$*, est*

$$\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} = \sum_p \boldsymbol{\mu}_p^{n+1/2} = \sum_p \left[\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\right]_p. \tag{2.46}$$

Théorème 2.2. *En géométrie axisymétrique, la quantité* $\boldsymbol{\mu}^{n+1/2}$ *est strictement conservée, uniquement dans la direction* $\boldsymbol{e}_z$*. Autrement dit, on a*

$$\left(\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2}\right)\cdot \boldsymbol{e}_z = 0. \tag{2.47}$$

En géométrie plane, elle est conservée dans les deux directions.

Démonstration. On somme sur les nœuds p l'équation de quantité de mouvement (2.27b)

$$\begin{aligned}\sum_p \left[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right)\right]_p &= \sum_p \sum_{c\in C(p)} \left[(p_c^n + q_c^n)\,\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n+1/2}}{2},\\ &= \sum_c \left[(p_c^n + q_c^n)\sum_{p\in P(c)} \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n+1/2}}{2}.\end{aligned}$$

On voit que la conservation de la quantité de mouvement dépend des termes $\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ et $\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}$. Les propositions 3.2 du chapitre 3 et 4.4 du chapitre 4 permettent de conclure la preuve : la quantité de mouvement n'est conservée que dans la direction $\boldsymbol{e}_z$ en géométrie axisymétrique et dans les deux directions en géométrie plane. □

On rappelle qu'il est normal d'obtenir seulement la conservation de la composante axiale de la quantité de mouvement $\boldsymbol{\mu}$ en géométrie axisymétrique [5].

2.4.7.4 Conservation de l'énergie totale

Définition 2.9. *L'énergie totale est définie au demi-pas de temps* $t^{n+1/2}$ *de la façon suivante :*

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{n+1/2} &= \mathcal{K}^{n+1/2} + \mathcal{I}^{n+1/2}\\ &= \tfrac{1}{2}\,{}^t\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} + \sum_c \mathcal{I}_c^{n+1/2}\\ &= \tfrac{1}{2}\,{}^t\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}\,\tilde{M}\,\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} + \sum_c m_c\, e_c^{n+1/2}.\end{aligned} \tag{2.48}$$

Théorème 2.3. *Hors conditions aux limites, l'énergie totale (2.48) est conservée, autrement dit*

$$\mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2} = \left(\mathcal{K}^{n+1/2} - \mathcal{K}^{n-1/2}\right) + \left(\mathcal{I}^{n+1/2} - \mathcal{I}^{n-1/2}\right) = 0. \tag{2.49}$$

Démonstration. On met de côté les conditions aux limites qui seront détaillées dans l'annexe B. On reprend l'équation (2.41)

$$\begin{aligned} m_c\left(e_c^{n+1/2} - e_c^n\right) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ & -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\ & + \tfrac{1}{4}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\left(\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2}\right) \\ & - \tfrac{1}{2}\left[(q_c^n - q_c^{n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n - \boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\Big\}. \end{aligned}$$

et l'équation (2.42) dans laquelle on effectue le changement $n \to n+1$

$$m_c\left(e_c^n - e_c^{n-1/2}\right) = \sum_{p\in P(c)} -\tfrac{1}{2}\left[\left(p_c^n + q_c^{n-1/2}\right)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}.$$

On en déduit directement l'équation d'évolution pour l'énergie interne globale entre les instants $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$

$$\begin{aligned} & m_c\left(e_c^{n+1/2} - e_c^{n-1/2}\right) \\ & \quad = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ -\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2}\Big\}. \end{aligned} \tag{2.50}$$

Après avoir sommé l'équation (2.50) sur toutes les mailles c, et en comparant avec l'énergie cinétique (2.30), on retrouve bien que les membres de droite de ces deux équations sont exactement opposés. La conservation de l'énergie totale $\mathcal{E}^{n+1/2}$ est donc démontrée. □

2.4.7.5 Cohérence thermodynamique

La matrice de masse étant constante, le résultat est identique à celui obtenu pour le schéma CSTS dans [53]. Il est également formulé grâce à la discrétisation de la formule de Gibbs (1.5).

Théorème 2.4. *Le schéma est cohérent thermodynamiquement à l'ordre 2 pour chaque matériau φ. Les écoulements isentropiques sont capturés à l'ordre 2, c'est-à-dire que l'on a :*

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} = 0, \tag{2.51}$$

en l'absence de termes dissipatifs. Le second principe de la thermodynamique est également

respecté à l'ordre du schéma, soit

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \geq 0. \tag{2.52}$$

Démonstration. Le raisonnement est identique à l'étude de la production d'entropie discrète effectuée dans [53]. La démonstration de la cohérence thermodynamique est également détaillée pour le second schéma de ce chapitre en annexe A section A.2. Il suffit de reprendre le raisonnement en supprimant les termes supplémentaires dus aux masses variables. □

L'erreur spatiale en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ est négligée dans le théorème 2.4 mais elle est évidemment présente. De plus, la production d'entropie est formulée à partir de la discrétisation de la formule de Gibbs (1.5) $de = -p\,dv + T\,ds$. Elle ne prend donc pas en compte les erreurs possibles lors de la discrétisation du travail de la pression « $p\,dv$ ». Toutes ces erreurs interviennent si on considère la fonction entropie $s(v\,,e)$ et non plus sa variation déduite de la formule de Gibbs. Dans ce cas, le théorème 2.4 devient

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^2\,,\Delta t^3) = 0, \quad \text{et} \quad s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^2\,,\Delta t^3) \geq 0,$$

pour chaque matériau φ.

2.5 Schéma CSTS à masses nodales variables

La matrice de masse non diagonale du schéma précédent couple tous les nœuds lors du passage dans la quantité de mouvement : remarque 2.2. Ceci implique qu'un système linéaire, dont la taille correspond au nombre du nœuds du maillage, est à résoudre. On propose donc ici un schéma à masses nodales diagonales mais variables [141] moins coûteux à résoudre. Ce schéma est désigné dans la suite par VNM.

2.5.1 Intégrale d'action discrète

On considère à nouveau ici un principe de moindre action dans lequel on introduit la définition suivante pour l'énergie cinétique. Cette définition fait intervenir une matrice de masse diagonale mais variable [120].

Définition 2.10. *L'énergie cinétique par nœud est la forme quadratique définie positive suivante :*

$$\mathcal{K}^{n+1/2} = \sum_p \mathcal{K}_p^{n+1/2}, \text{ avec } \mathcal{K}_p^{n+1/2} = \tfrac{1}{2} m_p^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\right)^2, \tag{2.53}$$

où la masse nodale est définie par :

$$m_p^{n+1/2} = m_p\left[\left\{\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}\right\}\right] = \sum_{c\in C(p)} m_{cp}^{n+1/2}, \tag{2.54a}$$

$$m_{cp}^{n+1/2} = m_{cp}\left[\left\{\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}\right\}\right] = \frac{V_{cp}^{n+1/2}}{V_c^{n+1/2}}\, m_c. \tag{2.54b}$$

La définition de la masse nodale m_p utilisée dans cette thèse est un choix parmi de nombreux autres. Elle est fondée sur la notion de maille duale formée par les volumes de contrôle, notés V_{cp}, associés à une maille c et un nœud $p \in P(c)$. Concernant ces volumes de contrôle, un exemple est donné dans la figure 2.2 où les volumes de contrôle sont définis par les milieux des arêtes et par les centres de masse $\boldsymbol{x}_{c_i}$. La définition (2.54a)-(2.54b) est utilisée dans les techniques de projection de quantité de mouvement dans les approches ALE de type « Lagrange + Projection ». Elle introduit aussi la notion de masse de coin m_{cp}. Ces masses de coin correspondent simplement à une portion de la masse primale m_c, qui est distribuée entre les différents nœuds $p \in P(c)$ de la maille c. Bien qu'en théorie le volume V_{cp} peut être choisi de manière arbitraire, il faut en pratique apporter un soin particulier à sa définition. En particulier, un volume de contrôle V_{cp} inadapté peut impliquer des pertes de symétries, des distorsions importantes du maillage ou la perte de propriétés importantes telles que l'invariance affine (conservation de la quantité de mouvement et du moment cinétique). La définition du volume de contrôle V_{cp}—et donc de la maille duale—utilisée dans cette thèse est présentée dans le chapitre 3.

On note que la définition 2.10 introduit une masse nodale m_p au temps $t^{n+1/2}$ calculée par la méthode du point milieu donc nécessitant la géométrie $\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$. La méthode des trapèzes, également d'ordre 2, peut également être utilisée

$$m_p^{n+1/2} = m_p\left[\left\{\boldsymbol{x}_p^{n}\right\}\,,\,\left\{\boldsymbol{x}_p^{n+1}\right\}\right] = \tfrac{1}{2}\left(m_p^n + m_p^{n+1}\right). \tag{2.55}$$

Elle présente l'avantage de ne pas avoir à calculer une géométrie au temps $t^{n+1/2}$ ce qui est plus en accord avec le principe de moindre action. En effet, l'intégrale d'action discrète (2.7) ne considère que la géométrie aux instants entiers. Seules les vitesses sont définies aux demi-instants $t^{n+1/2}$. Ce choix est également moins coûteux en temps de calcul. Cependant, la méthode du point milieu est choisie ici, non pas pour le gain de précision d'un facteur 2 par rapport à la méthode des trapèzes, mais en raison de l'extension retenue ici du schéma à la méthodologie ALE indirecte. La raison de ce choix est alors donnée dans l'introduction du chapitre 6.

Remarque 2.7. *L'utilisation d'un maillage dual pour définir les masses nodales implique naturellement des masses variables en temps. Les mailles duales, comme celle représentée en figure 2.2 par exemple, n'ont en effet pas de raison d'être lagrangiennes. Pour aller un*

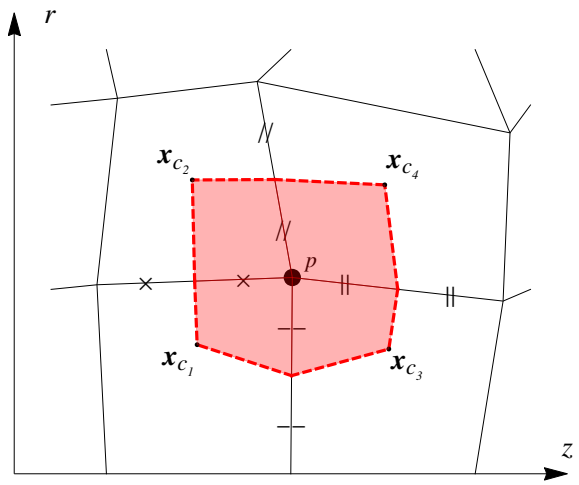


FIGURE 2.2 – Exemple d'une maille duale (zone colorée) en géométrie axisymétrique pour un nœud p interne quelconque partageant quatre mailles quadrangulaires primales désignées par c_i où $i = 1, \cdots, 4$. Le maille duale est définie par les milieux des arêtes et par les centres de masses $\boldsymbol{x}_{c_i}$.

peu plus loin, il n'y a d'ailleurs aucune raison que la maille duale lagrangienne possède une définition géométrique comme le suggère la figure 2.2.

Remarque 2.8. *La définition de la masse nodale m_p et des masses de coin m_{cp} au demi-instant $t^{n+1/2}$ a une importance fondamentale pour l'obtention d'un schéma cohérent thermodynamiquement à l'ordre 2. Ce sera discuté dans la section 2.5.7.5.*

L'intégrale d'action (2.7) devient alors

$$\mathcal{A}\big[\{\boldsymbol{x}_p^n\},\{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\}\big] = \sum_n \Big\{ \sum_p \tfrac{1}{2} m_p^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\right)^2 \Delta t^{n+1/2} - \sum_{c,\varphi} m_c^\varphi \, e^\varphi[v_c^{\varphi,n}] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \Big\}. \quad (2.56)$$

2.5.2 Équation discrète de quantité de mouvement et modèle de fermeture

On injecte l'expression de l'intégrale d'action (2.56) dans l'équation d'Euler-Lagrange (2.12) pour obtenir l'équation de quantité de mouvement non dissipative :

$$m_p^{n-1/2}\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} - m_p^{n+1/2}\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \sum_{c\in C(p)} \sum_{\varphi} p_c^{\varphi,n} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2} = 0 \,.$$

La dérivation est proche de celle effectuée pour le schéma à masses nodales constantes non diagonales en section 2.4. On note l'apparition de termes supplémentaires de flux de quantité de mouvement venant de la dérivation de l'intégrale d'action par rapport à la position $\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \boldsymbol{x}_p^n}$ dans l'équation d'Euler-Lagrange. Ces termes supplémentaires—de la forme $\frac{1}{2}\frac{\partial m}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{u}^2$—sont dus à la dépendance explicite des masses nodales vis-à-vis des positions $\boldsymbol{x}$ [125]. On ajoute finalement les termes dissipatifs sous la forme d'un terme de pseudo-viscosité par maille q_c^φ et de forces d'anti-dérive $\boldsymbol{f}_{cp}^\varphi$ par matériau φ définis dans le chapitre 4 pour obtenir

$$m_p^{n-1/2}\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} - m_p^{n+1/2}\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \sum_{c\in C(p)}\sum_{\varphi}\left[(p_c^{\varphi,n}+q_c^{\varphi,n})\,\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\right]\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}$$
$$+ \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2})^2\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} = 0\ . \quad (2.57)$$

Sous les hypothèses d'iso-déformation et d'absence de mélange, les variations de volumes et les relations de fermeture dans les mailles mixtes restent inchangées par rapport au schéma de la section précédente. On rappelle l'équation (2.22) donnant la variation de volume par matériau φ

$$\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi} = f_c^\varphi\,\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p},$$

ainsi que les relations (2.23) (modèle de fermeture équi-compressibilité) et (2.24) reconstruisant les quantités globales en fonction des valeurs partielles

$$p_c = \sum_\varphi f_c^\varphi\, p_c^\varphi, \quad q_c = \sum_\varphi f_c^\varphi\, q_c^\varphi, \quad \text{et } \boldsymbol{f}_{cp} = \sum_\varphi \boldsymbol{f}_{cp}^\varphi.$$

L'équation de quantité de mouvement (2.57) devient alors

$$m_p^{n-1/2}\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} - m_p^{n+1/2}\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \sum_{c\in C(p)}\left[(p_c^{n}+q_c^{n})\,\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n}\right]\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}$$
$$+ \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2})^2\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} = 0\ . \quad (2.58)$$

Remarque 2.9. *On remarque que l'équation (2.58) est implicite vis à vis de la vitesse $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$. Ceci est dû à la présence des termes dissipatifs centrés au temps t^n, à une partie du terme de flux de quantité de mouvement*

$$\sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2})^2\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2},$$

mais aussi à la présence de la masse $m_p^{n+1/2}$.

2.5.3 Prédicteur/correcteur pour l'équation de quantité de mouvement

Pour les mêmes raisons que celles évoquées pour le schéma à masses nodales constantes et non diagonales, on a besoin ici d'utiliser un processus de prédiction/correction sur l'équation de quantité de mouvement implicite (2.58). On note que le terme supplémentaire de flux de quantité de mouvement est également implicite et bénéficie donc du processus mis en place dans cette sous-section 2.5.3. Le caractère implicite de la masse nodale $m_p^{n+1/2}$, dépendante de la vitesse $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ (règle du point milieu), complexifie le processus de prédiction/correction et explique l'introduction des étapes 1 et 3.

1. Une prédiction $m_p^{*n+1/2}$ de la masse $m_p^{n+1/2}$ à l'ordre deux en temps

$$m_p^{*n+1/2} = m_p^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \frac{\partial m_p}{\partial \boldsymbol{x}_q}\Big|^{n-1/2} \cdot \boldsymbol{u}_q^{n-1/2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \tag{2.59a}$$

$$= m_p^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \tag{2.59b}$$

2. Une prédiction $\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2}$ utilisant la vitesse décalée $\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}$

$$\begin{aligned} &m_p^{*n+1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2} - m_p^{n-1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \\ &\qquad = \sum_{c\in C(p)} \left[(p_c^n + q_c^{n-1/2}) \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2} \right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\ &\quad + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \Delta t^{n+1/2} \,, \end{aligned} \tag{2.60}$$

où $q_c^{n-1/2} = \underline{\mathcal{Q}}\big[\{\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\}\big]$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2} = \mathcal{F}\big[\{\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\}\big]$.

Remarque 2.10. *Dans l'équation (2.60), le terme de flux de quantité de mouvement n'est volontairement pas factorisé afin que les changements effectués par rapport à l'équation implicite (2.58) apparaissent plus clairement. L'utilisation de la prédiction $m_p^{*n+1/2}$ à l'ordre deux en temps de la masse $m_p^{n+1/2}$ est indispensable pour que*

$$\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2} = \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \tag{2.61}$$

3. Une prédiction $\{\boldsymbol{x}_p^{*n+1/2}\}$ de la géométrie au demi-pas de temps et le calcul des masses nodales $m_p^{**n+1/2}$ sur cette géométrie

$$\boldsymbol{x}_p^{*n+1/2} = \boldsymbol{x}_p^n + \boldsymbol{u}_p^{*n+1/2} \frac{\Delta t^{n+1/2}}{2}, \tag{2.62}$$

$$m_p^{**n+1/2} = m_p\left[\{\boldsymbol{x}_p^{*n+1/2}\}\right]. \tag{2.63}$$

Remarque 2.11. *Grâce à la relation (2.61), on sait que la position* $\boldsymbol{x}_p^{*n+1/2}$ *et la masse* $m_p^{**n+1/2}$ *sont des approximations de la position réelle et de la masse nodale réelle à l'ordre du schéma, soit*

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_p^{*n+1/2} &= \boldsymbol{x}_p^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3)\\ m_p^{**n+1/2} &= m_p^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3),\end{aligned}$$

où $\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$ *et* $m_p^{n+1/2}$ *sont calculées avec la solution exacte de l'équation implicite (2.58).*

4. Une correction $\boldsymbol{u}_p^{**n+1/2}$ utilisant la vitesse $\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2}$ et la masse $m_p^{**n+1/2}$ prédites

$$\begin{aligned}m_p^{**n+1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{**n+1/2} - m_p^{n-1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} &= \sum_{c\in C(p)}\Big[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\Big]\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}\\ &+ \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{**n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\,, \quad (2.64)\end{aligned}$$

où $q_c^n = \underline{\mathcal{Q}}\big[\big\{\frac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\big\}\big]$ et $\boldsymbol{f}_{cp}^n = \mathcal{F}\big[\big\{\frac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\big\}\big]$.

Considérant la remarque 2.11, il est inutile de recalculer la masse nodale sur la géométrie au demi-pas de temps définie avec la vitesse $\boldsymbol{u}_p^{**n+1/2}$, issue du processus de prédiction/correction. En effet, elle est de toute façon, elle aussi, une approximation de la solution de (2.58) à l'ordre du schéma. La masse $m_p^{**n+1/2}$ correspond alors à celle utilisée dans la quantité de mouvement ou l'énergie cinétique du schéma construit ici.

Notation 2.2. *Pour simplifier les relations, la vitesse* $\boldsymbol{u}_p^{**n+1/2}$ *et la masse nodale* $m_p^{**n+1/2}$ *seront dorénavant notées* $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ *et* $m_p^{n+1/2}$.

L'équation (2.64) devient

$$\begin{aligned}m_p^{n+1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} &= \sum_{c\in C(p)}\Big[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\Big]\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}\\ &+ \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\,. \quad (2.65)\end{aligned}$$

Le coût de calcul du processus de prédiction/correction reste acceptable même si deux passages sont requis dans l'équation de quantité de mouvement. Ce coût supplémentaire est amorti, voir compensé, grâce au gain en robustesse.

2.5.4 Équation discrète d'énergie cinétique

L'équation d'énergie cinétique est obtenue en multipliant l'équation (2.65) par la vitesse centrée $\boldsymbol{u}_p^n = \frac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})$:

$$\begin{aligned}
&\tfrac{1}{2}\left(m_p^{n+1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\cdot\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\\
&\qquad = \sum_{c\in C(p)}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}\\
&\qquad\qquad + \sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad\qquad\qquad + \sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\Delta t^{n+1/2}.
\end{aligned}$$

La variation d'énergie cinétique du schéma vérifie finalement l'égalité nodale suivante :

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_p^{n+1/2} - \mathcal{K}_p^{n-1/2} &= \tfrac{1}{2}m_p^{n+1/2}(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2})^2 - \tfrac{1}{2}m_p^{n-1/2}(\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})^2\\
&= \sum_{c\in C(p)}\left[(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}\\
&\quad + \sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\Delta t^{n-1/2}\\
&\quad + \sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\Delta t^{n+1/2}\\
&\quad - \tfrac{1}{2}(m_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}. \qquad (2.66)
\end{aligned}$$

2.5.5 Équation discrète d'énergie interne

On reprend l'argument de [62] pour assurer la conservation de l'énergie totale. Le membre de droite de l'équation en énergie interne doit être exactement opposé à celui de l'équation (2.66) à un terme de flux près. Le raisonnement est identique à celui présenté pour le schéma à masses nodales constantes et non diagonales et dans [53]. On détaille cependant les étapes de construction de l'énergie interne contenant des termes supplémentaires provenant de la définition des masses nodales. On part de la relation (2.31)

$$\underbrace{\sum_c m_c(e_c^{n+1} - e_c^n)}_{\text{énergie interne}} = \underbrace{-\sum_p\left(\mathcal{K}_p^{n+1/2} - \mathcal{K}_p^{n-1/2}\right)}_{\text{énergie cinétique}} + \underbrace{\sum_c\sum_{p\in P(c)}\phi_p^{n+1/2}}_{\text{terme de flux}}.$$

En injectant la relation (2.66) dans l'équation (2.31), on trouve

$$\sum_c m_c(e_c^{n+1}-e_c^n) = \underbrace{\sum_p \tfrac{1}{2}(m_p^{n+1/2}-m_p^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}_{\text{Terme A}}$$
$$\underbrace{-\sum_p\sum_{c\in C(p)}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n+\boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}}_{\text{Terme B}}$$
$$\underbrace{-\sum_p\sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\Delta t^{n+1/2}}_{\text{Terme C}}$$
$$\underbrace{-\sum_p\sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\Delta t^{n-1/2}}_{\text{Terme C'}}+\underbrace{\sum_c\sum_{p\in P(c)}\phi_{cp}^{n+1/2}}_{\text{Terme de flux}}.$$

On réarrange les termes A, C et C' en utilisant la définition de la masse nodale (2.54a) et en échangeant les sommes sur p,q et c pour obtenir :

$$\begin{aligned}\text{A}&=\sum_p\sum_{c\in P(c)}\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\\&=\sum_c\sum_{p\in C(p)}\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2},\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\text{C}&=-\sum_p\sum_{q\in Q(p)}\sum_{c\in C(q)\cap C(p)}\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\Delta t^{n+1/2}\\&=-\sum_c\sum_{p\in P(c)}\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\Delta t^{n+1/2}.\end{aligned}$$

Le terme C' se traite exactement de la même manière que le terme C. Le terme B a déjà été réarrangé dans la sous-section 2.4.5 :

$$\begin{aligned}\text{B}=\sum_c\sum_{p\in P(c)}\Big\{&-\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n+\boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\\&-\tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n+\boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\\&+\tfrac{1}{4}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n+\boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2})\Big\}.\end{aligned}$$

Après toutes ces modifications sur les termes A, B, C et C', et en se ramenant à une maille locale, on obtient l'équation d'évolution d'énergie interne suivante :

$$
\begin{aligned}
m_c(e_c^{n+1}-e_c^n) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ & \tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \\
& - \tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\
& - \tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2} \\
& + \tfrac{1}{4}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2}) \\
& - \sum_{q\in P(c)}\left[\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\Delta t^{n+1/2}\right] \\
& - \sum_{q\in P(c)}\left[\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\Delta t^{n-1/2}\right] + \phi_{cp}^{n+1/2}\Big\}. \quad (2.67)
\end{aligned}
$$

En négligeant le travail des termes dus aux masses variables, le raisonnement exposé pour le schéma à masses nodales constantes et non diagonales permet de construire le flux en temps $\phi_{cp}^{n+1/2}$. Il est identique à celui présenté dans la définition 2.7

$$
\begin{aligned}
\phi_{cp}^{n+1/2} = & -\tfrac{1}{2}\left[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1}\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2} \\
& + \tfrac{1}{2}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}.
\end{aligned}
$$

Au final, l'équation d'évolution de l'énergie interne s'écrit :

$$
\begin{aligned}
& m_c(e_c^{n+1}-e_c^n) \\
& = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ \underbrace{-\tfrac{1}{2}\left[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{n+1} + (p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}}_{\text{Terme A}} \\
& \quad + \tfrac{1}{4}\left[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2}) \\
& \quad \underbrace{- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2}}_{\text{Terme C}} \\
& \quad \underbrace{- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2}}_{\text{Terme C'}} \\
& \quad \underbrace{+\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}_{\text{Terme A}}\Big\}. \quad (2.68)
\end{aligned}
$$

En plus des remarques faites lors de la première construction de l'énergie interne, on peut ajouter que les termes A, C, C' correspondent également à des résidus d'énergie cinétique (2.66) et assurent donc la conservation de l'énergie totale. Ces termes viennent de l'utilisation des masses variables. On modifie finalement la relation (2.68), afin de la rendre explicite :

$$
\begin{aligned}
&m_c\left(e_c^{n+1}-e_c^n\right)\\
&=\sum_{p\in P(c)}\Big\{-\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1}+\boldsymbol{f}_{cp}^{n+1/2}+(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}+\boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\\
&\qquad+\tfrac{1}{4}\Big[(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}+\boldsymbol{f}_{cp}^{n}\Big]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2})\\
&\qquad\quad-\tfrac{1}{2}\Big[(q_c^n-q_c^{n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}+\boldsymbol{f}_{cp}^{n}-\boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2}\Big]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad\quad-\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad\quad-\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2}\\
&\qquad\qquad+\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\}.
\end{aligned}
\tag{2.69}
$$

2.5.6 Construction de l'énergie interne décalée

Pour étudier la conservation de l'énergie totale du schéma, on reprend son expression (2.38) au demi-instant $t^{n+1/2}$. La définition de l'énergie interne décalée $e_c^{n+1/2}$ est toujours implicitement définie dans la relation (2.38) à partir de e_c^{n+1}. Le flux en temps (2.36) étant identique pour les deux schémas, cette définition reste inchangée ici. L'égalité $m_c(e_c^{n+1/2}-e_c^n)=m_c(e_c^{n+1}-e_c^n)-m_c(e_c^{n+1}-e_c^{n+1/2})$ permet d'obtenir l'équation d'évolution pour l'énergie interne entre t^n et $t^{n+1/2}$. On écrit ici directement les relations pour les quantités partielles, les équations pour les quantités globales étant identiques : il suffit de supprimer l'indice matériau φ. On obtient

$$
\begin{aligned}
&m_c^\varphi\left(e_c^{\varphi,n+1/2}-e_c^{\varphi,n}\right)=\sum_{p\in P(c)}\Big\{-\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{\varphi,n}+q_c^{\varphi,n})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n}+\boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\Big]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\\
&\qquad+\tfrac{1}{4}\Big[(p_c^{\varphi,n}+q_c^{\varphi,n})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n}+\boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\Big]\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2})\\
&\qquad\quad-\tfrac{1}{2}\Big[(q_c^{\varphi,n}-q_c^{\varphi,n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n}+\boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}-\boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n-1/2}\Big]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad\quad-\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad\quad-\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2}\\
&\qquad\qquad+\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{\varphi,n+1/2}-m_{cp}^{\varphi,n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\}.
\end{aligned}
\tag{2.70}
$$

On note que les termes venant des masses variables, résidus d'énergie cinétique, apparaissent tous lors de cette première évolution de l'énergie interne. Cela correspond en effet au pas de temps en commun avec l'évolution de l'énergie cinétique. La seconde évolution de l'énergie interne partielle, tirée de la relation (2.38), reste inchangée

$$m_c^\varphi \left(e_c^{\varphi,n+1} - e_c^{\varphi,n+1/2}\right) = \sum_{p\in P(c)} -\tfrac{1}{2}\left[\left(p_c^{\varphi,n+1} + q_c^{\varphi,n+1/2}\right)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1} + \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n+1/2}\right]\cdot \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}. \quad (2.71)$$

La première relation (2.70) introduit les masses de coin et les variations de masses par matériau φ.

Définition 2.11. *Les masses de coin partielles m_{cp}^φ et les variations de masse partielles $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^\varphi$ sont respectivement données par*

$$m_{cp}^\varphi = \tfrac{V_{cp}}{V_c}\, m_c^\varphi, \quad (2.72a)$$

$$\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^\varphi = \tfrac{m_c^\varphi}{m_c}\,\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}, \quad (2.72b)$$

conformément à la définition 2.10.

Évidemment, les masses nodales et les variations de masse globales se retrouvent si on somme sur les matériaux

$$m_{cp} = \sum_\varphi m_{cp}^\varphi \text{ et } m_p = \sum_{c\in C(p)} m_{cp}, \quad (2.73)$$

$$\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \sum_\varphi \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^\varphi. \quad (2.74)$$

Couplée avec la relation (2.43) sur la pression par matériau φ

$$p_c^{\varphi,n+1} = \mathrm{EOS}^\varphi\left(\rho_c^{\varphi,n+1}, e_c^{\varphi,n+1}\right),$$

l'équation (2.71) permet la détermination de $e_c^{\varphi,n+1}$ et $p_c^{\varphi,n+1}$. On rappelle que l'énergie interne globale est définie dans la relation de fermeture (2.6)

$$m_c\, e_c = \sum_\varphi m^\varphi e_c^\varphi.$$

2.5.7 Propriétés du schéma

2.5.7.1 Conservation de la masse

La conservation de la masse est assurée à l'échelle d'une maille grâce à l'hypothèse lagrangienne classique : $m_c =$ constante pour toute maille c.

2.5.7.2 Consistance de la quantité de mouvement

Comme pour le schéma à masse non diagonale, le théorème suivant est démontré de manière classique en partant de l'équation (2.58) de quantité de mouvement discrète et non en utilisant le principe de moindre action. On pourrait s'appuyer sur le fait que le schéma est construit par approximation de l'intégrale d'action puis par application du principe de moindre action mais la mesure de masse utilisée dans l'approximation de l'intégrale d'action n'est plus constante en temps, contrairement au cas continu.

Théorème 2.5. *Le schéma est consistant en géométrie axisymétrique et en géométrie plane sous les hypothèses*

$$m_p^n \frac{d\boldsymbol{u}_p}{dt}\Big|^n = \sum_{c\in C(p)} \int_{A_c} \rho \frac{d\boldsymbol{u}}{dt}\Big|^n \psi_p \, r \, dr dz + m_p^n \times \mathcal{O}(\Delta x), \tag{2.75a}$$

$$m_p^{n+1/2} - m_p^n = m_p^n \times \mathcal{O}(\Delta t) \times \mathcal{O}(\Delta x), \tag{2.75b}$$

$$\sum_{q\in Q(p)} \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{u}_q^2 = m_p \times \mathcal{O}(\Delta x + {}^{\Delta r}/_{r}). \tag{2.75c}$$

Les hypothèses (2.75a) *et* (2.75c) *sont exprimées en géométrie axisymétrique. En géométrie plane, le terme en* $\frac{\Delta r}{r}$ *est absent dans l'hypothèse* (2.75c).

Démonstration. On considère la géométrie axisymétrique. La démonstration en géométrie plane ne présente en effet pas de difficulté supplémentaire. Pour démontrer ce théorème, on s'appuie sur l'identitié de consistance (A.1) démontrée pour le schéma à masse non diagonale. Il nous faut donc démontrer que l'on a

$$A_n^\alpha = \sum_{c\in C(p)} \int_{A_c} \rho \frac{du^\alpha}{dt}\Big|^n \psi_p \, r \, dr dz + m_p^n \times \mathcal{O}(\Delta x),$$

où $\alpha = r$ ou z et avec A_n^α défini par

$$A_n^\alpha = \frac{m_p^{n+1/2} u_p^{\alpha,n+1/2} - m_p^{n-1/2} u_p^{\alpha,n-1/2}}{\Delta t^n} - \sum_{q\in Q(p)} \frac{1}{4} \frac{\partial m_q}{\partial x_p^\alpha}\Big|^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2}\right)^2 \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^n} - \sum_{q\in Q(p)} \frac{1}{4} \frac{\partial m_q}{\partial x_p^\alpha}\Big|^{n-1/2} \left(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2}\right)^2 \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^n}.$$

Le terme A_n peut s'écrire

$$A_n^\alpha = m_p^n \frac{du_p^\alpha}{dt}\Big|^n + m_p^n \left(\frac{u_p^{\alpha,n+1/2} - u_p^{\alpha,n-1/2}}{\Delta t^n} - \frac{du_p^\alpha}{dt}\Big|^n \right) + \frac{m_p^{n+1/2} - m_p^n}{\Delta t^n} u_p^{\alpha,n+1/2} - \frac{m_p^{n-1/2} - m_p^n}{\Delta t^n} u_p^{\alpha,n-1/2}$$
$$- \sum_{q \in Q(p)} \frac{1}{4} \frac{\partial m_q}{\partial x_p^\alpha}\Big|^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2}\right)^2 \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^n} - \sum_{q \in Q(p)} \frac{1}{4} \frac{\partial m_q}{\partial x_p^\alpha}\Big|^{n-1/2} \left(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2}\right)^2 \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\Delta t^n}.$$

Dans cette égalité, le deuxième terme est en $m_p^n \times \mathcal{O}(\Delta t^2)$. Les troisième et quatrième termes sont en $m_p^n \times \mathcal{O}(\Delta x)$ grâce à l'hypothèse (2.75b). Enfin, les termes de la deuxième ligne sont en $m_p^n \times \mathcal{O}(\Delta x + {}^{\Delta r}/_{r})$ par hypothèse (2.75c). Il ne reste à la limite que le premier terme $m_p^n \frac{du_p^\alpha}{dt}\big|^n$ qui converge vers $\sum_{c \in C(p)} \int_{A_c} \rho \frac{du^\alpha}{dt}\big|^n \psi_p \, r \, dr dz$ par hypothèse (2.75a). □

Dans l'hypothèse (2.75a) en géométrie axisymétrique, l'intégrale utilise la mesure $dA = dr\,dz$ et le r venant de la variation infinitésimal de volume $dV = 2\,\pi\,r\,dr\,dz$ est considéré dans l'intégrande.

On montre ici que les flux de quantité de mouvement, dus à la variation des masses nodales, sont faibles de façon à obtenir la consistance de la quantité de mouvement. Ces flux sont effectivement faibles dans un écoulement régulier—hypothèse issue des développements de Taylor—et sur maillage régulier—hypothèse faite dans la démonstration. Ils ne sont cependant pas négligeables dans les zones : (i) où l'écoulement n'est pas régulier (présence de chocs) ; (ii) où le maillage est distordu ; et (iii) près de l'axe $r = 0$ en géométrie axisymétrique.

Les hypothèses (2.75a) à (2.75c) sont vérifiées dans la section 3.6 du chapitre suivant pour la définition particulière de la masse nodale utilisée dans cette thèse.

2.5.7.3 Conservation de la quantité de mouvement

Définition 2.12. *La quantité de mouvement, définie par l'énergie cinétique (2.66) en $t^{n+1/2}$, est*

$$\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} = \sum_p \boldsymbol{\mu}_p^{n+1/2} = \sum_p m_p^{n+1/2} \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}. \tag{2.76}$$

On obtient le résultat suivant pour la conservation de la quantité de mouvement discrète du schéma.

Théorème 2.6. *En géométrie axisymétrique, la quantité $\boldsymbol{\mu}^{n+1/2}$ est strictement conservée uniquement dans la direction $\boldsymbol{e}_z$. Autrement dit, on a*

$$\left(\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2}\right) \cdot \boldsymbol{e}_z = 0. \tag{2.77}$$

En géométrie plane, la quantité de mouvement est conservée dans les deux directions.

Démonstration. En partant de l'équation (2.64) et en effectuant des réarrangements des sommes sur les nœuds p, q et les mailles c, on obtient

$$\sum_p \left(m_p^{n+1/2}\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right) = \sum_c \left[(p_c^n + q_c^n)\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2}$$
$$+ \sum_c \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \left[\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\right] \Delta t^{n-1/2}$$
$$+ \sum_c \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \left[\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\right] \Delta t^{n+1/2}. \quad (2.78)$$

Les termes $\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$, $\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}$ et $\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ aux temps $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$ déterminent donc la conservation de la quantité de mouvement pour VNM. Les résultats des propositions 3.2 (chapitre 3), 4.4 (chapitre 4) et 3.4 (chapitre 3) permettent de conclure que la quantité de mouvement n'est conservée que dans la direction $\boldsymbol{e}_z$ en géométrie axisymétrique et dans les deux directions en géométrie plane. □

Remarque 2.12. *Bien que la conclusion soit identique pour les deux schémas construits dans ce chapitre, on remarque tout de même, en considérant les définitions 2.12 et 2.8, qu'ils n'utilisent pas la même quantité de mouvement totale du système.*

2.5.7.4 Conservation de l'énergie totale

Définition 2.13. *L'énergie totale est définie au demi-pas de temps $t^{n+1/2}$ de la façon suivante :*

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{n+1/2} &= \mathcal{K}^{n+1/2} + \mathcal{I}^{n+1/2} \\ &= \sum_p \mathcal{K}_p^{n+1/2} + \sum_c \mathcal{I}_c^{n+1/2} \\ &= \sum_p \tfrac{1}{2} m_p^{n+1/2}(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2})^2 + \sum_c m_c\, e_c^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

On a ensuite le résultat suivant :

Théorème 2.7. *Hors conditions aux limites, l'énergie totale (2.79) est conservée, autrement dit*

$$\mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2} = \left(\mathcal{K}^{n+1/2} - \mathcal{K}^{n-1/2}\right) + \left(\mathcal{I}^{n+1/2} - \mathcal{I}^{n-1/2}\right) = 0. \quad (2.80)$$

Démonstration. Les conditions aux limites sont ici mises de côté. La manière dont elles sont appliquées est détaillée dans l'annexe B. L'évolution lagrangienne de l'énergie interne de $t^{n-1/2}$ à $t^{n+1/2}$ est obtenue de la même manière que lors de la démonstration de la

conservation de l'énergie totale pour le premier schéma construit. Il suffit d'ajouter le travail des termes venant des masses variables

$$
\begin{aligned}
& m_c \left(e_c^{n+1/2} - e_c^{n-1/2}\right) \\
&\quad = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ - \Big[(p_c^n + q_c^n) \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n \Big] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\
&\qquad - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n+1/2} \\
&\qquad - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n-1/2} \\
&\qquad\qquad + \tfrac{1}{2} (m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \Big\}. \qquad (2.81)
\end{aligned}
$$

On somme ensuite (2.81) sur toutes les mailles c du domaine. On compare finalement l'égalité obtenue avec l'équation d'énergie cinétique (2.66) après avoir sommé sur tous les nœuds p :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}^{n+1/2} - \mathcal{K}^{n-1/2} = \sum_p \Big\{ & \sum_{c\in C(p)} \Big[(p_c^n + q_c^n) \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n \Big] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\
& + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \Delta t^{n-1/2} \\
& + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \Delta t^{n+1/2} \\
& - \tfrac{1}{2} (m_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \Big\}.
\end{aligned}
$$

On obtient effectivement que les membres de droite des énergies cinétique et interne sont exactement opposés. Ceci prouve la conservation stricte de l'énergie totale $\mathcal{E}^{n+1/2}$. □

2.5.7.5 Cohérence thermodynamique

Théorème 2.8. *Le schéma est cohérent thermodynamiquement à l'ordre 2 en temps pour chaque matériau φ. Les écoulements isentropiques sont capturés à l'ordre 2, c'est-à-dire que l'on a*

$$
s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) = 0, \qquad (2.82)
$$

en l'absence de termes dissipatifs. En présence de termes dissipatifs, le second principe est également respecté à l'ordre 2, soit

$$
s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \geq 0. \qquad (2.83)
$$

Démonstration. Voir annexe A section A.2. □

Il est nécessaire de préciser ici l'importance de définir les masses nodales au demi-instant $t^{n+1/2}$: voir la remarque 2.8. Un choix plus simple consiste à considérer la masse nodale sur la géométrie au temps entier t^n dans la définition 2.10. En particulier, cela simplifie fortement le processus de prédiction/correction. La production d'entropie (A.5) devient alors

$$\begin{aligned} m_c^{\varphi} T_c^{\varphi,n} \left(s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2}\right) \\ = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ - \Big[q_c^{\varphi,n} \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} + \boldsymbol{f}_{cp}^n \Big] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\ - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{*n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n+1/2} \\ + \tfrac{1}{2} (m_{cp}^{\varphi,n} - m_{cp}^{\varphi,n-1})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \Big\}. \end{aligned}$$

Ceci implique la perte d'un ordre sur la cohérence thermodynamique qui n'est alors vérifiée qu'à l'ordre 1. En effet, le terme dû aux masses variables dans l'équation précédente n'est que d'ordre 2 en temps

$$\begin{aligned} \sum_{p\in P(c)} \Big\{ - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4} (\boldsymbol{u}_q^{*n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n+1/2} \\ + \tfrac{1}{2} (m_{cp}^{\varphi,n} - m_{cp}^{\varphi,n-1})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \Big\} = \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Enfin, on rappelle que les erreurs spatiales en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ sont négligées pour plus de lisibilité alors qu'elles sont bien sûr présentes. En particulier, si on considère la fonction entropie $s(v\,, e)$ et non plus sa variation déduite de la formule de Gibbs, les erreurs sur l'approximation du travail de la pression « $p\,dv$ » apparaissent. Dans ce cas, le théorème 2.8 devient

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^2\,, \Delta t^3) = 0, \quad \text{et} \quad s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^2\,, \Delta t^3) \geq 0,$$

pour chaque matériau φ.

2.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre présente deux choix pour la matrice de masse utilisée dans la définition de l'énergie cinétique : (i) une matrice de masse constante et non diagonale de type éléments finis [68] ; et (ii) une matrice de masse diagonale mais variable [120]. Ces deux choix constituent un enrichissement vis-à-vis de la matrice de masse classique diagonale et

constante de type « Wilkins » [47], formée des masses nodales $m_p = \sum_{c \in C(p)} \frac{m_c}{|P(c)|}$. Les deux schémas numériques ainsi construits sont précis à l'ordre deux, conservatifs et cohérents thermodynamiquement. En particulier, le principe de moindre action permet de prendre en compte les variations de masses nodales grâce à des termes supplémentaires dans l'équation de quantité de mouvement. Ces termes supplémentaires—correspondant à des flux de quantité de mouvement—prennent la forme $\frac{1}{2}\frac{\partial m}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{u}^2$ lorsque les masses dépendent explicitement des positions $\boldsymbol{x}$. Ils sont bien connus dans la littérature concernant les systèmes continus à masses variables (voir [125] par exemple) mais sont nouveaux dans un contexte discret. On démontre qu'ils sont également nécessaires pour la cohérence thermodynamique.

Les deux schémas numériques construits ici sont comparés dans le chapitre 5 sur différents cas tests usuels de la littérature. Le schéma VNM, donnant de meilleurs résultats, a été choisi pour l'extension à l'ALE.

Chapitre 3

Géométrie

Ce chapitre est consacré au calcul des quantités géométriques intervenant dans les schémas construits précédemment. Les propriétés de ces quantités sont également décrites et démontrées. Les expressions obtenues sont implémentées et utilisées pour tous les cas numériques présentés dans cette thèse. Seuls les calculs en géométrie axisymétrique sont menés. En effet, les quantités en géométrie plane sont plus simples à déterminer et sont plus souvent présentées (voir [47, 93] par exemple). Le calcul de la matrice de masse non diagonale sur la configuration de référence, plus classique et plus simple même en géométrie axisymétrique, est également laissé de côté. Cela permet d'alléger le chapitre sachant que le schéma à masses nodales variables et diagonales est choisi pour l'extension à l'ALE. La dernière partie de ce chapitre est dédiée à l'étude des dépendances radiales des quantités géométriques en géométrie axisymétrique. Ce calcul permet de justifier le choix des masses de coin.

3.1 Généralités

On commence par rappeler tout d'abord que toutes les quantités géométriques considérées dans ce chapitre sont rattachées à une maille c et sont uniquement fonction des positions $\boldsymbol{x}_p$ des nœuds p de la maille c. C'est pourquoi toutes les formules données dépendent uniquement des positions des nœuds dans la maille. Toutes les quantités sont déterminées en géométrie axisymétrique et sont « volume-weighted ». Autrement dit, elles sont intégrées avec le volume infinitésimal $dV = 2\,\pi\,r\,dr\,dz$ et on se place dans le repère $(z\,,r)$ tout au long du chapitre. On rappelle que la coordonnée suivant θ est supprimée car toutes les quantités sont indépendantes de θ. On souhaite ici calculer

- le volume V_c engendré par la rotation de la surface A_c autour de l'axe (Oz),
- le volume de contrôle (ou volume de coin) V_{cp},
- leurs dérivées par rapport aux positions $\boldsymbol{x}_p$, $\forall c$, $\forall p \in P(c)$.

D'après la définition 2.10, les masses de coin axisymétriques—et donc les dérivées $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ intervenant dans la section 2.5 du chapitre précédent—sont construites à partir des volumes

V_{cp} et V_c. Toujours en se référant à cette définition, les quantités géométriques définies aux nœuds sont déterminées à partir des quantités aux coins

$$m_p = \sum_{c \in C(p)} m_{cp}, \forall p,$$
$$\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \sum_{c \in C(q)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}, \ \forall q, \forall p \in Q(q).$$

Par définition des masses de coin m_{cp}, seuls les calculs de V_c et V_{cp} ainsi que de leurs dérivées par rapport aux positions des nœuds sont nécessaires en pratique. Les formules pour les masses de coin m_{cp} ainsi que pour les vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ sont directement exprimées en fonction des positions des nœuds puisque ces quantités interviennent directement dans nos schémas. La matrice de masse non diagonale sur la configuration de référence intervenant dans la section 2.4 est plus classique et plus simple à calculer, même en géométrie axisymétrique. De plus, le schéma à masses nodales constantes et non diagonales est également abandonné après les résultats du chapitre 5. Son calcul n'est alors pas détaillé ici.

Les simulations présentées dans la thèse sont effectuées sur des maillages formés de quadrangles. Pour cette raison mais également par souci de simplicité, les calculs de ce chapitre ne sont détaillés que dans le cas de mailles quadrangulaires. On rappelle que les schémas construits dans le chapitre 2 peuvent tout de même s'appliquer sur tout type de mailles (voir la section 2.1).

Tous les calculs géométriques se résument à l'évaluation d'intégrales sur une maille c. On réécrit ces intégrales sur un élément de référence, noté $\hat{c}$, puis on les détermine de manière exacte avec l'outil Mathematica [142] en fonction de la position $\boldsymbol{x}_p$ des nœuds p de la maille c. Tout au long du chapitre, la numérotation locale 00, 01, 11 et 10 est utilisée pour les différents nœuds d'une même maille c quadrangulaire. Une fois que le nœud 00 est choisi, les nœuds 01, 11 puis 10 sont affectés dans l'ordre trigonométrique. Le nœud 00 n'est pas nécessairement choisi arbitrairement dans la maille et son affectation est précisée dans chaque section. Le chapitre s'organise de la manière suivante : pour chaque quantité géométrique, (i) on donne les expressions explicites obtenues avec Mathematica lorsqu'elles sont suffisamment simples, (ii) on exprime leurs éventuelles propriétés et (iii) on procède à une vérification des formules obtenues. Les propriétés présentées dans ce chapitre sont démontrées puis utilisées lors de la vérification. Elles sont également utiles dans les démonstrations des théorèmes 2.6 et 2.2 du chapitre 2 pour la conservation de la quantité de mouvement. On termine par exprimer les dépendances en la coordonnée radiale r des quantités géométriques sur un maillage cartésien et régulier. Ces dépendances nous sont utiles pour réaliser l'étude de la préservation d'éventuelles symétries planes dans les écoulements. Les premiers cas numériques de cette thèse viennent illustrer les résultats

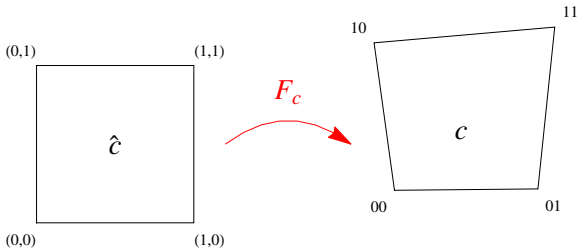


FIGURE 3.1 – Transformation inversible F_c faisant passer de la maille quadrangulaire de référence $\hat{c}$ à une maille quadrangulaire quelconque c.

de cette étude.

3.2 Calcul des volumes axisymétriques V_c

3.2.1 Expressions explicites

On commence par la définition classique du volume axisymétrique V_c pour une maille c.

Définition 3.1. *Le volume axisymétrique V_c s'écrit*

$$V_c = \int_c dV, \tag{3.1}$$

où $dV = 2\,\pi\,r\,dr\,dz$ désigne l'élément infinitésimal de volume après avoir pris en compte l'invariance suivant θ.

Les nœuds d'une maille c quadrangulaire quelconque sont désignés, dans le sens trigonométrique, par 00, 01, 11 et 10. Dans cette section, le nœud 00 est choisi arbitrairement. On définit également les coordonnées symétrisées de la maille c.

Définition 3.2. *Les coordonnées symétrisées dans une maille c quadrangulaire sont*

$$\boldsymbol{x}_0 = (z_0\,,r_0) = \tfrac{1}{4}\left(\boldsymbol{x}_{00} + \boldsymbol{x}_{01} + \boldsymbol{x}_{11} + \boldsymbol{x}_{10}\right), \tag{3.2a}$$
$$\boldsymbol{x}_0^d = (z_0^d\,,r_0^d) = \boldsymbol{x}_{11} - \boldsymbol{x}_{00}, \tag{3.2b}$$
$$\boldsymbol{x}_1^d = (z_1^d\,,r_1^d) = \boldsymbol{x}_{10} - \boldsymbol{x}_{01}, \tag{3.2c}$$
$$\boldsymbol{x}_1 = (z_1\,,r_1) = \tfrac{1}{12}\left(\boldsymbol{x}_{00} - \boldsymbol{x}_{10} - \boldsymbol{x}_{01} + \boldsymbol{x}_{11}\right). \tag{3.2d}$$

Il faut faire attention à distinguer $\boldsymbol{x}_0$ du centre de masse en géométrie axisymétrique. La notation « d » fait référence aux deux diagonales de la maille c quadrangulaire. Dans le cas d'une maille quadrangulaire, l'élément de référence $\hat{c}$ est le carré unité. Exprimer l'intégrale (3.1) sur l'élément de référence $\hat{c}$ nécessite de définir la transformation inversible $F_c : \hat{c} \to c$.

Définition 3.3. *Pour une maille c quadrangulaire, la transformation inversible $F_c : \hat{c} \to c$ est*

$$\boldsymbol{x} = F_c(\hat{\boldsymbol{x}}) = (1-\hat{r})(1-\hat{z})\,\boldsymbol{x}_{00} + (1-\hat{r})\,\hat{z}\,\boldsymbol{x}_{01} + \hat{r}\,\hat{z}\,\boldsymbol{x}_{11} + \hat{r}\,(1-\hat{z})\,\boldsymbol{x}_{10}, \tag{3.3}$$

où $\hat{\boldsymbol{x}} = (\hat{z}, \hat{r}) \in [0,1]^2 = \hat{c}$ et $\boldsymbol{x} = (z, r) \in c$.

Le lecteur peut se reporter à la figure 3.1. On a donc les associations suivantes entre les nœuds de $\hat{c}$ et c : (0,0) → 00, (1,0) → 01, (0,1) → 10 et (1,1) → 11. Finalement, la formule de changement de variable permet de calculer le volume V_c

$$V_c = 2\,\pi \int_c r\,dr\,dz = 2\,\pi \int_c f(\boldsymbol{x})\,dr\,dz = 2\,\pi \int_{\hat{c}} (f \circ F_c)(\hat{\boldsymbol{x}})\,|\det \boldsymbol{\nabla} F_c|\,d\hat{r}\,d\hat{z}, \tag{3.4}$$

où $f(\boldsymbol{x}) = r$, $\forall \boldsymbol{x} \in c$. On obtient, après intégration sur le domaine $[0,1]^2 = \hat{c}$ à l'aide de Mathematica

$$V_c = p_1\,p_2 + p_3, \tag{3.5}$$

où les polynômes p_1, p_2 et p_3 sont définis en fonction des coordonnées symétrisées de la maille c par

$$\begin{aligned} p_1 &= r_0 + r_1, \\ p_2 &= \tfrac{1}{2}\left(-z_1^d\,r_0^d + z_0^d\,r_1^d\right), \\ p_3 &= r_1^d\,\left(z_1\,r_0^d - z_0^d\,r_1\right). \end{aligned} \tag{3.6}$$

3.3 Construction des masses de coin m_{cp}

3.3.1 Définitions des volumes de contrôle V_{cp}

On rappelle la définition 2.10 de la masse de coin m_{cp}

$$m_{cp} = \tfrac{V_{cp}}{V_c}\,m_c.$$

Le volume axisymétrique V_c est calculé grâce à la relation (3.5) et il reste donc à déterminer le volume de coin V_{cp} dans la maille c associé au nœud p.

Définition 3.4. *Le volume de contrôle V_{cp} est défini dans cette thèse par*

$$V_{cp} = \tfrac{2}{3}\,V_{cp}^M + \tfrac{1}{3}\,V_{cp}^W. \tag{3.7}$$

Il s'agit de la combinaison linéaire du volume V_{cp}^M délimité par les médianes [48, 62–65], ainsi que d'un volume $V_{cp}^W = V_c\,/\,|P(c)|$ de type « Wilkins » [47, 61] pondérés respectivement par les facteurs $\frac{2}{3}$ et $\frac{1}{3}$.

Le choix fait sur la définition du volume V_{cp} est justifié et discuté dans la section 3.7 lors de l'étude de la dépendance radiale des quantités géométriques. Il faut faire attention à distinguer le volume V_{cp}^{M} considéré ici et le volume de coin défini avec le centre de masse (représenté en figure 2.2 dans le chapitre 2). On note que les deux volumes sont confondus sur maillage cartésien en géométrie plane mais pas en géométrie axisymétrique. En effet, le centre de masse n'est pas confondu avec l'intersection des médianes en géométrie axisymétrique. En particulier, pour une maille carré de côté Δx dont le nœud inférieur gauche est en $(z\,,r) = (0\,,0)$, le centre de masse axisymétrique est positionné en $(\frac{1}{2}\,\Delta x\,,\frac{2}{3}\Delta x)$. On peut considérer que le volume de coin V_{cp}^{M} est défini avec le centre de masse mais il faut alors préciser que ce sont les centres de masse 2D plan et non ceux axisymétriques. À noter également que la partie pondérée par $\frac{1}{3}$ implique bien la masse axisymétrique m_c—correspondant au choix de Kolsky [61]—et non la masse « area-weighted » $\rho_c\,A_c$ comme c'est le cas dans [47]. On remarque enfin que cette définition permet à la masse nodale d'être un invariant affine, servant par exemple à démontrer la conservation de la quantité de mouvement.

Remarque 3.1. *À l'aide de l'équation (3.7) du volume de contrôle V_{cp}, on réécrit la masse pondérée m_{cp}*

$$\begin{aligned} m_{cp} &= \tfrac{V_{cp}}{V_c}\,m_c \\ &= \tfrac{2}{3}\tfrac{V_{cp}^{M}}{V_c}\,m_c + \tfrac{1}{3}\left(\tfrac{m_c}{4}\right) \\ &= \tfrac{2}{3}\,m_{cp}^{M} + \tfrac{1}{3}\,m_{cp}^{W}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

La masse m_{cp} correspond donc simplement à une correction de la masse m_{cp}^{M}. De plus, le terme correctif $\frac{1}{3}\,m_{cp}^{W} = \frac{1}{3}\frac{m_c}{4}$ est constant en temps grâce à l'hypothèse lagrangienne.

3.3.2 Expressions explicites

Dans cette sous-section, on souhaite déterminer la masse de coin m_{cp} pour $p \in P(c)$ quelconque en fonction des positions de la maille c. On désigne par 00 le nœud p puis par 01, 11 et 10 les nœuds suivant p dans le sens trigonométrique. Il est très important de remarquer que le nœud 00 n'est donc plus choisi arbitrairement, comme dans le calcul du volume, mais est bien associé au nœud p de la masse m_{cp}.

Le calcul est réalisé dans Mathematica grâce à la substitution suivante pour le volume V_{cp}^{M} : $10 \to {}^1\!/_2\,(10+00)$, $01 \to {}^1\!/_2\,(01+00)$, $11 \to {}^1\!/_4\,(11+01+10+00)$ dans la formule (3.5). L'expression obtenue après la substitution est ensuite divisée par V_c et multipliée par la masse constante m_c avec l'outil Mathematica ce qui donne, après quelques simplifications, la formule suivante

$$m_{cp}^{\mathrm{M}} = \tfrac{V_{cp}^{\mathrm{M}}}{V_c}\,m_c = \left(\tfrac{1}{4} + \frac{p_2\,q_1 + p_1\,q_2}{p_1\,p_2 + p_3}\right)\,m_c. \tag{3.9}$$

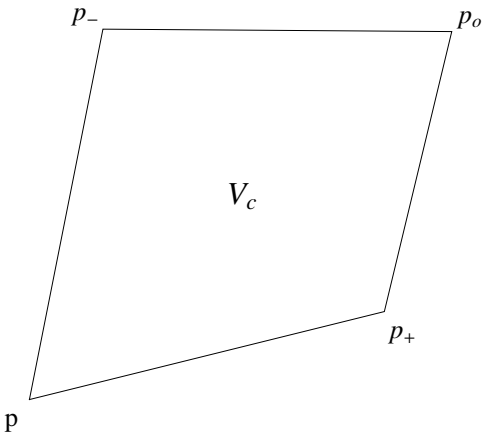


FIGURE 3.2 – Maille quadrangulaire c quelconque et ses quatre nœuds p, p_+, p_o et p_-.

De plus, grâce à la remarque 3.1, on a également

$$m_{cp} = \frac{V_{cp}}{V_c}\, m_c = \left[\frac{2}{3}\left(\frac{1}{4} + \frac{p_2\, q_1 + p_1\, q_2}{p_1\, p_2 + p_3}\right) + \frac{1}{12}\right] m_c. \tag{3.10}$$

Les polynômes p_1, p_2 et p_3 sont donnés par les relations (3.6) et on pose également

$$q_1 = \frac{1}{16}\left(6\, r_1 - r_0^d\right), \tag{3.11a}$$
$$q_2 = -\frac{3}{4}\left(z_1\, r_1^d - z_1^d\, r_1\right). \tag{3.11b}$$

L'équation (3.10) combinée aux relations (3.6)-(3.11a)-(3.11b) définit entièrement la masse de coin m_{cp}, pour $p \in P(c)$ et quelque soit la maille c, en fonction des positions des nœuds 00, 01, 11 et 10 (*via* les coordonnées symétrisées). On rappelle que le nœud 00 n'est plus choisi arbitrairement mais désigne le nœud p associé à m_{cp}. Les formules sont donc valides pour toutes les masses de coin m_{cp} de la maille c et il suffit simplement de changer les affectations. Pour plus de clarté, résumons les affectations à effectuer dans les formules (3.10)-(3.6)-(3.11a)-(3.11b) après avoir remplacé les coordonnées symétrisées par les coordonnées des nœuds grâce à la définition 3.2. Les différentes affectations sont présentées pour la maille en figure 3.2, dont le nœud inférieur gauche est noté p, puis les nœuds suivant sont p_+, p_o et p_- dans l'ordre trigonométrique.

Pour le calcul de m_{cp} : $p \to 00, p_+ \to 01, p_o \to 11, p_- \to 10$

Pour le calcul de m_{cp_+} : $p_+ \to 00, p_o \to 01, p_- \to 11, p \to 10$

Pour le calcul de m_{cp_o} : $p_o \to 00, p_- \to 01, p \to 11, p_+ \to 10$

Pour le calcul de m_{cp_-} : $p_- \to 00, p \to 01, p_+ \to 11, p_o \to 10$

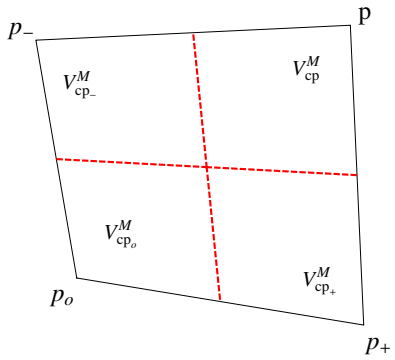


FIGURE 3.3 – Une maille quadrangulaire quelconque et la partition formée par les volumes de contrôle V^{M}_{cp} définis par les médianes (traits pointillés).

3.3.3 Propriétés

Les masses de coin m_{cp} vérifient la propriété suivante, qui est obtenue à la précision machine dans tous les cas.

Proposition 3.1. *Les masses de coin m_{cp} sont reliées à la masse constante m_c de la maille c de la façon suivante*

$$\sum_{p\in P(c)} m_{cp} = m_c, \forall c. \tag{3.12}$$

Démonstration. L'équation (3.12) est obtenue grâce à la relation

$$\sum_{p\in P(c)} V_{cp} = V_c, \tag{3.13}$$

venant de la définition 3.4. En regardant la définition géométrique des volumes V^{M}_{cp} sur la figure 3.3, on voit que l'on forme une partition en quatre de la maille c et la relation (3.13) est donc vraie par construction pour les volumes V^{M}_{cp}. Il suffit finalement d'écrire

$$\begin{aligned}\sum_{p\in P(c)} V_{cp} &= \tfrac{2}{3}\left(\sum_{p\in P(c)} V^{\mathrm{M}}_{cp}\right) + \tfrac{1}{3}\left(\sum_{p\in P(c)} \tfrac{V_c}{4}\right)\\ &= \tfrac{2}{3}V_c + \tfrac{1}{3}V_c, \text{ pour une maille quadrangulaire où } |P(c)| = 4,\\ &= V_c.\end{aligned}$$

□

Le résultat de la proposition 3.1 permet d'obtenir la consistance entre les masses nodales m_p et les masses de mailles m_c dans le sens où

$$\sum_p m_p = \sum_p \sum_{c\in C(p)} m_{cp} = \sum_c \sum_{p\in P(c)} m_{cp} = \sum_c m_c. \tag{3.14}$$

3.4 Construction des vecteurs de volume de coin $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$

3.4.1 Expressions explicites

Comme dans la section 3.2, les nœuds d'une maille c quadrangulaire sont respectivement désignés par 00, 01, 11 et 10 dans le sens trigonométrique où 00 est choisi arbitrairement. D'après l'équation (3.5), on exprime les vecteurs de volume de coin en fonction des dérivées des polynômes p_1, p_2 et p_3 définies par les relations (3.6)

$$\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = p_2 \frac{\partial p_1}{\partial \boldsymbol{x}_p} + p_1 \frac{\partial p_2}{\partial \boldsymbol{x}_p} + \frac{\partial p_3}{\partial \boldsymbol{x}_p}. \tag{3.15}$$

Il reste à spécifier les dérivées de nos trois polynômes pour chaque nœud de la maille c. On les donne en fonction des coordonnées symétrisées de la définition 3.2. Les calculs ont été effectué avec Mathematica.

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial p_1}{\partial \boldsymbol{x}_{00}} = (0\,,\tfrac{1}{3}), \frac{\partial p_1}{\partial \boldsymbol{x}_{11}} = (0\,,\tfrac{1}{3}), \frac{\partial p_1}{\partial \boldsymbol{x}_{01}} = (0\,,\tfrac{1}{6}) \text{ et } \frac{\partial p_1}{\partial \boldsymbol{x}_{10}} = (0\,,\tfrac{1}{6}),\\
&\frac{\partial p_2}{\partial \boldsymbol{x}_{00}} = (-\tfrac{r_1^d}{2}\,,\tfrac{z_1^d}{2}), \frac{\partial p_2}{\partial \boldsymbol{x}_{11}} = (\tfrac{r_1^d}{2}\,,-\tfrac{z_1^d}{2}),\\
&\frac{\partial p_2}{\partial \boldsymbol{x}_{01}} = (\tfrac{r_0^d}{2}\,,-\tfrac{z_0^d}{2}) \text{ et } \frac{\partial p_2}{\partial \boldsymbol{x}_{10}} = (-\tfrac{r_0^d}{2}\,,\tfrac{z_0^d}{2}),\\
&\frac{\partial p_3}{\partial \boldsymbol{x}_{00}} = \left(-\tfrac{r_0^d\, r_1^d}{12} + r_1^d\, r_1\,,\; -\tfrac{1}{12}\, r_1^d\, \left(z_0^d + 12\, z_1\right)\right),\\
&\frac{\partial p_3}{\partial \boldsymbol{x}_{11}} = \left(\tfrac{1}{12}\, r_1^d\, \left(r_0^d - 12\, r_1\right)\,,\; -\tfrac{z_0^d\, r_1^d}{12} + z_1\, r_1^d\right),\\
&\frac{\partial p_3}{\partial \boldsymbol{x}_{01}} = \left(\tfrac{r_0^d\, r_1^d}{12}\,,\; -z_1\, r_0^d + z_0^d \left(\tfrac{r_1^d}{12} + r_1\right)\right),\\
&\frac{\partial p_3}{\partial \boldsymbol{x}_{10}} = \left(-\tfrac{r_0^d\, r_1^d}{12}\,, z_1\, r_0^d + \tfrac{z_0^d\, r_1^d}{12} - z_0^d\, r_1\right).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Les équations (3.15) et (3.16) déterminent complètement tous les vecteurs de coin de volumes $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ dans une maille c quadrangulaire en fonction de ses coordonnées (*via* les coordonnées symétrisées).

3.4.2 Propriétés

On énonce ici deux propriétés vérifiées par les variations de volumes $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ [143, 144]. La première est fondamentale pour la conservation de la quantité de mouvement.

Proposition 3.2. *Les vecteurs* $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ *respectent*

$$\sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \;\; et \;\; \sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_r \neq 0, \forall c, \tag{3.17}$$

Démonstration. Par définition, le volume V_c est une fonction des coordonnées $\boldsymbol{x}_p$ des nœuds dans la maille c. La relation entre la variation de volume d'une maille c, notée dV_c, causée par la variation de position d'un nœud $p \in P(c)$, notée $\delta\boldsymbol{x}_p$, s'écrit donc

$$dV_c = \sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \delta\boldsymbol{x}_p. \tag{3.18}$$

Pour une translation suivant $\boldsymbol{e}_z$, c'est-à-dire pour $\delta\boldsymbol{x}_p = \boldsymbol{e}_z$ pour tout nœud $p \in P(c)$, la variation de volume de la maille c est nulle, soit $dV_c = 0$. Avec la relation (3.18), on en déduit que

$$\sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0.$$

Un mouvement radial, lorsque $\delta\boldsymbol{x}_p = \boldsymbol{e}_r$, reste une translation dans le système de coordonnées cartésiennes (la direction $\boldsymbol{e}_r$ est équivalente à la direction $\boldsymbol{e}_y$) mais devient une dilatation dans le système de coordonnées cylindriques. Pour une maille c soumise à un tel mouvement, ceci implique que la variation de volume n'est pas nulle, soit $dV_c \neq 0$. On peut écrire

$$\sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_r \neq 0.$$

ce qui conclut la preuve. □

Remarque 3.2. *D'après la démonstration de la proposition 3.2, on déduit directement que*

$$\sum_{p \in P(c)} \frac{\partial A_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \boldsymbol{0}, \tag{3.19}$$

permettant de conclure sur la conservation de la quantité de mouvement dans les deux directions en géométrie plane.

Proposition 3.3. *Les vecteurs* $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ *respectent*

$$\sum_{c \in C(p)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \boldsymbol{0}, \forall c. \tag{3.20}$$

Démonstration. On réécrit la relation (3.20)

$$\sum_{c \in C(p)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\sum_{c \in C(p)} V_c \right).$$

Le volume $\sum_{c \in C(p)} V_c$ est indépendant de la position du nœud central $\boldsymbol{x}_p$ ce qui permet d'en déduire le résultat de la proposition. □

3.5 Construction des vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$

3.5.1 Expressions explicites

En dérivant par rapport aux positions $\boldsymbol{x}_p$, $p \in P(c)$, avec Mathematica l'expression (3.9) des masses de coin m_{cq}, $q \in P(c)$, on obtient

$$\frac{\partial m^{\mathrm{M}}_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \frac{q_2 - p_2\,\Delta v}{V_c}\frac{\partial p_1}{\partial \boldsymbol{x}_p} + \frac{q_1 - p_1\,\Delta v}{V_c}\frac{\partial p_2}{\partial \boldsymbol{x}_p} - \frac{\Delta v}{V_c}\frac{\partial p_3}{\partial \boldsymbol{x}_p} + \frac{p_2}{V_c}\frac{\partial q_1}{\partial \boldsymbol{x}_p} + \frac{p_1}{V_c}\frac{\partial q_2}{\partial \boldsymbol{x}_p}, \tag{3.21}$$

où $\Delta v = (p_2\,q_1 + p_2\,q_1)\ /\ V_c$. Les expressions des polynômes p_1, p_2, p_3, q_1 et q_2 sont données par les relations (3.6), (3.11a) et (3.11b) tandis que les dérivées des polynômes p_1, p_2 et p_3 sont explicitées dans les relations (3.16). Il reste donc à définir les quatre autres dérivées qui sont également obtenues par dérivation directe sous Mathematica des formules (3.11a) et (3.11b)

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial q_1}{\partial \boldsymbol{x}_{00}} = (0\,,\,\tfrac{3}{32}),\quad \frac{\partial q_1}{\partial \boldsymbol{x}_{11}} = (0\,,\,-\tfrac{1}{32}),\quad \frac{\partial q_1}{\partial \boldsymbol{x}_{01}} = (0\,,\,-\tfrac{1}{32})\ \text{ et }\ \frac{\partial q_1}{\partial \boldsymbol{x}_{10}} = (0\,,\,-\tfrac{1}{32}),\\
&\frac{\partial q_2}{\partial \boldsymbol{x}_{00}} = (-\tfrac{r_1^d}{16}\,,\,\tfrac{z_1^d}{16}),\frac{\partial q_2}{\partial \boldsymbol{x}_{11}} = (-\tfrac{r_1^d}{16}\,,\,\tfrac{z_1^d}{16}),\frac{\partial q_2}{\partial \boldsymbol{x}_{01}} = (\tfrac{1}{16}\left(r_1^d - 12\,r_1\right)\,,\,-\tfrac{z_1^d}{16} + \tfrac{3}{4}\,z_1),\\
&\frac{\partial q_2}{\partial \boldsymbol{x}_{10}} = (\tfrac{1}{16}\left(r_1^d + 12\,r_1\right)\,,\,-\tfrac{z_1^d}{16} - \tfrac{3}{4}\,z_1).
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Grâce à la remarque 3.1, les vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ se déduisent directement des vecteurs $\frac{\partial m^{\mathrm{M}}_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$: il suffit simplement de multiplier par $\frac{2}{3}$ soit

$$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \tfrac{2}{3}\frac{\partial m^{\mathrm{M}}_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}, \forall c, \forall q \in P(c) \text{ et } \forall p \in P(c). \tag{3.23}$$

Les équations (3.21), (3.22) et (3.23) définissent complètement les vecteurs de masse de coin. Comme toutes les quantités géométriques sur une maille quadrangulaire, ces vecteurs sont exprimés en fonction des coordonnées symétrisées de la définition 3.2. Dans ces formules, on rappelle que le nœud 00 désigne le nœud q associé à m_{cq}. Pour chaque nœud de la maille c, on obtient donc quatre dérivées associées aux quatre nœuds. Comme pour les masses de coin, les formules (3.21) et (3.22) sont valides pour tout q dans $P(c)$ et il suffit simplement d'adapter les affectations de 00, 01, 11 et 10.

3.5.2 Propriétés

Les vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ respectent deux propriétés. La première, analogue de la proposition 3.2, est nécessaire à la conservation de la quantité de mouvement.

Proposition 3.4. *Les vecteurs de masse de coin* $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ *vérifient*

$$\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \text{ mais } \sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_r \neq 0, \forall q \in P(c) \text{ et } \forall c. \tag{3.24}$$

Démonstration. On part de la définition 2.10 des masses de coin m_{cq} qui s'écrit

$$m_{cq} = \frac{V_{cq}}{V_c} m_c.$$

Ces masses m_{cq} sont donc calculées grâce à un rapport de volumes. Les mêmes raisons que celles évoquées dans la démonstration de la proposition 3.2 font que, seulement pour un mouvement uniforme suivant $\boldsymbol{e}_z$ d'une maille c, le rapport $\frac{V_{cq}}{V_c}$ est constant. Ceci implique que la masse m_{cq} reste constante pour un mouvement axial mais pas pour un mouvement radial soit

$$\sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \text{ mais } \sum_{p\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_r \neq 0, \forall q \in P(c) \text{ et } \forall c.$$

□

La remarque 3.2 faite sur les variations de surface est également valide pour les variations de masse : la variation $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ s'annule dans les deux directions en géométrie plane. La seconde propriété est utilisée dans la sous-section suivante pour vérifier les formules (3.21) et (3.22).

Proposition 3.5. *Les vecteurs de masse de coin* $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ *vérifient*

$$\sum_{q\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \boldsymbol{0}, \forall p \in P(c), \forall c. \tag{3.25}$$

Démonstration. L'équation (3.25) s'obtient facilement en utilisant la proposition 3.1

$$\sum_{q\in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\sum_{q\in P(c)} m_{cq} \right) = \frac{\partial m_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \boldsymbol{0}.$$

□

3.6 Vérification des hypothèses de consistance pour le schéma VNM

On cherche ici à démontrer les hypothèses de consistance du théorème 2.5 pour la masse nodale construite dans la sous-section 3.3.1.

Proposition 3.6. *Sous des conditions de régularité du maillage, les hypothèses de consistance (2.75a)-(2.75b)-(2.75c) sont vérifiées pour la masse nodale m_p construite en sous-section 3.3.1 en géométrie axisymétrique et en géométrie plane.*

Démonstration. Voir annexe C section C.4. □

3.7 Dépendances radiales des quantités géométriques

3.7.1 Dépendances radiales et préservation des symétries

Dans cette section, on souhaite vérifier si la construction proposée dans le définition 3.4 pour le volume de contrôle V_{cp} respecte les écoulements axiaux. Ici, on s'intéresse donc à des écoulements indépendants de r, et on considère uniquement un maillage cartésien et régulier sur le domaine $[0,Z] \times [0,R]$. Le pas d'espace dans la direction axiale (resp. radiale) est désigné par Δz (resp. Δr). Les conditions limites sont les suivantes : $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ pour $z = 0$ et $z = Z$, $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0$ pour $r = 0$ et $r = R$. Les hypothèses avec lesquelles on travaille s'écrivent donc

$$\left\{\begin{array}{l} \text{maillage cartésien et régulier sur } [0,Z] \times [0,R], \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \text{ pour } z = 0 \text{ et } z = Z,\ \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \text{ pour } r = 0 \text{ et } r = R, \\ \text{Pour les quantités disponibles en début de cycle, on a} \\ \rightarrow \text{absence de mouvement radial : } \boldsymbol{u}_p \cdot \boldsymbol{e}_r = 0, \\ \rightarrow \text{uniformité radiale : } \boldsymbol{u}_p \cdot \boldsymbol{e}_z\,, p_c\,, q_c\,, \rho_c \text{ et } m_p \text{ indépendants de } r. \end{array}\right. \tag{3.26}$$

Les forces d'anti-dérive sont également négligées. Sous ces hypothèses, les calculs analytiques des quantités géométriques sont possibles, permettant ainsi l'analyse des dépendances radiales. On peut donc déterminer le comportement de nos schémas pour la préservation de la symétrie plane dans de tels écoulements : on suppose dans les hypothèses (3.26) que les quantités disponibles en début de cycle respectent effectivement l'absence de mouvement radial et l'uniformité suivant r et on regarde si il en est de même pour les vitesses $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ et les énergies internes e_c^{n+1}.

On commence par un exemple simple illustrant l'impact des dépendances radiales des quantités géométriques sur la préservation de la symétrie plane. On considère une maille c rectangulaire dont un des nœuds p est sur l'axe $r = 0$ et on s'intéresse aux forces axiales $\boldsymbol{F}_{cp}$ et $\boldsymbol{F}_{cq}$ dues à la pression et à la pseudo-viscosité présentes dans la maille c et s'appliquant sur p et sur le nœud q de même coordonnée axiale notée z'. On considère la même variation de position axiale pour les nœuds p et q que l'on désigne par δz. Les

notations sont résumées dans la figure 3.4. On a

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_{cq} &= (p_c + q_c)\,\tfrac{\partial V_c}{\partial z_q}\,\boldsymbol{e}_z \\ &= \left[\lim_{\delta z\to 0}\left(2\,\pi\,(p_c+q_c)\int_0^{\Delta r}\int_{z'}^{\frac{\delta z}{\Delta r}r+z'} r\,dz\,dr\right)/\delta z\right]\boldsymbol{e}_z \\ &= \tfrac{2}{3}\,(p_c+q_c)\,\pi\,\Delta r^2\,\boldsymbol{e}_z,\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_{cp} &= (p_c + q_c)\,\tfrac{\partial V_c}{\partial z_p}\,\boldsymbol{e}_z \\ &= \left[\lim_{\delta z\to 0}\left(2\,\pi\,(p_c+q_c)\int_0^{\Delta r}\int_{z'}^{-\frac{\delta z}{\Delta r}r+z'+\delta z} r\,dz\,dr\right)/\delta z\right]\boldsymbol{e}_z \\ &= \tfrac{1}{3}\,(p_c+q_c)\,\pi\,\Delta r^2\,\boldsymbol{e}_z.\end{aligned}$$

La force $\boldsymbol{F}_{cq}$ s'appliquant sur le nœud q est deux fois supérieure à la force $\boldsymbol{F}_{cp}$ s'appliquant sur le nœud p. Les forces de pression et de pseudo-viscosité ont donc effectivement une dépendance en r venant des variations de volume $\frac{\partial V_c}{\partial z_p}$ et $\frac{\partial V_c}{\partial z_q}$. Si les masses intervenant dans l'équation de quantité de mouvement sont mal choisies, cela implique une accélération dépendante de r causant le phénomène d'enfoncement polaire et la perte de symétrie plane de l'écoulement.

On réalise ici un calcul analogue à ce qui vient d'être fait pour toutes les quantités géométriques intervenant dans nos formulations axisymétriques. On utilise ensuite les résultats obtenus pour déterminer si les symétries planes sont préservées pour chaque schéma sous les hypothèses (3.26). Les résultats sont formulés sous la forme de propositions. Lorsque les démonstrations sont trop conséquentes, elles sont reléguées dans l'annexe C ce qui facilite la lisibilité. Seule l'étude concernant le schéma à masses nodales variables et diagonales du chapitre 2 est réalisée ici. Le schéma à masses nodales constantes non diagonales (abandonné pour l'extension à l'ALE) préserve les écoulements axiaux. En effet, sous les hypothèses (3.26), l'équation de quantité de mouvement discrète est strictement confondue avec une formulation éléments finis, d'ordre 2, de l'équation (1.1b) locale et continue. Cette formulation préservant les vitesses linéaires par construction, aucun mouvement radial n'est créé et l'uniformité est également respectée. En particulier, on peut montrer que

$$\frac{\partial V_c}{\partial z_p} = \int_c \frac{\partial \psi_p}{\partial z}\,dV,\ \forall p \in P(c) \text{ et } \forall c, \tag{3.27}$$

où on rappelle que ψ_p est la $p^{\text{ième}}$-fonction de base $\mathbb{Q}_1$: voir également la démonstration de consistance pour le schéma à masses nodales constantes non diagonale en sous-section 2.4.7.2. La quantité $p_c \int_c \frac{\partial \phi_p}{\partial z}\,dV$ n'est rien d'autre que la composante axiale de la force—

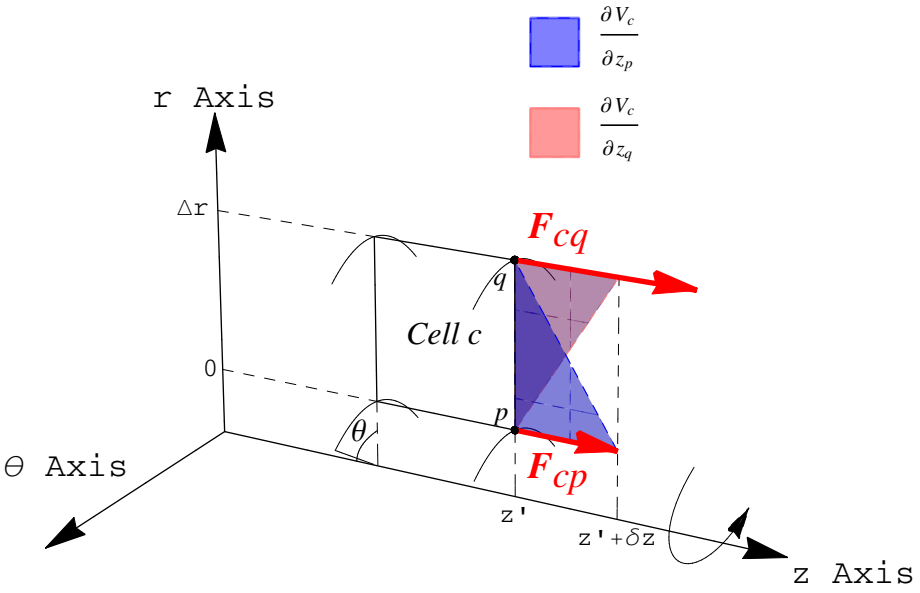


FIGURE 3.4 – Phénomène d'enfoncement polaire dans la direction axiale pour une maille c rectangulaire sur l'axe $r = 0$ dans le cas d'une solution sans déplacement radial et uniforme suivant r. La force $\boldsymbol{F}_{cq}$ s'appliquant sur le nœud q est supérieure d'un facteur 2 par rapport à la force $\boldsymbol{F}_{cp}$ s'appliquant sur le nœud p ce qui peut impliquer une accélération également deux fois supérieure pour le nœud q par rapport au nœud p si les masses nodales sont choisies de manière inappropriée.

dans une formulation éléments finis—s'appliquant sur le nœud p due à la pression dans la maille c.

3.7.2 Analyse des termes de l'équation de quantité de mouvement

On commence par étudier l'équation (2.65) de quantité de mouvement du schéma à masses nodales variables que l'on rappelle juste après. Elle est ici écrite lors du processus de correction et sans force d'anti-dérive.

$$m_p^{n+1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} = \sum_{c\in C(p)} (p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2}$$
$$+ \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2}.$$

On s'intéresse ici aux termes correspondants :

— aux forces de pression et de pseudo-viscosité

$$\sum_{c\in C(p)} (p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n;$$

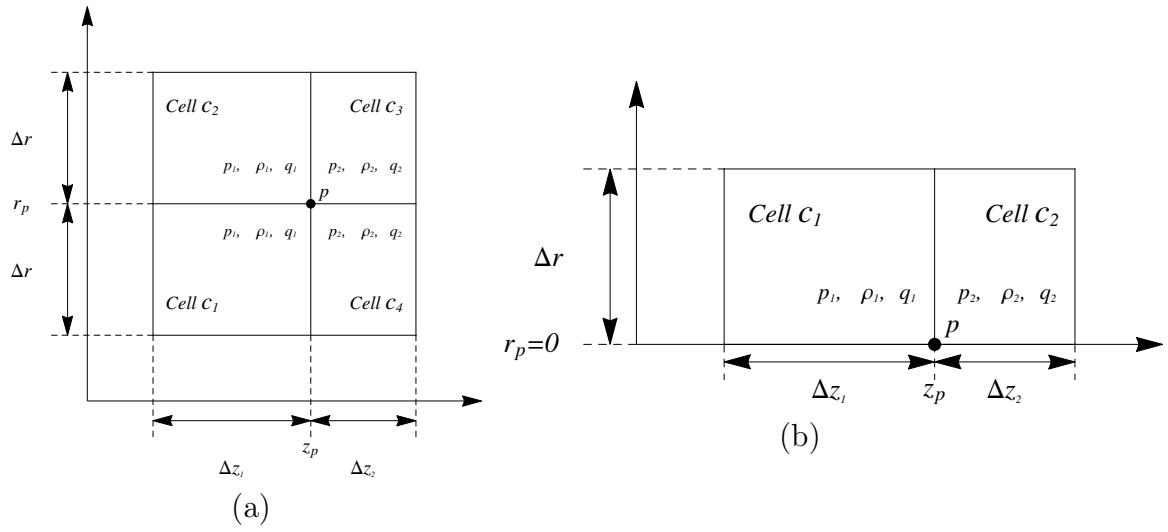


FIGURE 3.5 – Notations utilisées pour exprimer analytiquement les quantités géométriques de l'équation de quantité de mouvement du schéma à masses nodales variables sous les hypothèses (3.26) : (a) nœud intérieur au domaine et (b) nœud au bord de normale $\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{e}_r$. Les indices en temps sont négligés sur cette figure. Les quantités des mailles à gauche du nœud p sont indicées par 1 et les quantités à droite par 2.

— au flux de quantité de mouvement

$$\sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2};$$

— aux masses nodales $m_p^{\mathrm{M},n+1/2}$ et $m_p^{n+1/2}$ associées aux volumes de contrôle $V_p^{\mathrm{M},n+1/2}$ (défini par les médianes) et $V_p^{n+1/2}$ de la définition 3.4.

On note l'absence du terme $\sum_{q\in Q(p)} \frac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n-1/2} \Delta t^{n-1/2}$ qui ne dépend que des quantités à l'instant $t^{n-1/2}$ et qui ne brise donc pas, par hypothèse, l'absence de dépendance radiale et l'uniformité. Lors de la phase de prédiction pour l'équation (2.60) de quantité de mouvement, la masse prédite $m_p^{*,n+1/2}$, calculée par l'équation (2.59a), ne dépend également que de quantités à l'instant $t^{n-1/2}$ et ne pose donc pas de problème. Seules les forces de pression et pseudo-viscosité

$$\sum_{c\in C(p)} (p_c^{n-1/2} + q_c^{n-1/2}) \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n,$$

sont alors à étudier pour la phase de prédiction. Cette étude est identique à celle qui va suivre en sous-section 3.7.2, réalisée lorsque la pression et la pseudo-viscosité sont centrées, et n'est donc pas détaillée. On suppose alors que la phase de prédiction sur l'équation de quantité de mouvement n'introduit pas de mouvement radial et respecte l'uniformité. La vitesse prédite $\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2}$ respectent donc les hypothèses (3.26).

Ces termes sont explicitement exprimés en fonction des notations définies dans la figure

3.5 pour un nœud p quelconque intérieur au domaine ou sur le bord de normale $\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{e}_r$. Bien que les indices en temps soient omis pour la lisibilité sur la figure 3.5, il est utile de remarquer, sous les hypothèses (3.26), que les quantités dépendent du temps à l'exception du pas d'espace dans la direction radiale Δr et de la coordonnée r_p. C'est pourquoi les indices en temps ne sont jamais indiqués pour ces deux dernières quantités. Pour l'analyse de la quantité de mouvement (2.65), une séparation des résultats entre les nœuds internes et les nœuds situés sur le bord est effectuée. Seules les dépendances radiales des nœuds p sur le bord $r = 0$ sont exprimées, où les dépendances radiales sont les plus fortes. On commence par exprimer les résultats pour un nœud p quelconque intérieur au domaine : figure 3.5(a).

Proposition 3.7. *Sous les hypothèses (3.26), les forces de pression et de pseudo-viscosité s'expriment*

$$\sum_{c \in C(p)} (p_c^n + q_c^n) \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{e}_r = 0, \tag{3.28a}$$

$$\sum_{c \in C(p)} (p_c^n + q_c^n) \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{e}_z = 2\,\pi\,\Delta r\,(p_1^n + q_1^n - p_2^n - q_2^n)\; r_p, \tag{3.28b}$$

pour tout nœud p intérieur au domaine.

Démonstration. Voir annexe C section C.5. □

Ces forces dépendent effectivement de la distance r_p du nœud p à l'axe de symétrie (Oz) comme on l'a remarqué dans la sous-section 3.7.1. On note que cette dépendance est linéaire dans notre cas particulier. De plus, aucun mouvement radial parasite n'est introduit comme on peut le voir dans l'équation (3.28a). On donne maintenant le résultat suivant pour les masses nodales $m_p^{\mathrm{M},n+1/2}$ et $m_p^{n+1/2}$.

Proposition 3.8. *Sous les hypothèses (3.26), les deux masses nodales associées aux volumes de contrôle V_p^M et V_p de la définition 3.4 s'écrivent*

$$m_p^{M,n+1/2} = m_p^{n+1/2} = \pi\,\Delta r \left(\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2} + \rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}\right) r_p, \tag{3.29}$$

pour tout nœud p intérieur au domaine. Les quantités $\Delta z_1^{n+1/2}$ et $\Delta z_2^{n+1/2}$ sont introduites dans la figure 3.5.

Démonstration. Voir annexe C section C.6. □

Les propositions 3.7 et 3.8 permettent de conclure que le rapport de la composante axiale des forces de pression et de pseudo-viscosité sur la masse nodale est identique pour

les deux masses nodales considérées et est indépendant de r, soit

$$\begin{aligned}\frac{1}{m_p^{\mathrm{M},n+1/2}}\left(\sum_{c\in C(p)}(p_c^n+q_c^n)\,\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n\cdot\boldsymbol{e}_z\right)&=\frac{1}{m_p^{n+1/2}}\left(\sum_{c\in C(p)}(p_c^n+q_c^n)\,\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n\cdot\boldsymbol{e}_z\right)\\&=2\,\frac{p_1^n+q_1^n-p_2^n-q_2^n}{\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2}+\rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}},\end{aligned}\tag{3.30}$$

pour tout nœud p intérieur au domaine. On continue notre étude, toujours pour un nœud p intérieur au domaine, avec le terme de flux de quantité de mouvement. Comme pour les forces, les trois propositions qui suivent donnent l'expression de ce terme en fonction des notations introduites dans la figure 3.5.

Proposition 3.9. *Sous les hypothèses (3.26), le terme de flux de quantité de mouvement pour les deux masses nodales m_p^M et m_p s'exprime*

$$\sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\frac{\partial m_q^M}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}=\sum_{q\in Q(p)}\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}=\boldsymbol{0},\tag{3.31}$$

pour tout nœud p intérieur au domaine.

Démonstration. Voir annexe C section C.7. □

Le terme de flux de quantité de mouvement intervenant dans l'équation (2.65) est donc nul pour tout nœud p intérieur au domaine sous les hypothèses (3.26).

On réitère ce qui vient d'être fait afin de formuler les résultats pour un nœud p sur le bord $r=0$ de normale $\boldsymbol{n}=-\boldsymbol{e}_r$: figure 3.5(b). On ne se préoccupe pas des composantes radiales des forces et du terme de flux de quantité de mouvement puisque la relation $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{e}_r=0$ est forcée par l'application des conditions aux limites qui sera détaillée dans l'annexe B.

Proposition 3.10. *Sous les hypothèses (3.26), les forces de pression et de pseudo-viscosité s'expriment*

$$\sum_{c\in C(p)}(p_c^n+q_c^n)\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n\cdot\boldsymbol{e}_z=\pi\,\tfrac{\Delta r^2}{3}\,(p_1^n+q_1^n-p_2^n-q_2^n)\,,\tag{3.32}$$

pour tout nœud p sur le bord $r=0$.

Démonstration. La démonstration utilise la formule (C.10b) de l'annexe C section C.5 avec $r_p=0$. □

Proposition 3.11. *Sous les hypothèses (3.26), les masses nodales $m_p^{M,n+1/2}$ et $m_p^{n+1/2}$*

s'écrivent

$$m_p^{M,n+1/2} = \tfrac{1}{8}\,\pi\,\Delta r^2 \left(\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2} + \rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}\right), \tag{3.33a}$$

$$m_p^{n+1/2} = \tfrac{1}{6}\,\pi\,\Delta r^2 \left(\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2} + \rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}\right), \tag{3.33b}$$

pour tout nœud p sur le bord $r = 0$.

Démonstration. On pose $r_p = 0$ dans les relations suivantes de l'annexe C Section C.6 : (C.11b)-(C.11c) pour la masse m_p^{M} et (C.11b)-(C.11c)-(C.12b)-(C.12c) pour la masse m_p. □

Les propositions 3.10 et 3.11 permettent de conclure que les rapports de la composante axiale des forces de pression et de pseudo-viscosité sur les différentes masses nodales s'écrivent

$$\frac{1}{m_p^{\mathrm{M},n+1/2}} \left(\sum_{c\in C(p)} (p_c^n + q_c^n)\, \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{e}_z \right) = \frac{8}{3}\, \frac{p_1^n + q_1^n - p_2^n - q_2^n}{\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2} + \rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}}, \tag{3.34a}$$

$$\frac{1}{m_p^{n+1/2}} \left(\sum_{c\in C(p)} (p_c^n + q_c^n)\, \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{e}_z \right) = 2\, \frac{p_1^n + q_1^n - p_2^n - q_2^n}{\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2} + \rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}}, \tag{3.34b}$$

pour tout nœud p sur le bord $r = 0$. En comparant avec la relation (3.30), l'équation (3.34a) montre que l'uniformité radiale de l'écoulement n'est pas respectée si on utilise les masses nodales définies par les médianes dans l'équation de quantité de mouvement. En effet, le rapport des forces sur la masse nodale n'est pas identique pour un nœud p sur le bord $r = 0$ ou pour un nœud p interne au domaine. En revanche, pour la masse nodale m_p, l'uniformité radiale est respectée.

Proposition 3.12. *Sous les hypothèses (3.26), le terme de quantité de mouvement pour les masses nodales m_p^M et m_p s'exprime*

$$\sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\, \frac{\partial m_q^M}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{e}_z = \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\, \frac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \tag{3.35}$$

pour tout nœud p sur le bord $r = 0$.

Démonstration. Dans la démonstration de la proposition 3.9, on a réécrit le terme de flux de quantité de mouvement sous la forme

$$\sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\, \frac{\partial m_q^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} = \sum_{c\in C(p)} \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\, \frac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2},$$

et on a réalisé l'étude de

$$\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}.$$

On a montré que

$$\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \forall c \in C(p).$$

Cette dernière égalité, vérifiée ligne de maillage par ligne de maillage, nous permet de prouver la relation (3.35) pour tout nœud p sur le bord $r = 0$. Enfin, sachant que $\frac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \frac{2}{3}\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$, la seconde égalité de l'équation (3.35) est démontrée. □

Le terme de flux de quantité de mouvement pour un nœud p sur le bord $r = 0$ n'intervient donc pas et ne pose aucun problème. Les résultats pour un nœud p sur le bord $r = R$ ne sont pas détaillés. Ils n'apportent rien de plus par rapport à l'étude d'un nœud sur le bord $r = 0$. Bien que le raisonnement soit identique par rapport à un nœud interne, on voit qu'il est tout de même important de présenter les résultats et leurs démonstrations pour un nœud au bord. Des problèmes pour le respect de l'uniformité radiale de l'écoulement, causés par les dépendances en r, peuvent en effet venir de ces nœuds. C'est ce qui se produit pour un volume de contrôle défini par les médianes. La correction constante $\frac{1}{3}\left(\frac{m_c}{4}\right)$ apportée à ce volume permet alors de retrouver une accélération identique entres nœuds internes et sur le bord. Ceci justifie l'utilisation du volume de contrôle V_p de la définition 3.4.

L'analyse des dépendances radiales des quantités géométriques intervenant dans l'équation (2.65) de quantité de mouvement est terminée. On s'intéresse à présent à l'équation d'énergie interne du schéma.

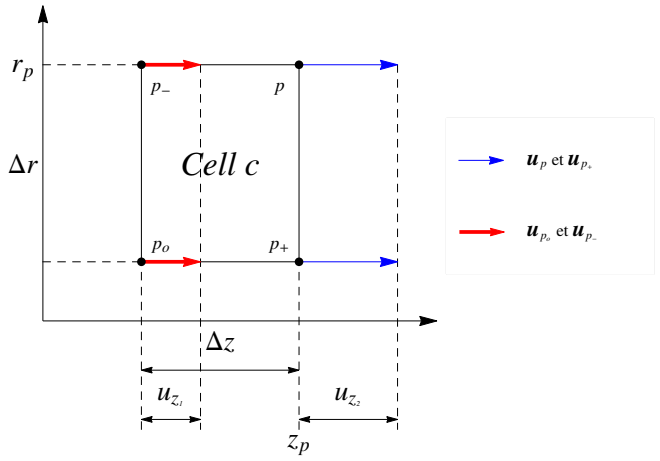


FIGURE 3.6 – Notations utilisées pour exprimer analytiquement les quantités géométriques de l'équation (2.69) d'énergie interne sous les hypothèses (3.26).

3.7.3 Analyse des termes de l'équation d'énergie interne

L'équation (2.69) d'énergie interne du schéma à masses nodales variables est réécrite juste en dessous avec un processus de prédiction/correction et sans anti-dérive.

$$
\begin{aligned}
&m_c\left(e_c^{n+1}-e_c^n\right)\\
&\quad=\sum_{p\in P(c)}\Big\{-\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1}+(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}\Big]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2}\\
&\qquad+\tfrac{1}{4}(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}-\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2}-\Delta t^{n-1/2})\\
&\qquad\qquad-\tfrac{1}{2}(q_c^n-q_c^{n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad-\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2}\\
&\qquad-\sum_{q\in P(c)}\tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2\tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2}\\
&\qquad\qquad+\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\}.
\end{aligned}
$$

Les calculs sont identiques quel que soit le matériau φ et on considère donc un unique matériau dans la suite. Les termes qui nous intéressent sont donc

— le travail des forces de pression et de pseudo-viscosité

$$\sum_{p\in P(c)}-\tfrac{1}{2}\Big[(p_c^{n+1}+q_c^{n+1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1}+(p_c^n+q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n}\Big]\cdot\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\Delta t^{n+1/2};$$

— la correction à l'ordre du schéma assurant la conservation de l'énergie totale

$$\sum_{p\in P(c)} \tfrac{1}{4}(p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,(\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2});$$

— la correction apportant l'énergie manquante dû au remplacement de q_c^n par $q_c^{n-1/2}$ au pas de temps précédent afin de rester explicite

$$\sum_{p\in P(c)} -\tfrac{1}{2}\,(q_c^n - q_c^{n-1/2})\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Delta t^{n-1/2};$$

— les termes correspondants aux masses nodales variables

$$\begin{aligned}\sum_{p\in P(c)} \Big\{ &- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n-1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2} \\ &- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2} \\ &+ \tfrac{1}{2}(m_{cp}^{\varphi,n+1/2} - m_{cp}^{\varphi,n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\};\end{aligned}$$

— la masse constante m_c.

Ces termes sont explicitement exprimés en fonction des notations définies dans la figure 3.6 pour une maille c quelconque (même au bord) sous les hypothèses (3.26). Les indices en temps ne sont pas indiqués sur la figure mais il faut garder en tête que les quantités dépendent du temps à l'exception de la composante r_p et du pas radial Δr. Bien que l'on vient de voir que ce n'était pas vérifiée lorsque on utilise les masses nodales définies par les médianes, on réalise l'étude de l'équation d'énergie interne du schéma à masses nodales variables en supposant que le passage dans l'équation de quantité de mouvement ne brise pas l'absence de mouvement radial et l'uniformité suivant r. C'est pourquoi les vitesses sont supposées sans composantes radiales et de composantes axiales uniformes suivant r dans les résultats suivants. Sous les hypothèses (3.26), on commence par exprimer analytiquement la divergence discrète de la vitesse intervenant dans le schéma à masses nodales variables.

Proposition 3.13. *Sous les hypothèses (3.26), la divergence discrète d'une vitesse quelconque $\boldsymbol{u}_p$, de composante radiale nulle et de composante axiale indépendante de r, s'écrit*

$$\tfrac{1}{V_c}\sum_{p\in P(c)} \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot\boldsymbol{u}_p = \tfrac{1}{\pi\,\Delta z}\,(u_{z_2} - u_{z_1})\,. \tag{3.36}$$

La relation (3.36) est valide quelque soit le temps où le volume V_c, les vecteurs $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ et la vitesse $\boldsymbol{u}_p$ sont définis.

Démonstration. Voir annexe C section C.8. □

La proposition 3.13 permet de conclure que le rapport de tous les termes dans l'équation d'énergie interne faisant intervenir le produit scalaire entre les vecteurs $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ et la vitesse $\boldsymbol{u}_p$ sur la masse m_c sont indépendants de r. Il reste donc à déterminer les dépendances radiales des termes venants des masses variables.

Proposition 3.14. *Sous les hypothèses (3.26), les termes venant des masses variables dans l'équation (2.69) d'énergie interne, sont nuls*

$$\sum_{p\in P(c)} \Big\{ - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n-1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n-1/2} - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n+1/2} + \tfrac{1}{2}(m_{cp}^{\varphi,n+1/2} - m_{cp}^{\varphi,n-1/2})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \Big\} = 0, \quad (3.37)$$

quelle que soit la définition des masses nodales considérée.

Démonstration. Voir annexe C section C.9. □

La proposition 3.14 conclut l'étude des dépendances radiales de l'énergie interne (2.69). Sous les hypothèses (3.26), cette équation permet un calcul de e_c^{n+1} respectant l'uniformité radiale de l'écoulement quelque soit la définition des masses nodales utilisées.

3.7.4 Résumé

On termine cette étude par résumer les résultats obtenus dans les sous-section 3.7.2 et 3.7.3 pour le schéma VNM. On rappelle que le schéma CCNM respecte la symétrie plane sous les hypothèses (3.26).

Théorème 3.1. *Sous les hypothèses (3.26), le schéma VNM respecte l'absence de mouvement radiale et l'uniformité suivant r lorsqu'on utilise les masses nodales m_p construite dans la sous-section 3.3.1.*

Démonstration. Les problèmes de non-respect des propriétés de l'écoulement viennent du passage dans l'équation (2.65) de quantité de mouvement et le passage dans l'équation (2.69) d'énergie interne ne brise pas la symétrie plane. Pour les masses nodales m_p construites dans la sous-section 3.3.1, l'accélération est indépendante de r et uniforme. En effet l'expression de l'accélération est donnée par la relation (3.30) pour un nœud interne et (3.34b) pour un nœud externe sous les hypothèses (3.26). On note que ce n'est pas le cas pour les masses médianes m_p^{M} où l'accélération pour un nœud externe est plus faible d'un facteur $\frac{3}{4}$ par rapport à un nœud interne. De plus, les flux de quantités de mouvement

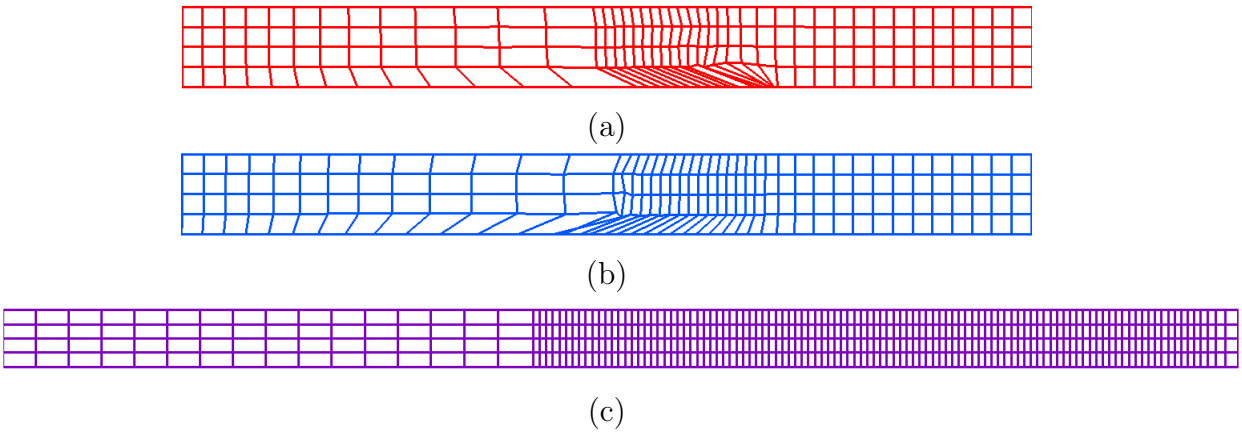


FIGURE 3.7 – Non-respect des écoulements purement axiaux et singularités sur l'axe $r = 0$ dans le cas test de Sod [145] en géométrie axisymétrique. Maillage obtenu pour : (a) masse nodale m_p^{M} définie par les médianes [48, 62–65] ; (b) masse nodale m_p^{W} [47, 61] ; et (c) masse nodale m_p associé au volume de contrôle V_p de la définition 3.4.

dans les équations (2.60) et (2.65) de quantité de mouvement n'interviennent pas. Sous les hypothèses (3.26), ces flux sont strictement nuls : proposition 3.9 pour un nœud interne et 3.12 pour un nœud externe. □

3.8 Conclusion du chapitre

Les points importants de ce chapitre concernent la définition de la masse nodale m_p et l'analyse du comportement du schéma VNM sur un écoulement purement axial et sans mouvement radial. Le résultat obtenu, exprimé par le théorème 3.1, permet de justifier la définition de la masse nodale m_p explicitée dans la sous-section 3.3.1. Cette définition sera utilisée dans toute cette thèse. Au début du chapitre 5, des comparaisons entre les différents choix de masse sont effectuées sur le cas test de Sod [145] pour illustrer le théorème 3.1 : voir la figure 3.7. Des calculs, non explicités dans ce travail, ont également été effectués pour les masses classiques de Goad [46] et pour les masses définies par les médianes mais reliées aux centres de masses (figure 2.2 du chapitre 2). Ces deux définitions ne permettent pas de préserver la symétrie plane. Les flux de quantité de mouvement brisent la symétrie pour les masses de Goad tandis que l'accélération n'est plus uniforme pour les masses utilisant les centres de masse.

Chapitre 4

Construction et analyse des termes dissipatifs

Dans le cadre de schémas numériques STS pour l'hydrodynamique lagrangienne, l'ajout de termes dissipatifs est nécessaire. Tel qu'on les a introduits dans les chapitres 1 et 2, ces termes prennent deux formes : une pseudo-viscosité et une force d'anti-dérive. La pseudo-viscosité est homogène à une pression et est introduite de façon à interdire les solutions non entropiques dans les cas avec onde de choc. Concernant la force d'anti-dérive, elle est utile pour éliminer, ou du moins limiter, les modes de déformations non physiques causées par une sous-intégration des termes de pression. Dans ce chapitre, les attentes sur ces termes sont définies et les formulations utilisées dans cette thèse sont présentées et analysées.

4.1 Terme de pseudo-viscosité

Dans un souci de clarté et de complétude, on rappelle, dans cette Section, la construction classique du terme de pseudo-viscosité scalaire utilisé dans cette thèse. On en profite pour décrire le principe de la méthode et déterminer le cahier des charges que doit respecter ce terme. Cette Section est en grande partie reprise de [54].

4.1.1 Principe de la méthode et cahier des charges

Le terme de pseudo-viscosité, usuellement noté q, a été pour la première fois introduit dans un papier de von Neumann et Richtmyer publié dans *Journal of Applied Physics* en 1950 [1]. En réalité, cette notion a déjà été documentée dans un rapport interne de Richtmyer paru en 1948 [42] au laboratoire scientifique de Los Alamos aux États-Unis. Un second rapport a également été écrit par Richtmyer la même année [43] démontrant la méthode. Bien que ces deux rapports soient la véritable origine du concept, ils ont vu

le jour dans un environnement classifié et ce sont les idées de l'article de 1950, présentes dans la littérature ouverte, qui ont servi de socle pour le développement de la méthode.

L'idée de base consiste à modifier les équations d'Euler (1.1a), (1.1b) et (1.1c) en y ajoutant un terme q appelé pseudo-viscosité et homogène à une pression

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{dt} = -\rho \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}, \\ \rho \frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla} (p+q), \\ \rho \frac{de}{dt} = -(p+q) \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}. \end{cases} \tag{4.1}$$

De façon non rigoureuse, en comparant l'équation d'évolution de l'énergie interne du système (4.1) avec la loi d'état (1.5)

$$\rho \, de = -p \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} + \rho T \, ds,$$

on peut voir que le travail des forces de pseudo-viscosité $-q \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}$ correspond à la production d'entropie $\rho T \, ds$ dans le système. Le rôle du terme q est donc d'assurer la production d'entropie au cours du temps. On sélectionne ainsi la solution physique parmi l'infinité de solutions faibles existantes. Le respect du second principe de la thermodynamique (1.6)

$$\int \rho T \, ds \geq 0,$$

implique que le travail des forces de pseudo-viscosité doit être positif ou nul, soit

$$-q \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} \geq 0. \tag{4.2}$$

Le travail $-q \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}$ désigne la quantité d'énergie dissipée, autrement dit la quantité d'énergie cinétique transférée en chaleur. Ce mécanisme de dissipation se produit physiquement au niveau des ondes de choc : le terme q doit donc agir seulement dans ces zones et être négligeable dans les autres zones de l'écoulement. Il doit restituer la bonne variation de pression à travers un choc. Enfin, grâce au contrôle du mécanisme de dissipation, la pseudo-viscosité permet de maîtriser le profil de l'onde de choc afin de pouvoir la représenter sur un maillage discret. En effet, dans la réalité, lorsqu'une onde de choc se développe, son profil se raidit jusqu'à ce qu'il soit trop fin pour être représenté dans une résolution discrète : voir la figure 4.1. La pseudo-viscosité stoppe ce processus et étale l'onde de choc sur une longueur donnée ; de l'ordre de quelques mailles usuellement.

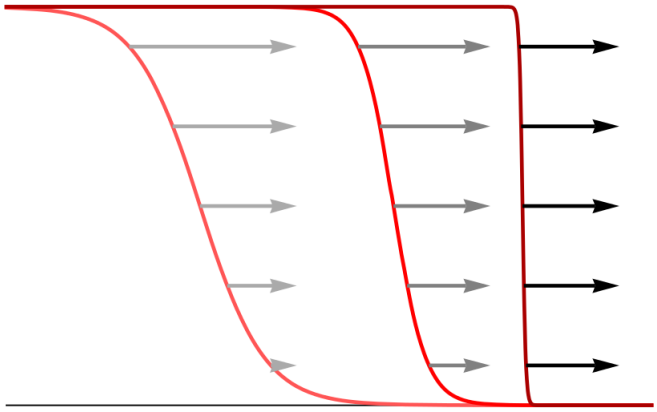


FIGURE 4.1 – Profil d'une onde de choc, contrôlé par le mécanisme de dissipation ayant lieu au niveau de l'onde qui se raidit jusqu'à devenir trop fin pour une résolution sur un maillage discret. L'illustration est issue de [54].

Toutes ces propriétés forment notre cahier des charges pour le terme de pseudo-viscosité :

$$\begin{cases} (i) \text{ la pseudo-viscosité doit dissiper de l'énergie cinétique en énergie thermique et non l'inverse (inégalité (4.2)) afin de respect le second principe de la thermodynamique 1.6;} \\ (ii) \text{ la pseudo-viscosité doit agir au niveau des ondes de choc et doit être négligeable ailleurs;} \\ (iii) \text{ la variation de pression à travers un choc doit être preservée;} \\ (iv) \text{ la pseudo-viscosité étale le profil du choc sur une longueur de l'ordre de quelques mailles.} \end{cases} \tag{4.3}$$

4.1.2 Construction du terme de pseudo-viscosité et propriétés

On rappelle tout d'abord que l'on définit le terme de pseudo-viscosité comme une fonction des vitesses, des positions et de l'énergie interne

$$q_c = \underline{\mathcal{Q}}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}, \{\boldsymbol{x}_p\}, e_c\right].$$

Comme dans le chapitre 2, ces dépendances n'apparaissent pas toujours pour des questions de lisibilité des équations mais elles doivent être gardées en tête.

Dans le cas des gaz parfaits, où la pression est donnée par

$$p = (\gamma - 1)\, \rho\, e,$$

l'analyse, en une dimension d'espace, des relations de saut de Rankine-Hugoniot à travers un choc entropique a été réalisée par Kurapatenko dans [57] en 1966. Ce travail est également relayé par Wilkins en 1980 dans [146]. Dans ce cadre, les relations de saut

peuvent être résolues explicitement pour la pression post-choc, notée p_G,

$$p_G = p_D + \tfrac{\gamma+1}{4}\,\rho_G\,(\Delta u)^2 + \rho_G|\Delta u|\left[\left(\tfrac{\gamma+1}{4}\right)^2(\Delta u)^2 + (c_D^{\mathrm{s}})^2\right]^{1/2}, \tag{4.4}$$

où p_D, ρ_D et c_D^{s} sont respectivement les pressions, densité et vitesse du son pre-choc. Dans le cas des gaz parfaits, la vitesse du son est $c_D^{\mathrm{s}} = \sqrt{\gamma\left(\frac{p_D}{\rho_D}\right)}$. La quantité Δu désigne le saut de vitesse. En utilisant la définition traditionnelle de la pseudo-viscosité [147], $q = p_G - p_D$, on obtient donc

$$q = \rho_D\, c_D^{\mathrm{s}}\,|\Delta u| + \rho_D\,\tfrac{\gamma+1}{4}\,(\Delta u)^2 + \mathcal{O}\,(\Delta u)^3,$$

dans la limite de choc faible où $\frac{|\Delta u|}{c_D^{\mathrm{s}}} \to 0$ et

$$q = \rho_D\,\tfrac{\gamma+1}{2}\,(\Delta u)^2 + \mathcal{O}\,(\Delta u)^3,$$

dans la limite de choc fort où $\frac{|\Delta u|}{c_D^{\mathrm{s}}} \to +\infty$ en une dimension d'espace. Le terme de pseudo-viscosité par maille q_c, utilisé dans cette thèse, est l'adaptation, sur maillage discret et en plusieurs dimensions d'espace, des deux expressions obtenues juste au dessus. Le respect des relations de saut de Rankine-Hugoniot est alors assuré par construction : point (iii) du cahier des charges (4.3). Le terme q_c s'écrit

$$q_c = \rho_c\, c_c^{\mathrm{s}}\, l_c\,|d_{\boldsymbol{x}} V_c| + \rho_c\,\tfrac{\gamma+1}{4}\,(l_c\, d_{\boldsymbol{x}} V_c)^2,$$

dans la limite de choc faible et

$$q_c = \rho_c\,\tfrac{\gamma+1}{2}\,(l_c\, d_{\boldsymbol{x}} V_c)^2,$$

dans la limite de choc fort. On voit que le produit $l_c\, d_{\boldsymbol{x}} V_c$ intervenant dans le terme q_c est notre équivalent du saut de vitesse Δu. Le terme $d_{\boldsymbol{x}} V_c$, détaillé plus tard, mesure localement le gradient de vitesse dans la direction du mouvement. La quantité l_c désigne une longueur caractéristique dans la maille c, telle que la longueur du plus petit côté ou le rayon du cercle inscrit par exemple. Contrairement au cas 1D, sa définition n'est pas évidente et elle sera donnée au moment de la présentation des résultats numériques dans le chapitre 5. À noter qu'une viscosité réelle ne dépend pas du maillage discret. Ici, il s'agit donc d'une viscosité artificielle dans laquelle on introduit la longueur l_c afin d'étaler le choc sur une distance de l'ordre de quelques mailles indépendamment de sa nature (choc fort ou faible) et quelle que soit l'équation d'état. Les expressions ci-dessus permettent l'étalement du choc sur une longueur d'approximativement quelques mailles. Ceci correspond au point (iv) du cahier des charges 4.3.

La pseudo-viscosité q_c est composée d'un terme linéaire $\rho_c\, c_c^{\mathrm{s}}\, l_c\,|d_{\boldsymbol{x}} V_c|$ et d'un terme quadratique $\rho_c\,\frac{\gamma+1}{4}\,(l_c\, d_{\boldsymbol{x}} V_c)^2$. Landshoff recommande en 1955 [55] de la définir comme la

somme de ces deux termes. Dans le cas de chocs forts où le terme linéaire est normalement négligeable, on s'aperçoit en pratique que prendre $\rho_c\, c_c^s\, l_c\, |d_{\boldsymbol{x}} V_c|$ fournit une dissipation trop importante. C'est pourquoi, un facteur $\frac{1}{2}$ est ajouté devant ce terme. De plus, Richtmyer, reprenant une idée qu'il attribue à Rosenbluth dans [56], suggère de désactiver la pseudo-viscosité dans les zones d'expansion. La définition du terme q_c, une fois ces observations prises en compte, devient

$$q_c = -\tfrac{1}{2}\,\rho_c\, c_c^s\, l_c \min\left(0\,, d_{\boldsymbol{x}} V_c\right) + \tfrac{\gamma+1}{4}\,\rho_c\, \left[l_c \min\left(0\,, d_{\boldsymbol{x}} V_c\right)\right]^2 . \tag{4.5}$$

Dans l'équation (4.5), on obtient que $q_c = 0$ lorsque $d_{\boldsymbol{x}} V_c > 0$, autrement dit en zones d'expansion. Pour des équations d'état convexes (comme c'est le cas pour les gaz parfaits), les ondes de choc se développent uniquement en zone de compression, soit lorsque $d_{\boldsymbol{x}} V_c < 0$, ce qui implique que le terme q_c n'est actif qu'en forte compression : le point (ii) du cahier des charges (4.3) est vérifié. Le terme quadratique intervenant dans l'équation (4.5) correspond à la dissipation d'énergie se produisant au niveau des ondes de choc (le terme est homogène à une énergie cinétique) tandis que le terme linéaire permet d'amortir les oscillations derrière le choc causées par la méthode numérique elle-même. En effet, la méthode est d'ordre 2 en espace et l'ajout du terme linéaire permet de dégénérer au premier ordre ($l_c \propto \Delta x$). En prenant en compte tout ce qui vient d'être fait, la définition de la pseudo-viscosité que l'on utilise dans la thèse est la suivante

Définition 4.1. *La pseudo-viscosité est définie par*

$$q_c = \underline{\mathcal{Q}}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = -\,q_1\,\rho_c\, c_c^s\, l_c\, \min\left(0\,, d_{\boldsymbol{x}} V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right) + \rho_c\, q_2\, \left[l_c\, \min\left(0\,, d_{\boldsymbol{x}} V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)\right]^2 , \tag{4.6}$$

où q_1 et q_2 sont les coefficients linéaire et quadratique, fixés par l'utilisateur et proche de l'unité. La mesure du terme d'expansion (trace du gradient de vitesse) est définie par

$$d_{\boldsymbol{x}} V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = \tfrac{1}{V_c} \sum_{p \in P(c)} \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{u}_p. \tag{4.7}$$

Remarque 4.1. *Contrairement à l'article CSTS [53], le terme de pseudo-viscosité est désactivée en détente.*

Remarque 4.2. *L'analyse faite dans cette sous-section 4.1.2 pour construire le terme de pseudo-viscosité permet d'obtenir les valeurs optimales pour les coefficients q_1 et q_2 dans le cas des gaz parfaits. En comparant avec la relation (4.5), on obtient $q_1 = 0.5$ et $q_2 = \frac{\gamma+1}{4}$. On se garde cependant le droit de les modifier légèrement suivant le cas test. Ces coefficients seront précisés au moment de la présentation des résultats dans le chapitre 5.*

De tous les points abordés dans le cahier des charges (4.3) mis en place dans la sous-section 4.1.1 précédente, il reste à vérifier (i). On doit s'assurer que la pseudo-viscosité q_c

de la définition 4.1 dissipe de l'énergie cinétique en chaleur et non l'inverse afin de respecter le second principe de la thermodynamique. Ce point est uniquement respecté à l'ordre 3 en temps, d'un pas de temps à l'autre, mais pas strictement. On rappelle maintenant l'expression du travail des forces de pseudo-viscosité $-\,q\,dV$ entre les instants $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$, intervenant dans les équations d'énergie interne de nos schémas :

$$\sum_{p\in P(c)} -q_c^n \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^n \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}.$$

Proposition 4.1. *Le travail discret des forces de pseudo-viscosité entre les instants $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$, intervenant dans les équations d'énergie interne de nos schémas conservatifs, est positif à l'ordre 3 en temps dans chaque maille, autrement dit*

$$-\,q_c^n\,d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}+\mathcal{O}\left(\Delta t^3\right)\geq 0,\forall c. \tag{4.8}$$

La définition de $d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]$ est donnée dans l'équation (4.7).

Démonstration. On considère une maille c quelconque. Si $d_{\boldsymbol{x}}V_c>0$ alors $q_c=0$ et le travail des forces de pseudo-viscosité est strictement nul dans cette maille. Aucune dissipation d'énergie cinétique en énergie n'a lieu. À présent, on suppose donc que $d_{\boldsymbol{x}}V_c<0$. Grâce à la définition 4.1, on écrit pour un champ de vitesse $\boldsymbol{u}_p$ donné

$$\begin{aligned}-\,q_c\,d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] &= -\,\underline{\mathcal{Q}}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\times d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\\ &= \rho_c\,c_c^{\mathrm{s}}\,l_c\,\left(d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)^2-\rho_c\,\tfrac{\gamma+1}{4}\,l_c^2\,\left(d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)^3.\end{aligned}$$

La densité ρ_c, la vitesse du son c_c^{s} et la longueur caractéristique l_c sont positifs par définition. Le terme quadratique en $d_{\boldsymbol{x}}V_c$ est donc positif. De plus, on a supposé que $d_{\boldsymbol{x}}V_c<0$, ce qui implique que $\left(d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)^3<0$. Le terme cubique en $d_{\boldsymbol{x}}V_c$ est également positif. On vient de montrer que le produit $-\,q_c\,d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]$ est strictement positif si la même vitesse intervient dans la définition de q_c et dans la définition de $d_{\boldsymbol{x}}V_c$, autrement dit

$$-\,\underline{\mathcal{Q}}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\times d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\geq 0. \tag{4.9}$$

Or, ce n'est pas la même vitesse qui intervient dans le terme de pseudo-viscosité $\underline{\mathcal{Q}}$ et dans $d_{\boldsymbol{x}}V_c$ puisqu'on souhaite rester explicite en temps : voir les sous-sections 2.5.3 et 2.4.3 consacrées au processus de prédiction/correction. Dans ce processus, la vitesse utilisée dans le calcul du terme de pseudo-viscosité est $\boldsymbol{u}_p^n=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)$, où $\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2}$ est la vitesse prédite. On a donc

$$\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)-\boldsymbol{u}_p^n=\mathcal{O}(\Delta t^2),$$

d'où

$$\begin{aligned}
&-\underline{\mathcal{Q}}\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]\times d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]\\
&\quad=-\underline{\mathcal{Q}}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^{n}\right\}\right]\times d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]+\mathcal{O}(\Delta t^2)\\
&\quad=-\,q_c^n\,d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]+\mathcal{O}(\Delta t^2)\geq 0.
\end{aligned}$$

Ceci prouve l'inégalité

$$-q_c^n\,d_{\boldsymbol{x}}V_c\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}+\mathcal{O}\left(\Delta t^3\right)\geq 0,$$

dans une maille c quelconque et conclut la preuve. □

La proposition précédente est la preuve de la partie concernant le terme de pseudo-viscosité dans l'hypothèse (A.13). Cette hypothèse a été faite lors de la démonstration des théorèmes 2.8 et 2.4.

On termine en donnant la définition de la pseudo-viscosité par matériau φ. En effet, ce terme est introduit et spécifié comme dépendant de chaque matériau dans le chapitre 2. On reprend simplement la définition 4.1 et on ajoute l'indice matériau φ.

$$\begin{aligned}
q_c^{\varphi}=\underline{\mathcal{Q}}^{\varphi}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]=-\,q_1\,\rho_c^{\varphi}\,c_c^{\mathrm{s}}\big|^{\varphi}\,l_c\,\min\left(0\,,d_{\boldsymbol{x}}V_c^{\varphi}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)\\
+\,\rho_c^{\varphi}\,q_2\,\left[l_c\,\min\left(0\,,d_{\boldsymbol{x}}V_c^{\varphi}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)\right]^2,
\end{aligned}\tag{4.10}$$

où q_1 et q_2 sont les coefficients linéaire et quadratique et

$$d_{\boldsymbol{x}}V_c^{\varphi}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]=\tfrac{1}{V_c^{\varphi}}\sum_{p\in P(c)}\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{\varphi}\cdot\boldsymbol{u}_p.\tag{4.11}$$

Finalement, le terme de pseudo-viscosité global, tout comme la pression, est obtenu avec la définition 2.6

$$q_c=\sum_{\varphi}f_c^{\varphi}\,q_c^{\varphi},$$

de façon cohérente avec l'hypothèse d'iso-déformation et de non-miscibilité. Chaque contrainte de pseudo-viscosité travaille séparément par matériau.

4.2 Terme d'anti-dérive

4.2.1 Origine des modes de déformations non physiques

Les méthodes lagrangiennes procédant à une sous-intégration des termes de pression (constants par maille), peuvent conduire à des distorsions anormales de la grille

en dimension 2 ou 3. Elles peuvent causer un arrêt prématuré des calculs lorsque les déformations deviennent trop importantes. Ces modes non physiques apparaissant dans la vitesse sont désignés par plusieurs termes dans la littérature : « modes d'anti-dérive », « hourglass modes » ou encore « zero-energy modes ». Ils sont dus au fait qu'une maille est sous-contrainte par rapport à son nombre total de degrés de liberté sur certains types de maillage (quadrangulaire en 2D ou hexaédrique en 3D par exemple). Considérons l'exemple du cas 2D plan. Les six mouvements linéaires $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_c + \boldsymbol{\nabla}\,\boldsymbol{u} \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c)$ pour une maille quadrangulaire [63, 84] sont décrits en figure 4.2 : deux (un pour chaque direction) pour la translation, un pour la détente (ou la compression), un pour la rotation et deux pour le cisaillement. Une maille quadrangulaire a huit degrés de liberté correspondant aux deux directions orthogonales du plan pour chaque nœud de la maille. Deux mouvements additionnels, correspondant aux modes d'anti-dérive s'ajoutent donc aux six décrits dans la figure 4.2. Ils sont présentés en figure 4.3 et sont communément appelés modes « sabliers ». En hydrodynamique plane, les modes de translation, de rotation et de cisaillement peuvent se produire physiquement sans effort. Les modes de détente et de compression font travailler la pression moyenne. Les modes sabliers font travailler localement les forces de pression mais pas la pression moyenne. Si seules ces forces de pression moyenne interviennent dans les équations du mouvement discrètes, comme c'est le cas dans les schémas lagrangiens classiques, ces modes peuvent se développer sans contrôle au niveau discret, conduisant à des distorsions de mailles non physiques.

De façon générale, les modes d'anti-dérive correspondent au noyau de l'opérateur de gradient discret du schéma auquel il faut enlever les modes de vitesse linéaires. C'est l'approche adoptée dans [84, 148] en géométrie plane et dans [85] en géométrie axisymétrique. Elle nécessite cependant le calcul explicite du noyau ce qui peut se révéler complexe, en particulier en géométrie axisymétrique et/ou sur des maillages distordus. C'est la raison pour laquelle cette approche ne sera pas retenue ici. On fait donc le choix d'être sur-dissipatif : une dissipation supplémentaire est apportée par le filtrage de modes ne faisant pas partie du noyau et donc ne correspondant pas à des modes d'anti-dérive. Pour des raisons de coûts de calcul, les méthodes introduisant plusieurs pressions par maille [63] ne sont également pas considérées ici. Dans tous les cas, quelle que soit la méthode de correction choisie, les termes d'anti-dérive, comme pour le terme de pseudo-viscosité, doivent respecter un cahier des charges :

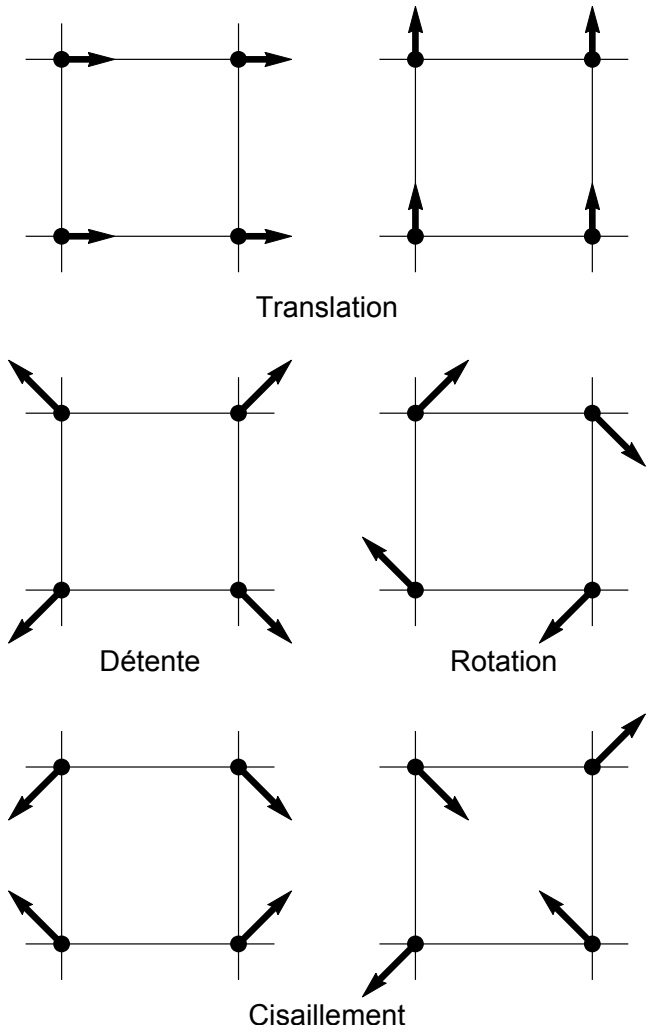


FIGURE 4.2 – Les six modes physiques pour une maille quadrangulaire en 2D plan. Les flèches représentent le vecteur vitesse défini aux nœuds de la maille.

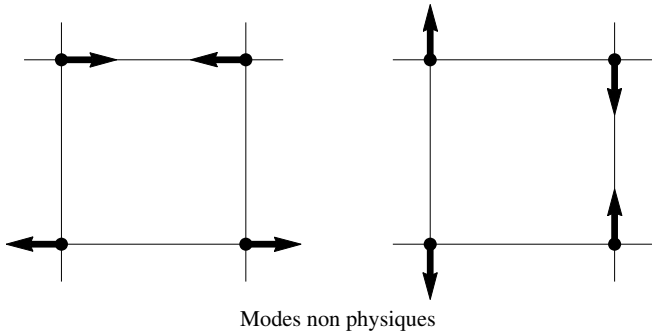


FIGURE 4.3 – Les deux modes non physiques pour une maille quadrangulaire en 2D plan appelés modes « sabliers ». Les flèches représentent le vecteur vitesse défini aux nœuds de la maille.

$$\begin{cases} (i) \text{ les termes d'anti-dérive ne doivent pas altérer la conservation de la quantité de mouvement sur la partie linéaire du champ de vitesse à l'échelle de la maille;} \\ (ii) \text{ les termes d'anti-dérive ne doivent pas altérer la conservation de l'énergie totale;} \\ (iii) \text{ les termes d'anti-dérive doivent être dissipatifs, autrement dit ils doivent respecter le second principe de la thermodynamique 1.6.} \end{cases} \tag{4.12}$$

Avant de commencer à détailler les trois types de corrections que l'on a considérés dans cette thèse, on fait remarquer qu'il est plus commode d'écrire les termes d'anti-dérive sous forme de force pour construire des schémas totalement conservatifs. C'est également le cas pour faire l'étude de la cohérence thermodynamique de nos schémas. C'est pourquoi on a introduit ces corrections sous cette forme dans le chapitre 2 : termes $\boldsymbol{f}_{cp}$. On rappelle que ces forces dépendent de la vitesse, de la position et de l'énergie interne spécifique et s'écrivent donc

$$\boldsymbol{f}_{cp} = \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\ ,\ \{\boldsymbol{x}_p\}\ , e_c\right].$$

Dans ce chapitre, comme dans les précédents, les dépendances en $\boldsymbol{x}_p$ et e_c sont omises de façon à simplifier les écritures. Les corrections d'anti-dérive sont construites de la même manière que les masses nodale m_p : on définit d'abord les forces de coin $\boldsymbol{f}_{cp}$ puis la force qui s'applique sur un nœud p quelconque est donnée par

$$\boldsymbol{f}_p = \sum_{c \in C(p)} \boldsymbol{f}_{cp}. \tag{4.13}$$

Cette dernière relation (4.13) permet de vérifier le point (ii) du cahier des charges (4.12). Pourvu que le bon travail soit ajouté dans l'énergie interne (ce qui est notre cas), il suffit en effet que les forces $\boldsymbol{f}_p$, s'appliquant sur un nœud p, soient décomposables sur les mailles $c \in C(p)$ pour ne pas altérer la conservation de l'énergie totale.

4.2.2 Corrections d'anti-dérive en vitesse

4.2.2.1 Principe

Appliquer la correction d'anti-dérive directement sur la vitesse est une manière robuste et simple de supprimer, ou du moins de limiter, les déformations anormales du maillage. C'est la technique utilisée par Chan [83] en 1975 par exemple.

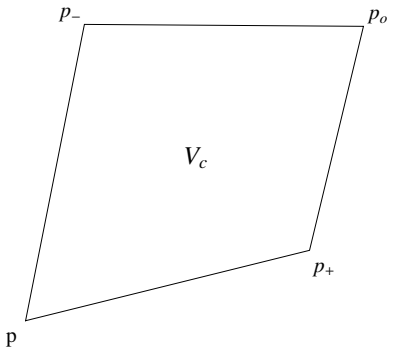


FIGURE 4.4 – Notations utilisées pour désigner les nœuds dans une maille c quelconque : exemple dans le cas où p est le nœud inférieur gauche dans la maille c.

Définition 4.2. *La correction d'anti-dérive en vitesse s'écrit*

$$\boldsymbol{u}_p \mathrel{-}= c_{\bar{\Phi}}\, \delta\boldsymbol{u}_p\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]. \tag{4.14}$$

Le coefficient $c_{\bar{\Phi}} \geq 0$ est un paramètre donné par l'utilisateur afin de contrôler l'amplitude de la correction. Ce coefficient est sans dimension et identique à tout instant et pour toute maille c.

Définition 4.3. *Les corrections $\delta\boldsymbol{u}_p$, telles que définies par Chan dans [83], sont données*

$$\delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = \boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p_o} - \boldsymbol{u}_{p_+} - \boldsymbol{u}_{p_-}, \tag{4.15}$$

$$\delta\boldsymbol{u}_p\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = \sum_{c\in C(p)} \delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right], \tag{4.16}$$

où le nœud p_+ est le nœud suivant p dans le sens trigonométrique dans la maille c, p_- est le nœud précédent p et p_o est le nœud opposé à p (voir figure 4.4).

Les corrections de la définition 4.3 sont les modes non linéaires décrits dans la figure 4.3 en géométrie plane et sur maillage régulier.

4.2.2.2 Propriétés

Afin de déterminer si une correction en vitesse respecte le cahier des charges (4.12), on écrit les forces $\boldsymbol{f}_{cp}$ à rajouter dans l'équation de quantité de mouvement pour obtenir la correction (4.14) de manière équivalente. Si on utilise le processus de prédiction/correction décrit dans 2.5.3 pour le schéma à masses nodales variables et en utilisant les mêmes

notations, ces forces sont définies par

$$\boldsymbol{f}_{cp}^{n-1/2} = \mathcal{F}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right\}\right] = -\frac{c_{\bar{\Phi}}}{\Delta t^n}\, m_p^{*n+1/2}\, \delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right\}\right], \tag{4.17a}$$

$$\boldsymbol{f}_{cp}^{n} = \mathcal{F}\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right] = -\frac{c_{\bar{\Phi}}}{\Delta t^n}\, m_p^{n+1/2}\, \delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\left\{\tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right]. \tag{4.17b}$$

On rappelle que $\Delta t^n = \frac{1}{2}\left(\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}\right)$ et que les masses nodales m_p sont associées au volume de contrôle V_p données par la définition 3.4. On montre que dans ce cadre, le respect du second principe de la thermodynamique et la conservation de la quantité de mouvement (points (i) et (iii) du cahier des charges (4.12)) ne sont pas assurés. En effet, on n'arrive pas à démontrer à l'échelle d'une cellule la contrainte d'entropie

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}\cdot\boldsymbol{u}_p = -\sum_{p\in P(c)} \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\cdot\boldsymbol{u}_p \geq 0, \tag{4.18}$$

car les corrections $\boldsymbol{f}_{cp}$ utilisent des masses nodales m_p qui sont sensibles aux déformations des cellules voisines de c. De même, la dépendance au nœud p des termes $\frac{c_{\bar{\Phi}}}{\Delta t^n}\, m_p$ dans les forces d'anti-dérive empêche d'écrire l'égalité

$$\sum_p \boldsymbol{f}_p = \boldsymbol{0}. \tag{4.19}$$

En effet, on a

$$\sum_p \boldsymbol{f}_p = \sum_p \sum_{c\in C(p)} \boldsymbol{f}_{cp} = \sum_c \sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp} \neq \sum_c K_c \sum_{p\in P(c)} \delta\boldsymbol{u}_{cp} = \boldsymbol{0},$$

où K_c est un facteur ne dépendant que de la maille c. En pratique, le non-respect de l'inégalité (4.18) implique une diminution drastique de la robustesse d'un schéma conservatif en énergie totale. Cela peut même empêcher de poursuivre les calculs jusqu'au temps final. En particulier, cette correction, introduite dans le schéma à masses nodales variables, ne permet pas de simuler jusqu'au temps final la compression isentropique de Kidder [149] sur un maillage perturbé : voir la section 5.3 du chapitre 5. Des énergies internes négatives, non physiques, interviennent en effet dans les premières itérations.

4.2.3 Corrections d'anti-dérive en force

4.2.3.1 Principe

Grâce à l'étude faite dans 4.2.2.2 pour déterminer les propriétés des corrections en vitesse, on peut aisément construire une autre correction permettant de retrouver les points

(i) et (iii) de notre cahier des charges 4.12. Cette correction s'écrit

$$\boldsymbol{f}_{cp} = \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = -\frac{c_{\bar{\Phi}}}{\Delta t^n}\, m_c\, \delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right], \tag{4.20}$$

où $\Delta t^n = \frac{1}{2}\left(\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}\right)$.

Remarque 4.3. *Comme expliqué dans la partie 4.2.1, on exprime directement la correction sous forme de force ce qui est plus commode pour montrer les propriétés de conservation et de cohérence thermodynamique des schémas du chapitre 2. On peut tout de même réécrire une relation du type (4.14). Le rapport de masse $\frac{m_c}{m_p}$ vient multiplier le coefficient $c_{\bar{\phi}}$ et l'amplitude des corrections n'est plus directement contrôlable par l'utilisateur.*

On remplace également le temps caractéristique $\frac{1}{\Delta t^n}$ présent dans la relation (4.20) par le rapport de la vitesse du son de la maille sur sa longueur caractéristique $\frac{c_c^s}{l_c}$: le temps caractéristique est en effet une quantité locale et il n'a pas à être identique pour toutes les mailles. Finalement, on obtient la définition suivante.

Définition 4.4. *La correction d'anti-dérive en force s'écrit*

$$\boldsymbol{f}_{cp} = \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = -c_{\bar{\Phi}}\, \frac{c_c^s}{l_c}\, m_c\, \delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right], \tag{4.21}$$

où toutes les notations sont introduites dans les définitions 4.2 et 4.3.

Les forces d'anti-dérive par matériau φ, introduites dans le chapitre 2, sont directement déduites de la définition 4.4

$$\boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi} = \mathcal{F}^{\varphi}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = -c_{\bar{\Phi}}\, \frac{c_c^s}{l_c}\, m_c^{\varphi}\, \delta\boldsymbol{u}_{cp}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right].$$

Elles respectent par construction la relation (2.24)

$$\boldsymbol{f}_{cp} = \sum_{\varphi} \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi}.$$

4.2.3.2 Propriétés

On rappelle que la conservation de l'énergie totale est assurée grâce à la relation (4.13). Comme annoncé au début de la sous-section 4.2.3, la correction construite ici n'altère pas la conservation de la quantité de mouvement et respecte le second principe de la thermodynamique à l'ordre du schéma : points (i) et (iii) du cahier des charges 4.12.

Proposition 4.2. *Les forces d'anti-dérive de la définition 4.4 vérifient la relation*

$$\sum_{p \in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp} = \boldsymbol{0}, \forall c. \tag{4.22}$$

Démonstration. On reprend les notations de la figure 4.4. On écrit tout d'abord que

$$\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp} = -c_{\bar{\Phi}} \frac{c_c^s}{l_c} m_c \sum_{p\in P(c)} \delta\boldsymbol{u}_{cp},$$

puis

$$\begin{aligned}\sum_{p\in P(c)} \delta\boldsymbol{u}_{cp} &= \delta\boldsymbol{u}_{cp} + \delta\boldsymbol{u}_{cp_+} + \delta\boldsymbol{u}_{cp_o} + \delta\boldsymbol{u}_{cp_-} \\ &= \underbrace{\boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p_o} - \boldsymbol{u}_{p_+} - \boldsymbol{u}_{p_-}}_{\delta\boldsymbol{u}_{cp}} + \underbrace{\boldsymbol{u}_{p_+} + \boldsymbol{u}_{p_-} - \boldsymbol{u}_{p_o} - \boldsymbol{u}_p}_{\delta\boldsymbol{u}_{cp_+}} \\ &\quad \underbrace{\boldsymbol{u}_{p_o} + \boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_{p_+} - \boldsymbol{u}_{p_-}}_{\delta\boldsymbol{u}_{cp_o}} + \underbrace{\boldsymbol{u}_{p_-} + \boldsymbol{u}_{p_+} - \boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_{p_o}}_{\delta\boldsymbol{u}_{cp_-}} \\ &= \mathbf{0}.\end{aligned}$$

□

Proposition 4.3. *Le travail discret des forces d'anti-dérive de la définition 4.4 est positif à l'ordre du schéma, autrement dit*

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}^n \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \geq 0. \tag{4.23}$$

Démonstration. On suit le raisonnement de la partie 4.2.2.2. On doit montrer la contrainte d'entropie (4.18) que l'on rappelle

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp} \cdot \boldsymbol{u}_p = -\sum_{p\in P(c)} \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] \cdot \boldsymbol{u}_p \geq 0,$$

lorsque les forces d'anti-dérive $\boldsymbol{f}_{cp}$ suivent la définition 4.4. On écrit tout d'abord que

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp} \cdot \boldsymbol{u}_p = c_{\bar{\Phi}} \frac{c_c^s}{l_c} m_c \sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{u}_{cp} \cdot \boldsymbol{u}_p.$$

Étant donné que $c_{\bar{\Phi}} \frac{c_c^s}{l_c} m_c$ est positif, on doit alors prouver que

$$\sum_{p\in P(c)} \delta\boldsymbol{u}_{cp} \cdot \boldsymbol{u}_p \geq 0.$$

Toujours avec les notations de la figure 4.4, on obtient

$$\sum_{p\in P(c)} \delta\boldsymbol{u}_{cp} \cdot \boldsymbol{u}_p = \delta\boldsymbol{u}_{cp} \cdot \boldsymbol{u}_p + \delta\boldsymbol{u}_{cp_+} \cdot \boldsymbol{u}_{p_+} + \delta\boldsymbol{u}_{cp_o} \cdot \boldsymbol{u}_{p_o} + \delta\boldsymbol{u}_{cp_-} \cdot \boldsymbol{u}_{p_-},$$

$$
\begin{aligned}
&= \delta\boldsymbol{u}_{cp} \cdot (\boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p_\circ}) + \delta\boldsymbol{u}_{cp_+} \cdot \left(\boldsymbol{u}_{p_+} + \boldsymbol{u}_{p_-}\right) \\
&\text{car } \delta\boldsymbol{u}_{cp} = \delta\boldsymbol{u}_{cp_\circ} \text{ et } \delta\boldsymbol{u}_{cp_+} = \delta\boldsymbol{u}_{cp_-} \\
&= (\boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p_\circ})^2 + \left(\boldsymbol{u}_{p_+} + \boldsymbol{u}_{p_-}\right)^2 - 2\ (\boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p_\circ}) \cdot \left(\boldsymbol{u}_{p_+} + \boldsymbol{u}_{p_-}\right), \\
&= \left(\boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p_\circ} - \boldsymbol{u}_{p_+} - \boldsymbol{u}_{p_-}\right)^2 \geq 0.
\end{aligned}
$$

Le fait de garder une équation de quantité de mouvement explicite implique que ce n'est pas la même vitesse qui intervient dans le calcul des forces d'anti-dérive et qui travaille effectivement : la vitesse centrée $\boldsymbol{u}_p^n = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)$ est utilisée dans le calcul des forces d'anti-dérive tandis que la vitesse centrée réelle $\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)$ travaille effectivement. Par définition de la vitesse prédite, la relation suivante est vérifiée

$$
\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right) - \boldsymbol{u}_p^n = \mathcal{O}(\Delta t^2).
$$

On a donc que

$$
\begin{aligned}
&- \sum_{p \in P(c)} \mathcal{F}\left[\left\{\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\right\}\right] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \\
&\qquad = - \sum_{p \in P(c)} \mathcal{F}\left[\left\{\boldsymbol{u}_p^n\right\}\right] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\
&\qquad = - \sum_{p \in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}^n \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \geq 0,
\end{aligned}
$$

ce qui conclut cette preuve. □

La proposition précédente concerne la partie impliquant les forces d'anti-dérive dans l'hypothèse (A.13). Bien que l'on ait accepté d'être sur-dissipatif, cette correction est trop dissipative. Elle affecte en effet les modes de vitesses linéaires qui ne sont clairement pas des modes d'anti-dérive et qui n'ont pas à être corrigés : voir la sous-section 4.2.1. Ceci est dû à l'utilisation des $\delta\boldsymbol{u}_{cp}$ dans la définition des forces $\boldsymbol{f}_{cp}$. Cet aspect sera illustré numériquement, commenté et expliqué sur le compression isentropique de Kidder [149] dans le chapitre 5. C'est pourquoi on considère dans cette thèse une troisième correction : corrections d'anti-dérive par filtrage inertiel.

4.2.4 Corrections d'anti-dérive par filtrage inertiel

4.2.4.1 Principe

La correction en force précédente respecte tous les points du cahier des charges 4.12. L'objectif ici est de construire une autre correction d'anti-dérive, moins dissipative, tout en gardant intactes toutes les propriétés démontrées précédemment. On reprend l'idée

développée par Van Renterghem et Llor dans [124], également utilisée dans [120]. Le principe de la méthode est de dissiper par maille, proportionnellement au carré de l'écart à une vitesse bien choisie, censée représenter les modes physiques. Cette vitesse linéaire est la projection sur les champs linéaires du champ de vitesse pour la norme de masse. En d'autres mots, l'énergie cinétique associée à cet écart de vitesse —correspondant à la dissipation supplémentaire apportée par les forces $\boldsymbol{f}_{cp}$—est minimisée.

On commence par des notations et définitions. Bien que la méthode soit valide pour tout type de mailles en 2D et 3D, on considère ici le cas 2D sur maillage quadrangulaire afin de fixer les notations. La présentation de la méthode est également faite en géométrie axisymétrique car seuls des résultats en géométrie axisymétrique sont montrés dans le chapitre 5. Le cas de la géométrie plane est identique et il suffit d'adapter les notations : x remplace z et y remplace r. On note p un nœud quelconque dans la maille puis p_+ est le nœud suivant p dans le sens trigonométrique, p_- est le nœud précédent p et p_o est le nœud opposé dans la maille c (voir la figure 4.4 pour la notation). On pose

$$\boldsymbol{u}^c = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_p \\ \boldsymbol{u}_{p_+} \\ \boldsymbol{u}_{p_\mathrm{o}} \\ \boldsymbol{u}_{p_-} \end{pmatrix}, z^c = \begin{pmatrix} z_p \\ z_{p_+} \\ z_{p_\mathrm{o}} \\ z_{p_-} \end{pmatrix} r^c = \begin{pmatrix} r_p \\ r_{p_+} \\ r_{p_\mathrm{o}} \\ r_{p_-} \end{pmatrix} \text{ et } \phi = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Définition 4.5. *On définit la norme associée à la masse locale $\tilde{M}^c$ dans une maille c par*

$$\|\boldsymbol{u}^c\|_M = \begin{cases} \displaystyle\sum_{p\in P(c)} m_{cp}\, \boldsymbol{u}_p^2, \text{ lorsque la matrice de masse est diagonale,} \\ \displaystyle\sum_{p,q\in P(c)} M^c_{pq}\, \boldsymbol{u}_p \cdot \boldsymbol{u}_q, \text{ lorsque la matrice de masse est non diagonale.} \end{cases} \tag{4.24}$$

On rappelle que les coefficients M^c_{pq} sont définis par la relation (4.32)

$$M^c_{pq} = \int_{c_0} \psi_p\, \psi_q\, dV.$$

Remarque 4.4. *La norme (4.24) définit automatiquement un produit scalaire $< \cdot, \cdot >$ associé à une matrice définie positive $\tilde{M}^c$:*

$$\|\boldsymbol{u}^c\|_M = < \tilde{M}^c\, \boldsymbol{u}^c\, , \boldsymbol{u}^c > . \tag{4.25}$$

D'après la définition 4.5, la masse locale $\tilde{M}^c$ pour nos deux schémas construits dans le

chapitre 2 prend la forme matricielle

$$\tilde{M}^{\mathrm{c,VNM}} = \begin{pmatrix} m_{cp} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_{cp_+} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{cp_\circ} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{cp_-} \end{pmatrix}, \tag{4.26a}$$

$$\tilde{M}^{\mathrm{c,CCNM}} = \begin{pmatrix} M^c_{pp} & M^c_{pp_+} & M^c_{pp_\circ} & M^c_{pp_-} \\ M^c_{p_+p} & M^c_{p_+p_+} & M^c_{p_+p_\circ} & M^c_{p_+p_-} \\ M^c_{p_\circ p} & M^c_{p_\circ p_+} & M^c_{p_\circ p_\circ} & M^c_{p_\circ p_-} \\ M^c_{p_-p} & M^c_{p_-p_+} & M^c_{p_-p_\circ} & M^c_{p_-p_-} \end{pmatrix}. \tag{4.26b}$$

On construit à présent la projection linéaire du champ de vitesse pour la norme définie en (4.24). Pour cela, on détermine les moments d'ordre 0 (ou moyenne) de la vitesse et des positions, notés respectivement $< \boldsymbol{u}^c >$, $< z^c >$ et $< r^c >$. Ensuite, les deux moments d'ordre 1 de la vitesse, notés $< \boldsymbol{u}^c >_z$ et $< \boldsymbol{u}^c >_r$, sont définis. Par construction, les moments d'ordre 0, qui appartiennent à l'espace engendré par ϕ, vérifient

$$\begin{aligned} &< \tilde{M}^c\,\phi\,,\phi >< \boldsymbol{u}^c >=< \tilde{M}^c\,\boldsymbol{u}^c\,,\phi >\,, \\ &< \tilde{M}^c\,\phi\,,\phi >< z^c >=< \tilde{M}^c\,z^c\,,\phi >\,, \\ &< \tilde{M}^c\,\phi\,,\phi >< r^c >=< \tilde{M}^c\,r^c\,,\phi >\,. \end{aligned}$$

Définition 4.6. *Les moment d'ordre* 0 *de la vitesse et des positions pour la norme de masse de la définition 4.5 sont*

$$< \boldsymbol{u}^c >=< \tilde{M}^c\,\boldsymbol{u}^c\,,\phi > / < \tilde{M}^c\,\phi\,,\phi >\,, \tag{4.27a}$$

$$< z^c >=< \tilde{M}^c\,z^c\,,\phi > / < \tilde{M}^c\,\phi\,,\phi >\,, \tag{4.27b}$$

$$< r^c >=< \tilde{M}^c\,r^c\,,\phi > / < \tilde{M}^c\,\phi\,,\phi >\,. \tag{4.27c}$$

Ces moments sont la projection de la vitesse $\boldsymbol{u}_p$, et des positions $\boldsymbol{x}_p$ sur les champs constants ϕ dans la maille c.

Remarque 4.5. *La notation* $< \tilde{M}^c\,\boldsymbol{u}^c\,,\phi >$ *intervenant dans l'équation* (4.27a) *est abusive dans le sens où cette quantité n'est pas un scalaire mais un tenseur d'ordre 1. Pour chacun de nos schémas, elle est définie par*

$$\begin{aligned} &< \tilde{M}^{c,VNM}\,\boldsymbol{u}^c\,,\phi >= \sum_{p\in P(c)} m_{cp}\,\boldsymbol{u}_p, \\ &< \tilde{M}^{c,CCNM}\,\boldsymbol{u}^c\,,\phi >= \sum_{p,q\in P(c)} M^c_{pq}\,\boldsymbol{u}_q. \end{aligned}$$

Le moment d'ordre 0 *de la vitesse* $< \boldsymbol{u}^c >$ *est donc également un tenseur d'ordre 1.*

On pose

$$\delta z^c = \begin{pmatrix} z_p - < z^c > \\ z_{p_+} - < z^c > \\ z_{p_\circ} - < z^c > \\ z_{p_-} - < z^c > \end{pmatrix} \text{ et } \delta r^c = \begin{pmatrix} r_p - < r^c > \\ r_{p_+} - < r^c > \\ r_{p_\circ} - < r^c > \\ r_{p_-} - < r^c > \end{pmatrix},$$

représentant l'écart à la moyenne du champ linéaire en position. Les moments d'ordre 1 de la vitesse, $< \boldsymbol{u} >_z$ et $< \boldsymbol{u} >_r$, vérifient quant à eux le système 2×2 définissant la projection de la vitesse sur l'espace engendré par δz^c et δr^c

$$\begin{pmatrix} < \tilde{M}^c \, \delta z^c \, , \delta z^c > & < M^c \, \delta z^c \, , \delta r^c > \\ < \tilde{M}^c \, \delta r^c \, , \delta z^c > & < M^c \, \delta r^c \, , \delta r^c > \end{pmatrix} \begin{pmatrix} < \boldsymbol{u}^c >_z \\ < \boldsymbol{u}^c >_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} < \tilde{M}^c \, \boldsymbol{u}^c \, , \delta z^c > \\ < \tilde{M}^c \, \boldsymbol{u}^c \, , \delta r^c > \end{pmatrix},$$

ce qui donne la définition suivante :

Définition 4.7. *Les moments d'ordre* 1 *de la vitesse sont donnés par*

$$\begin{pmatrix} < \boldsymbol{u}^c >_z \\ < \boldsymbol{u}^c >_r \end{pmatrix} = \delta M^{-1} \begin{pmatrix} < \tilde{M}^c \, \boldsymbol{u}^c \, , \delta z^c > \\ < \tilde{M}^c \, \boldsymbol{u}^c \, , \delta r^c > \end{pmatrix}, \tag{4.28}$$

où $\delta M = \begin{pmatrix} < \tilde{M}^c \, \delta z^c \, , \delta z^c > & < \tilde{M}^c \, \delta z^c \, , \delta r^c > \\ < \tilde{M}^c \, \delta r^c \, , \delta z^c > & < \tilde{M}^c \, \delta r^c \, , \delta r^c > \end{pmatrix}$.

Les moments d'ordre 1 sont la projection de la vitesse $\boldsymbol{u}_p$ sur les écarts à la moyenne des positions $\delta \boldsymbol{x}^c = \delta z^c \, \boldsymbol{e}_z + \delta r^c \, \boldsymbol{e}_r$.

Remarque 4.6. *La remarque 4.5 est valable pour les deux quantités* $< \tilde{M}^c \, \boldsymbol{u}^c \, , \delta z^c >$ *et* $< \tilde{M}^c \, \boldsymbol{u}^c \, , \delta r^c >$ *intervenant dans la définition 4.7. Ce sont donc des quantités désignant des tenseurs d'ordre 1 (au même titre que la vitesse* $\boldsymbol{u}$*). Le système* 2×2 *(4.28) est alors composé de deux égalités tensorielles. Cela revient à résoudre un système* 4×4 *composé de quatre équations scalaires : chaque équation tensorielle est équivalente à deux équations scalaires correspondant aux deux directions* $\boldsymbol{e}_z$ *et* $\boldsymbol{e}_r$*.*

On peut à présent définir la vitesse linéaire pour la norme de masse.

Définition 4.8. *La projection linéaire de la vitesse pour la norme de masse de la définition 4.5 est le champ* $\bar{\boldsymbol{u}}^c$ *défini par*

$$\bar{\boldsymbol{u}}^c = < \boldsymbol{u}^c > \phi \; + \; < \boldsymbol{u}^c >_z \; \delta z^c + \; < \boldsymbol{u}^c >_r \; \delta r^c. \tag{4.29}$$

Cette projection linéaire intervient dans le potentiel de dissipation.

Définition 4.9. *On définit le potentiel de dissipation local* Q^c *par*

$$Q^c = \tfrac{1}{2} \; < \tilde{M}^c \; (\boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c) \; , \boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c > . \tag{4.30}$$

On retrouve la force locale associée à ce potentiel Q^c en dérivant par rapport à la vitesse $\boldsymbol{u}^c$ à position fixée. On obtient

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q^c}{\partial \boldsymbol{u}^c} &= \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c\right) - < \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c\right), \frac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}^c}{\partial \boldsymbol{u}^c} > \\ &= \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c\right),\end{aligned}$$

car $\frac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}^c}{\partial \boldsymbol{u}^c}$ est dans l'espace des champs linéaires et est donc orthogonale à la vitesse $\boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c$, soit $< \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c\right), \frac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}^c}{\partial \boldsymbol{u}^c} >= 0$.

Définition 4.10. *Dans une maille c quadrangulaire quelconque, les forces d'anti-dérive associées au potentiel Q^c de la définition 4.9 sont données par*

$$\boldsymbol{f}^c = \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = -c_{\bar{\Phi}} \frac{c_c^s}{l_c} \frac{\partial Q^c}{\partial \boldsymbol{u}^c}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right] = -\frac{c_c^s}{l_c} \tilde{M}^c \delta\boldsymbol{u}^c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right], \tag{4.31}$$

où $\boldsymbol{f}^c = {}^t\left(\boldsymbol{f}_{cp}, \boldsymbol{f}_{cp_+}, \boldsymbol{f}_{cp_o}, \boldsymbol{f}_{cp_-}\right)$ et $\delta\boldsymbol{u}^c = \boldsymbol{u}^c - \bar{\boldsymbol{u}}^c$ est l'écart à la vitesse linéaire. Le coefficient $c_{\bar{\Phi}}$ contrôle l'amplitude de la correction par filtrage inertiel.

Ici, la matrice de masse remplace la matrice de raideur (opérateur de gradient discret) ce qui constitue la nouveauté de l'approche par rapport à [85] pour le cas axisymétrique. Contrairement à cette dernière, la matrice de masse est en effet directement disponible : le calcul des masses est requis pour le passage dans l'équation de quantité de mouvement. De plus, comme on l'a évoqué dans la sous-section 4.2.1, le fait d'utiliser la matrice de raideur revient à calculer le noyau de l'opérateur de gradient discret ce qui peut se révéler complexe en géométrie axisymétrique et/ou sur des maillages distordus. La considération de la matrice de masse simplifie grandement le calcul. On reste donc sur-dissipatif : le filtrage inertiel filtre toujours des modes ne correspondant pas à des modes d'anti-dérive, soit n'appartenant pas au noyau de l'opérateur de gradient discret. Cependant, l'écart à la vitesse linéaire $\delta\boldsymbol{u}^c$ remplace ici les modes $\delta\boldsymbol{u}_{cp}$ sur maillage régulier et en géométrie plane. Les forces (4.31) limitent donc les modes de vitesse correspondant à ces écarts. Par construction, les modes de vitesse linéaires ne sont donc pas affectés contrairement aux deux corrections précédentes. En ce sens, on contrôle la dissipation apportée par le filtrage inertiel : les modes qui ne devraient pas être corrigés sont des résidus à l'ordre de nos schémas et peuvent donc être négligés. La vitesse linéaire $\bar{\boldsymbol{u}}^c$ est calculée de façon à minimiser le potentiel Q^c correspondant à l'énergie cinétique associée à la vitesse $\delta\boldsymbol{u}^c$.

Finalement, il reste à construire la correction par filtrage inertiel pour chaque matériau φ à partir de la définition 4.10. Cela passe par une matrice de masse $\tilde{M}^{\varphi,c}$ locale par matériau φ. Les masses de coin m_{cp}^{φ} sont définies par la relation (2.72a)

$$m_{cp}^{\varphi} = \frac{V_{cp}}{V_c} m_c^{\varphi}.$$

et permettent de définir $\tilde{M}^{\varphi,c}$ avec la relation (4.26a). Concernant le schéma CCNM, on

considère la matrice de masse locale $\tilde{M}^c$ utilisée dans l'assemblage de la matrice de masse complète $\tilde{M}$. La matrice de masse locale $\tilde{M}^c$ est formée des coefficients M^c_{pq}

$$M^c_{pq} = \int_{c_0} \rho_0 \, \psi_p \, \psi_q \, dV_0, \tag{4.32}$$

où c_0 est la maille c dans sa configuration initiale. Ensuite, on construit successivement

1. les coefficients $M^{\varphi,c}_{pq}$ grâce à la fraction massique

$$M^{\varphi,c}_{pq} = \tfrac{m^\varphi_c}{m_c} \, M^c_{pq} = \tfrac{m^\varphi_c}{m_c} \int_{c_0} \psi_p \, \psi_q \, dV; \tag{4.33}$$

2. la matrice de masse locale $\tilde{M}^{\varphi,c}$ par matériau φ et formée des coefficients $M^{\varphi,c}_{pq}$.

Finalement, les forces partielles pour la filtrage inertiel sont

$$\boldsymbol{f}^{\varphi,c} = -c_\Phi \tfrac{c^{\mathrm{s}}_c}{l_c} \, \tilde{M}^{\varphi,c} \, \delta\boldsymbol{u}^c \, [\{\boldsymbol{u}_p\}], \tag{4.34}$$

où $\boldsymbol{f}^{\varphi,c} = {}^{\mathrm{t}}\left(\boldsymbol{f}^\varphi_{cp} \, , \, \boldsymbol{f}^\varphi_{cp_+} \, , \, \boldsymbol{f}^\varphi_{cp_\circ} \, , \, \boldsymbol{f}^\varphi_{cp_-} \right)$. Avec la définition précédente, on retrouve la relation (2.24) si on somme les forces partielles $\boldsymbol{f}^\varphi_{cp}$ sur les matériaux φ

$$\boldsymbol{f}_{cp} = \sum_\varphi \boldsymbol{f}^\varphi_{cp}.$$

Remarque 4.7. *Le fait de considérer les forces d'anti-dérive comme dérivant d'un potentiel est en accord avec l'approche variationnelle utilisée pour construire les schémas du chapitre 2.*

Remarque 4.8. *Les forces de la définition 4.4 dérivent également d'un potentiel. Les démonstrations de la conservation de la quantité de mouvement et le respect du second principe des corrections en force peuvent donc s'écrire en utilisant l'invariance par translation de ce potentiel et sa positivité.*

Remarque 4.9. *Dans le cas où la matrice de masse est diagonale, les corrections par filtrage inertiel, en omettant l'indice matériau, peuvent se mettre sous la forme condensée*

$$\boldsymbol{x}_c = \left(\sum_{p \in P(c)} m_{cp} \, \boldsymbol{x}_p \right) \Big/ \sum_{p \in P(c)} m_{cp} \, , \qquad \boldsymbol{u}_c = \left(\sum_{p \in P(c)} m_{cp} \, \boldsymbol{u}_p \right) \Big/ \sum_{p \in P(c)} m_{cp} \, ,$$

$$\delta\boldsymbol{x}_{cp} = \boldsymbol{x}_p - \boldsymbol{x}_c \, , \qquad \delta\boldsymbol{u}_{cp} = \boldsymbol{u}_p - \boldsymbol{u}_c \, ,$$

$$\mathsf{J}_c = \sum_{p \in P(c)} m_{cp} \, \delta\boldsymbol{x}_{cp} \otimes \delta\boldsymbol{x}_{cp} \, , \qquad \Sigma_c = \sum_{p \in P(c)} m_{cp} \, \delta\boldsymbol{u}_{cp} \otimes \delta\boldsymbol{x}_{cp} \cdot \left(\mathsf{J}_c\right)^{-1} \, ,$$

$$\bar{\boldsymbol{u}}_{cp} = \boldsymbol{u}_c + \Sigma_c \cdot \delta\boldsymbol{x}_{cp} \, , \qquad \boldsymbol{f}_{cp} = -c_\Phi \tfrac{c_c}{\ell_c} \, m_{cp} \, \left(\boldsymbol{u}_p - \bar{\boldsymbol{u}}_{cp} \right).$$

4.2.4.2 Propriétés

On s'intéresse ici aux propriétés des forces d'anti-dérive construites dans la définition 4.10. La conservation de l'énergie totale étant assurée par construction grâce à la relation (4.13), on regarde les deux autres points du cahier des charges (4.12). Concernant la conservation de la quantité de mouvement, on a la proposition suivante.

Proposition 4.4. *Les forces d'anti-dérive de la définition 4.10 vérifient la relation*

$$\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp} = \boldsymbol{0}, \forall c. \tag{4.35}$$

C'est un cas particulier de l'invariance galiléenne (qui contient également la conservation du moment cinétique non abordée ici).

Démonstration. On écrit

$$\begin{aligned}\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}\cdot\boldsymbol{e}_z &= -\tfrac{c_c^{\mathrm{s}}}{l_c}\sum_{p\in P(c)} \tfrac{\partial Q^c}{\partial \boldsymbol{u}_p}\cdot\boldsymbol{e}_z \\ &= -\tfrac{c_c^{\mathrm{s}}}{l_c}\lim_{\varepsilon\to 0}\left(Q^c\left[\{\boldsymbol{u}_p+\varepsilon\,\boldsymbol{e}_z\}\right]-Q^c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\right)/\varepsilon \\ &= 0,\end{aligned}$$

car $Q^c\left[\{\boldsymbol{u}_p+\varepsilon\,\boldsymbol{e}_z\}\right] = Q^c\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]$ par invariance, à géométrie fixée, du potentiel de dissipation Q^c lors d'une translation axiale (qui n'agit que sur la dépendance en vitesse de Q^c). L'égalité de la proposition 4.4 est démontrée pour la composante axiale. Le même raisonnement permet de conclure sur le résultat pour la composante radiale. □

Le point (iii) du cahier des charges (4.12) est également vérifié à l'ordre du schéma tout comme pour le terme de pseudo-viscosité (hypothèse (A.13)).

Proposition 4.5. *Le travail discret des forces d'anti-dérive définies dans la relation (4.31) est positif à l'ordre du schéma car il dérive d'un « potentiel de dissipation » [150], autrement dit*

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}^n\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}+\mathcal{O}(\Delta t^3)\geq 0. \tag{4.36}$$

Démonstration. De la même manière que lors de la démonstration de la proposition 4.1, on montre tout d'abord que la contrainte (4.18) est respectée pour les forces (4.31), soit

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}\cdot\boldsymbol{u}_p = -\sum_{p\in P(c)} \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\cdot\boldsymbol{u}_p \geq 0,$$

lorsque la vitesse qui travaille effectivement est celle qui intervient dans le calcul des forces $\boldsymbol{f}_{cp}$. Il suffit d'écrire

$$\begin{aligned} -\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}\cdot\boldsymbol{u}_p &= -\sum_{p\in P(c)} \mathcal{F}\left[\{\boldsymbol{u}_p\}\right]\cdot\boldsymbol{u}_p \\ &= \tfrac{c_c^{\mathrm{s}}}{l_c}\sum_{p\in P(c)} \tfrac{\partial Q^c}{\partial \boldsymbol{u}_p}\cdot\boldsymbol{u}_p \\ &= \tfrac{c_c^{\mathrm{s}}}{l_c} < \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c-\bar{\boldsymbol{u}}^c\right), \boldsymbol{u}^c > \\ &= \tfrac{c_c^{\mathrm{s}}}{l_c} < \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c-\bar{\boldsymbol{u}}^c\right), \boldsymbol{u}^c-\bar{\boldsymbol{u}}^c > , \end{aligned}$$

car la vitesse $\bar{\boldsymbol{u}}^c$ est orthogonale au résidu $\boldsymbol{u}^c-\bar{\boldsymbol{u}}^c$ soit $< \tilde{M}^c\left(\boldsymbol{u}^c-\bar{\boldsymbol{u}}^c\right), \bar{\boldsymbol{u}}^c >= 0$. On en déduit que

$$-\sum_{p\in P(c)} \boldsymbol{f}_{cp}\cdot\boldsymbol{u}_p = 2\,\tfrac{c_c^{\mathrm{s}}}{l_c}\,Q \;\geq\; 0.$$

Pour les mêmes raisons que celles données dans la fin de la preuve de la proposition 4.3, le respect de la contrainte d'entropie permet de conclure l'inégalité (4.36). □

Grâce à l'invariance affine des masses de coin, on note enfin que les corrections apportées par le filtrage inertiel sont également des invariants affines, tout comme les modes d'anti-dérive.

4.3 Conclusion du chapitre

Dans un schéma conservatif en énergie totale, la construction des termes dissipatifs est cruciale. En particulier, une erreur sur la formulation des forces d'anti-dérive peut conduire à un viol du second principe de la thermodynamique, et par extension, à une perte de robustesse. La construction classique du terme de pseudo-viscosité scalaire de von Neumann et Richtmyer [1], associé à la suggestion de Landshoff [55] pour le terme linéaire, est décrite dans ce travail. Une formulation plus complexe de ce terme peut être incorporée, sans difficulté, aux schémas du chapitre 2 mais cela dépasse le cadre de cette thèse. On pense en particulier à un terme de pseudo-viscosité tensorielle [58, 64, 81, 82, 151], à l'hyper-viscosité [152, 153] ou à un pseudo-flux de chaleur [154]. On note également qu'un terme de pseudo-viscosité peut être dérivé à l'aide des solveurs de Riemann [155, 156].

Les forces d'anti-dérive par filtrage inertiel respectent toutes les contraintes requises dans cette thèse. En particulier, le fait de considérer l'écart à une vitesse linéaire dans ces forces permet de ne pas perturber les modes de vitesse linéaire—qui ne sont clairement pas des modes d'anti-dérive—et de limiter la dissipation associée. C'est pourquoi le filtrage inertiel est la correction d'anti-dérive choisi dans cette thèse. Les résultats des chapitres 5

et 7 sont présentés avec cette correction (une comparaison avec les deux autres corrections décrites dans ce chapitre est tout de même effectuée sur la compression isentropique de Kidder [149]).

Chapitre 5

Résultats numériques lagrangiens en géométrie axisymétrique

Ce chapitre est consacré à la comparaison, en géométrie axisymétrique, des solutions de nos deux schémas avec les solutions de références sur différents cas test usuels de la littérature. L'impact du choix concernant la matrice de masse est également étudié. Les propriétés de conservation et de cohérence thermodynamique obtenues théoriquement dans le chapitre 2 sont validées numériquement.

5.1 Généralités

Schémas présentés Dans ce chapitre, les résultats sont regroupés par cas test et chaque section s'organise de la manière suivante : (i) une présentation du cas est faite ; (ii) une solution de référence est décrite ; (iii) les résultats sont donnés sous forme de profil (tous les nœuds sont représentés) et de carte de densité pour les schémas VNM et CCNM ; et (iv) ces résultats sont comparés entre eux et avec un schéma lagrangien décalé STS. Ce schéma STS est non conservatif en énergie totale et possède une formulation « area-weighted » de la quantité de mouvement. Autrement dit les quantités géométriques sont intégrées avec la surface infinitésimal dA et non le volume infinitésimale dV. Le schéma STS sert donc de référence pour la préservation des symétries et de point de comparaison pour la capture des chocs forts. Le tableau 5.1 regroupe tous les cas test présentés ici ainsi que les paramètres utilisés.

Calcul du pas temps En l'absence d'étude détaillée de stabilité, le pas de temps est contrôlé par la condition CFL [157] hyperbolique classique faisant intervenir la longueur caractéristique $l_c = \sqrt{A_c}$ et la vitesse du son c_c^{s} dans la maille c

$$\Delta t^{n+1/2} = \mathrm{CFL} \times \min_c \left(\frac{l_c}{c_c^{\mathrm{s}}} \right). \tag{5.1}$$

La vitesse du son est globalisée suivant la compressibilité isentrope sous l'hypothèse d'iso-déformation

$$c_c^{\mathrm{s}} = \sqrt{\sum_{\varphi} \frac{m_c^{\varphi}}{m_c} \left(c_c^{\mathrm{s},\varphi}\right)^2}. \tag{5.2}$$

Le choix de la longueur l_c fait ici est différent de celui effectué dans l'article [53] et n'est pas adapté aux mailles en « aiguilles » au niveau de l'origine sur un maillage polaire. Cette longueur caractéristique ne tire également pas avantage des symétries connues (plane ou sphérique) pour les cas tests présentés. Afin d'éviter l'introduction d'autres paramètres, ce pas de temps n'est pas limité par d'autres conditions telles que une variation maximum de volume ou un taux maximum d'augmentation.

En suivant la relation (5.1), les pas de temps dépendent donc de l'historique de la solution numérique et des possibles singularités du schéma qui sont évidemment différentes d'un schéma ou d'un cas test à l'autre. Lorsque cela est possible, autrement dit lorsque la solution analytique est connue, on définit une incrémentation du pas de temps identique pour tous nos schémas (à coefficient CFL fixé) basée sur la solution exacte. Ce calcul (désigné par « an. » dans le tableau 5.1) est défini par

$$\Delta t = \mathrm{CFL} \times \frac{\Delta x_0}{c_{\mathrm{eff}}}, \tag{5.3}$$

où la vitesse du son effective c_{eff} correspond à la vitesse du son maximale dans le domaine de calcul et pour tout temps $0 \leq t \leq t_f$. Elle est déterminée avec la solution analytique (disponible ici seulement pour les cas test de Sod [145] plan, de Kidder [149] et de Noh [154]). Les détails sur son calcul seront donnés au moment de la présentation de ces trois cas. La quantité Δx_0 est définie sur le maillage initial et est égale à la longueur de la première maille, soit la maille connectée à l'origine, dans la direction de propagation (connue) des ondes.

Sans constituer une preuve de stabilité, on peut montrer pour le schéma CCNM que l'équation (5.1) devient

$$\Delta t^{n+1/2} = \sqrt{\lambda_{\min}}\, \mathrm{CFL} \times \min_c \left(\frac{l_c}{c_c^{\mathrm{s}}}\right), \tag{5.4}$$

où $\lambda_{\min}$ est la valeur propre minimum, en valeur absolue, de la matrice de masse constante non diagonale pré-conditionnée par la matrice de masse variable et diagonale du schéma VNM. Une étude numérique sur certains cas tests présentés ici montre que $\lambda_{\min}$ varie autour de $\simeq \frac{1}{4}$. Le coefficient CFL pour le schéma CCNM est alors divisé par 2 par rapport au schéma VNM. La relation (5.4) est vérifiée numériquement sur le cas test de Sedov [158] en sous-section 7.4.3. Ceci explique les faibles coefficients CFL choisis dans le tableau 5.1 pour certains cas tests. Ces coefficients sont plus raisonnables—de l'ordre de $\simeq 0.3$—si on considère uniquement le schéma à masses nodales variables. Une seconde raison explique

les faibles coefficients CFL lorsque le pas de temps est déterminé par la condition (5.3). Cette condition est en effet basée sur la solution analytique et ne prend donc pas en compte les éventuelles singularités du schéma, telles que la perte de symétrie par exemple. Les valeurs de « CFL analytiques » retenues ici sont donc le plus souvent deux à quatre fois plus faible que celles utilisées dans [53] sur les tests analogues du schéma CSTS.

Corrections d'anti-dérive Les cas nécessitant des corrections d'anti-dérive sont présentés avec le filtrage inertiel (sous-section 4.2.4). Des comparaisons avec les corrections en force (sous-section 4.2.3) sont effectuées pour la compression isentropique de Kidder afin d'illustrer la supériorité du filtrage inertiel. Elles sont réalisées à dissipation équivalente, autrement dit le coefficient utilisateur $c_{\bar{\Phi}}$ des corrections en force est adapté pour que la dissipation globale apportée par ces corrections soit la même au temps final. Dans le cas du schéma à masse constante et non diagonale, le facteur $\lambda_{\min}$ apparaît dans le choix du coefficient $c_{\bar{\Phi}}$ si on veut obtenir une dissipation équivalente avec le schéma à masses nodales variables. Le coefficient utilisateur est donc fixé à

$$c_{\bar{\Phi}}^{\text{CCNM}} = \lambda_{\min}\, c_{\bar{\Phi}}^{\text{VNM}}, \tag{5.5}$$

conduisant à un coefficient environ 4 fois plus grand pour le schéma CCNM.

Géométrie Tous les calculs sont effectués en 2D axisymétrique sur maillages polaires équi-angulaires et/ou cartésiens. L'axe des abscisses (resp. l'axe des ordonnées) correspond donc, dans notre cas, à l'axe (Oz) (resp. à l'axe (Or)) du système des coordonnées cylindriques. Tous les cas sont exprimés dans le système d'unité CGS. Concernant les écoulements sphériques sur maillage polaire, la perte du caractère 1D génère des ondes se propageant dans la direction orthogonale à la direction sphérique. À l'origine, où les mailles deviennent des aiguilles, autrement dit où l_c tend vers 0, cela conduit à une baisse drastique du coefficient CFL, en particulier avec le choix de la longueur caractéristique effectué dans le calcul du pas de temps. Pour éviter cela, un mur est alors ajouté en $r^s = \sqrt{z^2 + r^2} = 0.025$ supprimant les mailles telles que $r^s < 0.025$. Le profil de densité dans la compression isentrope en amont du choc est donc déformé par rapport au cas test de Noh. De plus, la position de l'onde de choc est également décalée vers la droite, l'onde de choc se formant et partant de r^s et non de l'origine.

Conservation des quantités Enfin, la conservation de la masse, de la quantité de mouvement axiale et de l'énergie totale est obtenue à la précision machine, avec des erreurs de l'ordre de $\simeq 10^{-14}$ maximum, sur tous les cas tests. Un suivi de l'erreur en énergie totale est effectué dans le cas de l'onde de choc sphérique de Sedov.

Cas tests	**Figures illustrant l'état initial**	γ	**Termes dissipatifs**	**Maillage Taille Domaine**	**Temps final** / **CFL**
Sod [145] plan	5.1	$\frac{7}{5}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	cartésien 100×4 sur $[0,1] \times [0,0.04]$	0.2 0.1 an.
Sod [145] sphérique	5.2	$\frac{7}{5}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	polaire 10×100 et 20×200 sur un quart du disque unitaire	0.2 0.1
Kidder [149] sphérique	5.8	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0$ $q_2 = 0$ ⋆ $c_{\bar{\Phi}} = 1$	polaire 13×8, 25×15, 50×30 et 100×60 sur le quart supérieur droit d'une coquille d'épaisseur 0.1	90 % de τ 0.3 an.
Kidder [149] sphérique	5.8	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0$ $q_2 = 0$ ⋆ $c_{\bar{\Phi}} = 1$	polaire et perturbé 25×15 sur le quart supérieur droit d'une coquille d'épaisseur 0.1	99 % de τ 0.3 an.
Noh [154] plan	5.12 $p_0 = 10^{-14}$	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	cartésien 100×4 sur le domaine $[0,1] \times [0,0.04]$	0.6 0.1 an.
Noh [154] sphérique	5.14 $p_0 = 10^{-14}$	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = \frac{2}{5}(\gamma+1)$ ⋆ $c_{\bar{\Phi}} = 1$	cartésien 50×50 sur le carré unité	0.6 0.1 an.
Noh [154] sphérique	5.13 $p_0 = 10^{-14}$	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	polaire 10×100, 15×150 et 20×200 sur un quart du disque unitaire	0.6 0.1 an.
Sedov [158–160] sphérique	5.22 $p_0 = 10^{-14}$ Énergie interne déposée sur la maille à l'origine	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 2$	cartésien 50×50, 100×100 et 200×200 sur le carré $[0,1.2] \times [0,1.2]$	1 0.3

TABLE 5.1 – Tableau récapitulatif des cas tests effectués pour les schémas lagrangiens en géométrie axisymétrique. Les coefficients q_1 et q_2 sont associés respectivement aux termes linéaire et quadratique de la pseudo-viscosité. ⋆ Le choix du coefficient quadratique q_2 est différent de celui effectué dans l'article CSTS [53].

5.2 Tube à choc de Sod

5.2.1 Présentation des cas test

5.2.1.1 Tube à choc de Sod plan

Le tube à choc de Sod [145] est un des cas classiques présentés dans la littérature pour valider le comportement d'un schéma numérique pour l'hydrodynamique. On considère un domaine rectangulaire $[0,Z] \times [0,R]$, où $Z = 1$ et $R = 0.04$, constitué d'un gaz parfait de constante adiabatique γ. La discontinuité initiale est en $z_d = 0.5$ générant les trois ondes qui se propagent dans la direction $\boldsymbol{e}_z$, sans aucun mouvement radial, autrement dit suivant $\boldsymbol{e}_r$. De la plus lente à la plus rapide, ces trois ondes sont : une détente, une discontinuité de contact et une onde de choc relativement faible. Ce problème, en plus de posséder une symétrie d'axe (Oz), a donc aussi une symétrie radiale et les quantités sont également indépendantes de r. Bien que ce cas test ne mette pas en avant de manière significative les avantages liés à la conservation de l'énergie totale, il est communément présenté lors de la validation de nouveaux schémas pour l'hydrodynamique lagrangienne. Ce cas nous permet également de valider le résultat obtenu dans le chapitre 3, justifiant ainsi le choix de la masse nodale m_p. Les conditions initiales et les conditions aux limites sont affichés dans la figure 5.1.

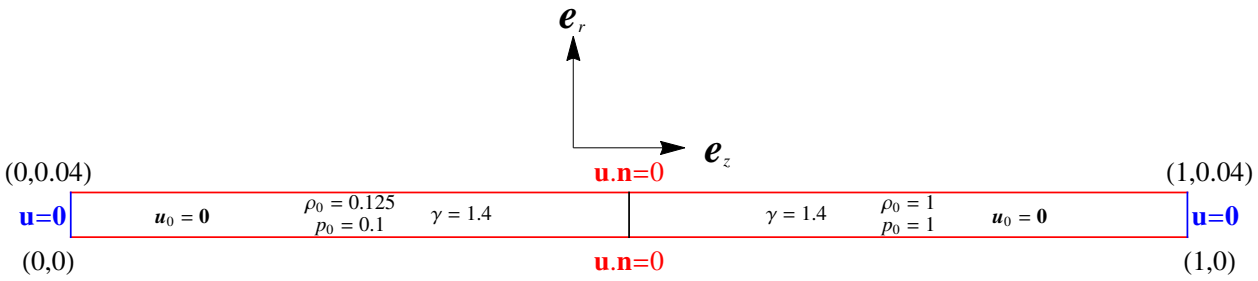


FIGURE 5.1 – Tube à choc de Sod plan en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites.

5.2.1.2 Tube à choc de Sod sphérique

Dans une sphère de rayon $R^s = 1$, on considère un gaz parfait de constante adiabatique γ. Lorsque le rayon $r^s = \sqrt{z^2 + r^2} < 0.5$, on fixe à $t = 0$, $p_0 = 0.1$, $\rho_0 = 0.125$ et $p_0 = 1$, $\rho_0 = 1$ sinon. La vitesse est initialisée à 0 dans les deux directions sur le domaine. À $t = 0$, trois ondes sphériques identiques au cas plan se forment dû à la discontinuité en $r^s = 0.5$ et se dirigent vers le centre de la sphère. Les conditions initiales et les conditions aux limites sont résumées dans la figure 5.2.

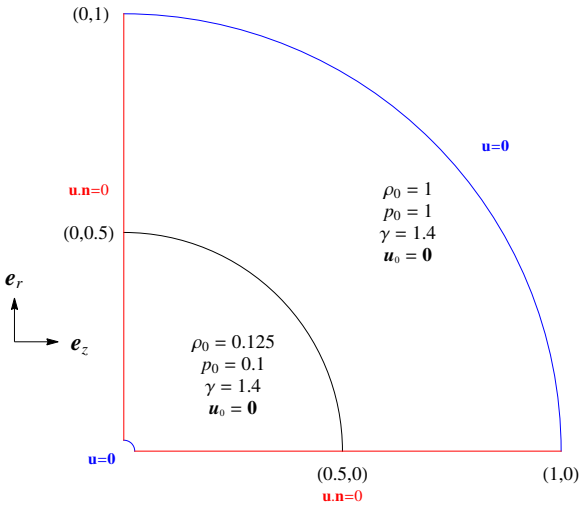


FIGURE 5.2 – Tube à choc de Sod sphérique en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites.

5.2.2 Solution de référence

Il existe une solution analytique pour le cas test de Sod plan qui est issue de [145] :

$$\rho_{\text{exacte}}(t,z) = \begin{cases} \rho_{\text{L}} \ \text{ si } \ z - z_d < \sigma_{\text{L}} t, \\ \rho_{\text{L,exp}}(t,z) \ \text{ si } \ z - z_d \geq \sigma_{\text{L}} t, \ \text{ et } \ z - z_d < \sigma_{\text{R}} t, \\ \rho^{\star}_{\text{L}} \ \text{ si } \ z - z_d \geq \sigma_{\text{R}} t \ \text{ et } \ z - z_d < u^{\star} t, \\ \rho^{\star}_{\text{R}} \ \text{ si } \ z - z_d \geq u^{\star} t \ \text{ et } \ z - z_d < S_{\text{R}} t, \\ \rho_{\text{R}} \ \text{ si } \ z - z_d \geq S_{\text{R}} t, \end{cases} \tag{5.6a}$$

$$p_{\text{exacte}}(t,z) = \begin{cases} p_{\text{L}} \ \text{ si } \ z - z_d < \sigma_{\text{L}} t, \\ p_{\text{L,exp}}(t,z) \ \text{ si } \ z - z_d \geq \sigma_{\text{L}} t, \ \text{ et } \ z - z_d \leq \sigma_{\text{R}} t, \\ p^{\star} \ \text{ si } \ z - z_d < \sigma_{\text{R}} t \ \text{ et } \ z - z_d < S_{\text{R}} t, \\ p_{\text{R}} \ \text{ si } \ z - z_d \geq S_{\text{R}} t, \end{cases} \tag{5.6b}$$

$$e_{\text{exacte}}(t,z) = \frac{p_{\text{exacte}}(t,z)}{(\gamma - 1)\ \rho_{\text{exacte}}(t,z)}, \tag{5.6c}$$

et

$$u_{\text{exacte}}(t,z) = \begin{cases} u_{\text{L}} \ \text{ si } \ z - z_d < \sigma_{\text{L}} t, \\ u_{\text{L,exp}}(t,z) \ \text{ si } \ z - z_d \geq \sigma_{\text{L}} t, \ \text{ et } \ z - z_d \leq \sigma_{\text{R}} t, \\ u^{\star} \ \text{ si } \ z - z_d < \sigma_{\text{R}} t \ \text{ et } \ z - z_d < S_{\text{R}} t, \\ u_{\text{R}} \ \text{ si } \ z - z_d \geq S_{\text{R}} t, \end{cases} \tag{5.6d}$$

avec

- $\rho_{\text{L}} = 0.1$, $p_{\text{L}} = 0.125$, $u_{\text{L}} = 0$ et $\rho_{\text{R}} = 1$, $p_{\text{R}} = 1$ et $u_{\text{R}} = 0$ les conditions initiales ;
- $z_d = 0.5$ la position initiale des discontinuités ;

— $p^\star = 0.30313$ et $u^\star = 0.92745$ les états de pression et de vitesse entre l'onde de détente et l'onde de choc ;
— $\rho_{\mathrm{L}}^\star = \rho_{\mathrm{L}}\left(\dfrac{p^\star}{p_{\mathrm{L}}}\right)^{1/\gamma}$ et $\rho_{\mathrm{R}}^\star = \rho_{\mathrm{R}}\,\dfrac{\frac{p^\star}{p_{\mathrm{R}}}+\frac{\gamma-1}{\gamma+1}}{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}+\frac{p^\star}{p_{\mathrm{R}}}+1}$;
— $\sigma_{\mathrm{L}} = u_{\mathrm{L}} - c_{\mathrm{L}}$ et $\sigma_{\mathrm{R}} = u^\star - c_{\mathrm{L}}\left(\dfrac{p^\star}{p_{\mathrm{L}}}\right)^{(\gamma-1)/(2\,\gamma)}$ les vitesses gauche et droite des deux ondes extrêmes de détentes où $c_{\mathrm{L}} = \sqrt{\frac{\gamma\,p_{\mathrm{L}}}{\rho_{\mathrm{L}}}}$;
— $\rho_{\mathrm{L,exp}}(t,z) = \rho_{\mathrm{L}}\left[\frac{2}{\gamma+1} + \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)c_{\mathrm{L}}}\left(u_{\mathrm{L}} - \frac{z-z_d}{t}\right)\right]^{2/(\gamma-1)}$ la densité entre les deux ondes de détente ;
— $p_{\mathrm{L,exp}}(t,z) = p_{\mathrm{L}}\left(\frac{\rho_{\mathrm{L,exp}}(t,z)}{\rho_{\mathrm{L}}}\right)^{\gamma}$ la pression entre les deux ondes de détente ;
— $u_{\mathrm{L,exp}}(t,z) = \frac{2}{\gamma+1}\left(c_{\mathrm{L}} + \frac{\gamma-1}{2}u_{\mathrm{L}} + \frac{z-z_d}{t}\right)$ la vitesse entre les deux ondes de détente ;
— $S_{\mathrm{R}} = u_{\mathrm{R}} + c_{\mathrm{R}}\left(\frac{(\gamma+1)p^\star}{2\,\gamma\,p_{\mathrm{R}}} + \frac{\gamma-1}{2\,\gamma}\right)^{1/2}$ la vitesse de l'onde de choc où $c_{\mathrm{R}} = \sqrt{\frac{\gamma\,p_{\mathrm{R}}}{\rho_{\mathrm{R}}}}$.

Le lecteur peut consulter [145] pour plus de détails sur les valeurs ou le raisonnement effectué pour obtenir ces équations.

Pour ce cas test, la vitesse du son c_{eff}, intervenant dans l'équation (5.3), est la vitesse du son dans l'état le plus à droite du domaine où la pression et la densité restent constantes. C'est la zone de l'écoulement où la vitesse du son est maximale et c'est donc celle qui limite le pas de temps. On obtient

$$c_{\mathrm{eff}} = c_{\mathrm{R}} = \sqrt{\gamma\left(\frac{p_{\mathrm{R}}}{\rho_{\mathrm{R}}}\right)} = \sqrt{\gamma}.$$

Concernant le cas test de Sod sphérique, aucune solution analytique n'est connue. La solution de référence utilisée est obtenue sur 5000 mailles et est issue de la version 1D sphérique du schéma CSTS décrit dans [53].

5.2.3 Résultats numériques

5.2.3.1 Tube à choc de Sod plan

Les profils de densité sont tracés dans la figure 5.3 pour les schémas VNM et CCNM. La solution numérique concorde avec la solution analytique dans les deux cas. On note tout de même que le schéma CCNM capture mieux le pied de la détente mais produit une erreur au sommet de la détente tandis que l'inverse se produit pour le schéma VNM. L'absence de viscosité en détente explique la perte de monotonie et donc la possibilité d'artefacts dans cette zone pour les deux schémas CCNM et VNM. Le couplage d'un nœud avec ses voisins *via* la matrice de masse pour le schéma CCNM apporte une accélération supplémentaire par rapport au schéma VNM. Le schéma CCNM a donc tendance à surestimer l'accélération. C'est ce qui explique la meilleure capture du pied de la détente par le schéma CCNM, en comparaison du schéma VNM, mais également la surestimation

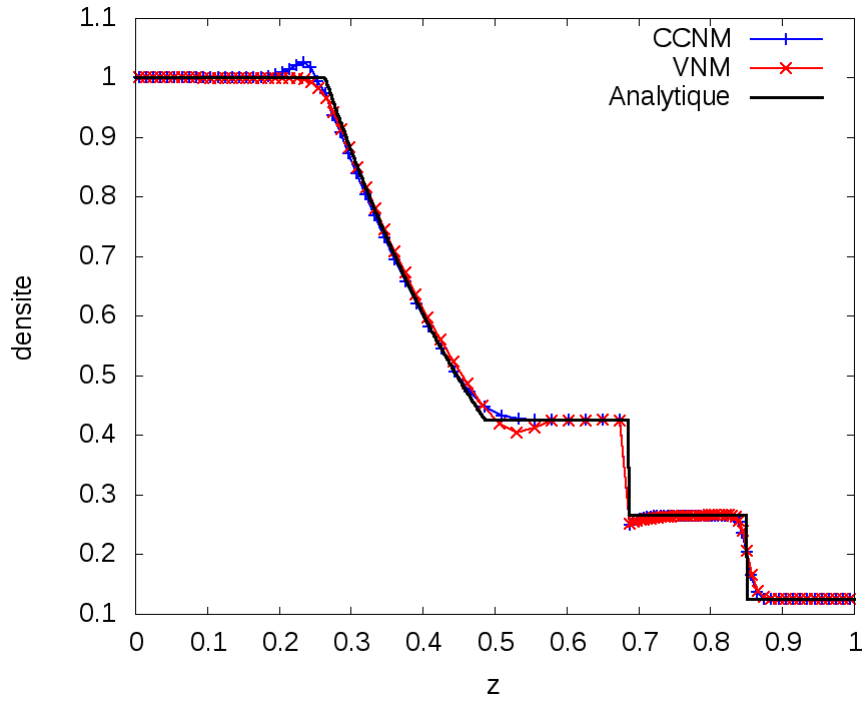


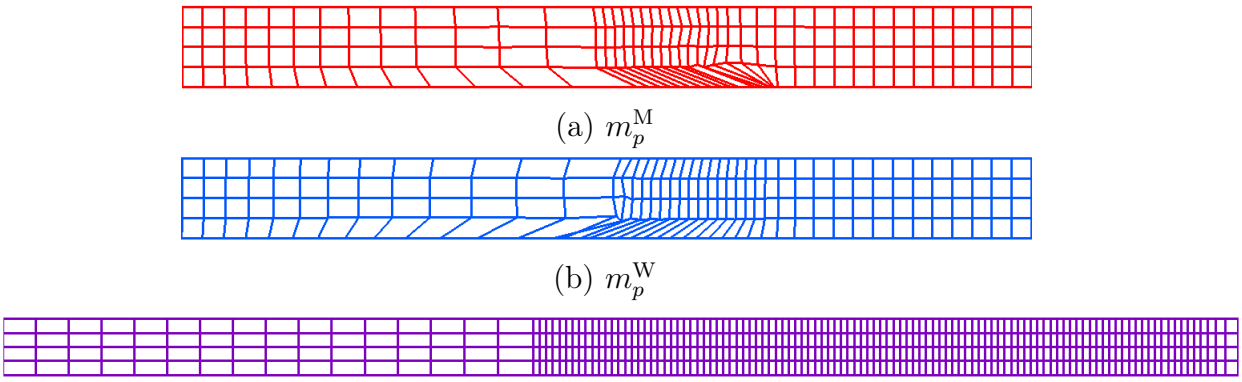
FIGURE 5.3 – Tube à choc de Sod [145] plan en géométrie axisymétrique : profils de densité et solution analytique pour les schémas VNM et CCNM.

de la densité en amont de la détente. La figure 5.4 confirme l'étude sur les écoulements axiaux effectuée dans le chapitre 3 : seule la masse nodale m_p associée au volume de contrôle V_p de la définition 3.4 permet de respecter parfaitement la symétrie plane. Les autres choix présentés ici ne permettent pas d'atteindre le temps final en raison des trop fortes singularités présentes sur l'axe.

5.2.3.2 Tube à choc de Sod sphérique

La figure 5.5 correspond au maillage 10×100 et la carte de densité au temps final pour le schémas VNM. On compare sur la figure 5.6 les trois maillages finaux 10×100 des schémas VNM, CCNM et STS avec un zoom au niveau du choc où les différences sont les plus importantes. On remarque que la symétrie sphérique est très bonne avec une erreur tout de même visible pour VNM entre le choc et la discontinuité de contact. Sans surprise, les problèmes interviennent près de l'axe de symétrie, là où les dépendances en $\frac{1}{r}$ sont les plus fortes. Sur ce cas précis, le schéma à matrice de masse non diagonale CCNM préserve donc mieux la symétrie ce qui est confirmé par la figure 5.7(b). L'erreur de sphéricité dans la figure 5.7(b) est calculée suivant

$$\max_{\text{couche sphérique l}} \left(\max_{p \in l} r_p^s - \min_{p \in l} r_p^s \right),$$



(a) m_p^{M}

(b) m_p^{W}

(c) m_p

FIGURE 5.4 – Tube à choc de Sod [145] plan en géométrie axisymétrique. Maillage obtenu pour : (a) masse nodale m_p^{M} définie par les médianes [48, 62–65] ; (b) masse nodale m_p^{W} [47, 61] ; et (c) masse nodale m_p choisie.

où on rappelle que $r^s = \sqrt{z^2 + r^2}$. Les profils de densité pour les deux schémas construits dans cette thèse sur le maillage 20×200 sont donnés dans la figure 5.7(a). Les solutions numériques montrent un bon accord avec la solution de référence.

5.3 Compression isentropique de Kidder

5.3.1 Présentation du cas test

Le cas test de Kidder [149] correspond à une compression isentropique d'une coquille constituée d'un gaz parfait de constante adiabatique γ et de densité, pression et vitesse initiales ρ_0, p_0 et $\boldsymbol{u}_0$. On note R_i^s (resp. R_e^s) le rayon interne initial (resp. rayon externe initial) et on choisit dans notre cas $R_i^s = 0.9$ et $R_e^s = 1$. Notre coquille est donc d'épaisseur $R_e^s - R_i^s = 0.1$. Sous des conditions particulières, Kidder construit dans [149] une solution analytique auto-similaire pour tout temps $t \in [0,\tau[$, où τ est le temps de focalisation. Il correspond au temps nécessaire pour que tout le gaz de la coquille soit concentré en un point. L'objectif premier de ce cas est de vérifier la précision à l'ordre 2 des schémas construits dans cette thèse. De plus, ce cas test est également utilisé pour tester la capacité de nos schémas à capturer un écoulement isentropique. On précise enfin que, dans ce cas test, le terme de pseudo-viscosité est fixé à 0 manuellement en posant $q_1 = q_2 = 0$. On note que ce choix est différent de celui effectué dans [53] où $q_2 \neq 0$.

5.3.2 Solution de référence

On commence par introduire quelques notations : à $t = 0$, la densité et la pression internes (resp. externes) à la coquille sont notées ρ_i et p_i (resp. ρ_e et p_e). La quantité k_s

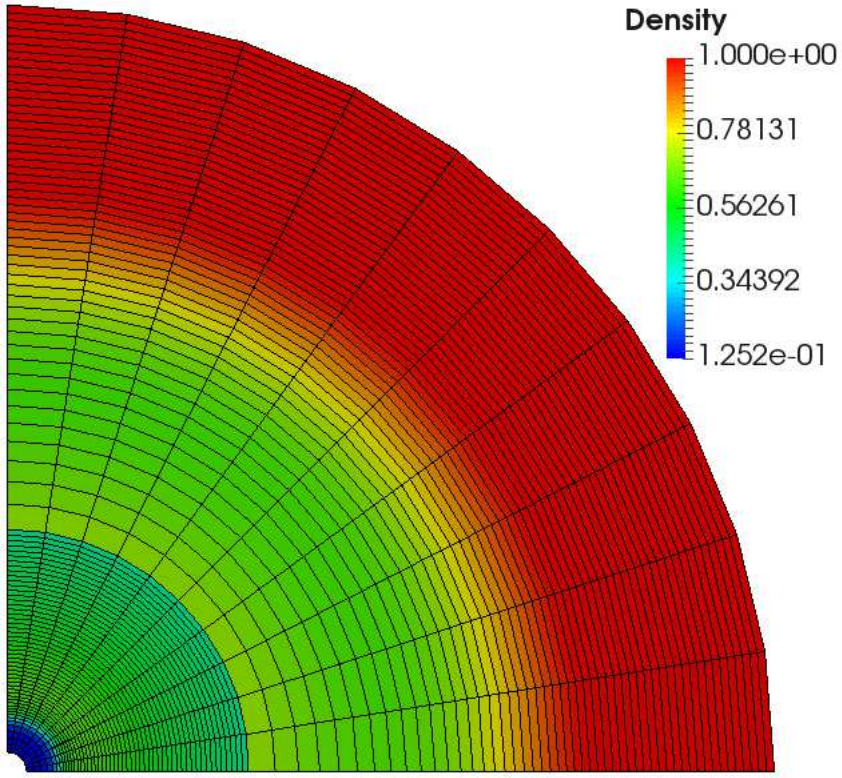


FIGURE 5.5 – Tube à choc de Sod [145] sphérique en géométrie axisymétrique : maillage polaire 10×100 et carte de densité finaux pour le schéma VNM.

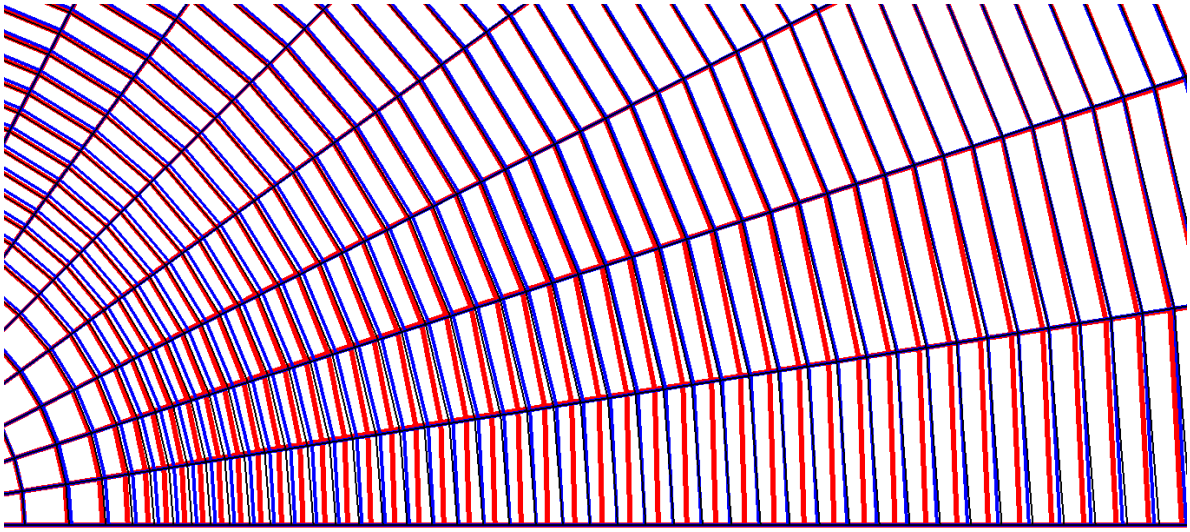
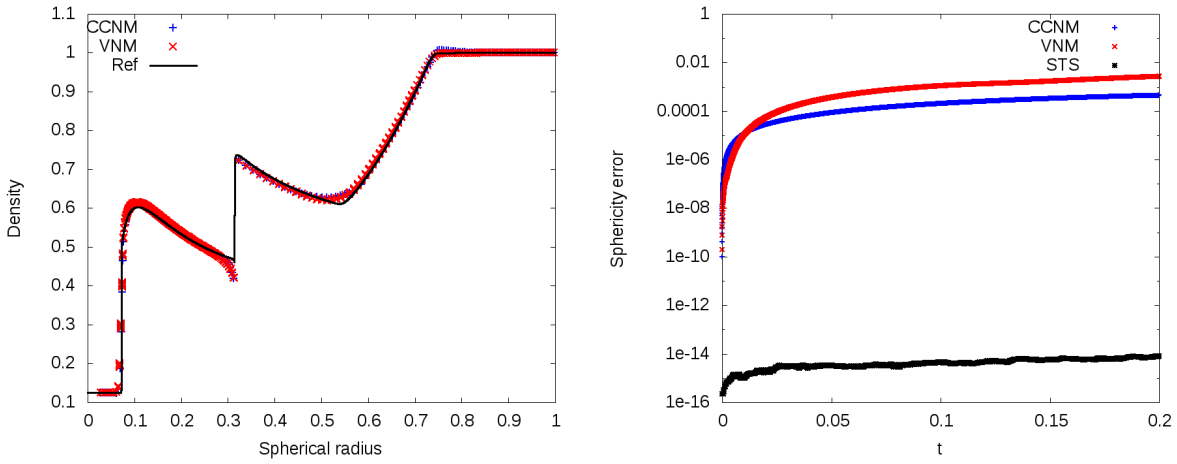


FIGURE 5.6 – Tube à choc de Sod [145] sphérique en géométrie axisymétrique. Maillages finaux 10×100 superposés : VNM, CCNM et STS. Le zoom est opéré au niveau du choc où les différences sont les plus importantes.



(a) (b)

FIGURE 5.7 – Tube à choc de Sod [145] sphérique en géométrie axisymétrique sur le maillage polaire 20×200 : (a) profils de densité pour les schémas VNM et CCNM avec la solution de référence ; et (b) erreur de sphéricité pour les schémas VNM, CCNM et STS sur le maillage 20×200. On rappelle que la solution nommée « Ref » est une solution convergée sur 5000 mailles issue de la version 1D sphérique du schéma CSTS1* de [53].

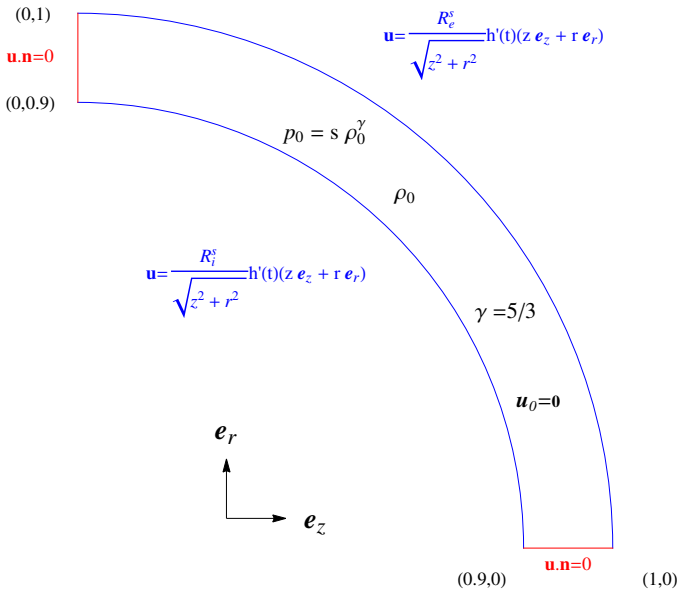


FIGURE 5.8 – Compression isentropique de Kidder [149] : conditions initiales et conditions aux limites. Les notations sont introduites dans la sous-section suivante.

est définie par $k_s = \frac{p_e}{\rho_e^\gamma}$ et on a également $\rho_i = \rho_e \left(\frac{p_i}{p_e}\right)^{1/\gamma}$. En cherchant la solution de la forme $r^s(R^s,t) = h(t)\, R^s$, en utilisant le caractère isentropique de l'écoulement et en posant $\gamma = 1 + \frac{2}{\nu}$ où $\nu = 1,2,3$ correspond à une géométrie plane, cylindrique ou sphérique, on obtient la solution analytique auto-similaire suivante

$$\rho\left(r^s(R^s,t),t\right) = h(t)^{-2/(\gamma-1)}\, \rho_0(R^s), \tag{5.7}$$
$$u(r^s(R^s,t),t) = h'(t)\, R^s, \tag{5.8}$$
$$p(r^s(R^s,t),t) = h(t)^{-2\,\gamma/(\gamma-1)} p_0(R^s). \tag{5.9}$$

Cette solution est donc définie pour tout $t \in [0,\tau[$. Le temps τ est donné par

$$\tau = \sqrt{\frac{\gamma-1}{2}\frac{(R_e^s)^2 - (R_i^s)^2}{(c_e^s)^2 - (c_i^s)^2}},$$

où c_i^s et c_e^s sont les vitesses du son interne et externe au temps $t = 0$. La forme particulière choisie pour γ permet d'obtenir l'expression analytique suivante pour la fonction temporelle h

$$h(t) = \sqrt{1 - \left(\frac{t}{\tau}\right)^2},\ \forall t \in [0,\tau[.$$

On note que la vitesse radiale est linéaire suivant le rayon R^s ce qui est le cas dans toute compression auto-similaire et isentropique. Pour $R^s \in [R_i^s,R_e^s]$, les densité et pression initiales sont les suivantes

$$\rho_0(R^s) = \left(\frac{(R_e^s)^2 - (R^s)^2}{(R_e^s)^2 - (R_i^s)^2}\,\rho_i^{\gamma-1} + \frac{(R^s)^2 - (R_i^s)^2}{(R_e^s)^2 - (R_i^s)^2}\,\rho_e^{\gamma-1}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}, \tag{5.10}$$
$$p_0(R^s) = k_s\left(\rho_0(R^s)\right)^\gamma,$$
$$\boldsymbol{u}_0(R^s) = \mathbf{0}.$$

Habituellement, la compression est obtenue en imposant la pression

$$p(r_i^s,t) = p_i\, h(t)^{-\frac{2\gamma}{\gamma-1}},\ \forall t \in [0,\tau[,$$
$$p(r_e^s,t) = p_e\, h(t)^{-\frac{2\gamma}{\gamma-1}},\ \forall t \in [0,\tau[,$$

où p_i et p_e sont les pressions imposées sur l'intérieur et l'extérieur de la coquille. Dans cette thèse, on choisit des conditions aux limites de type vitesse imposée où les vitesses sont données par l'équation (5.8) pour tout $t \in [0,\tau[$. Cela nous permet d'assurer strictement la symétrie sphérique sur les bords : les problèmes de dépendance radiale entre les vecteurs

de volume de coin $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ et les masses nodales m_p interviennent sur les bords si on impose la pression ce qui peut dégrader les mesures faites pour les ordres de convergence.

Pour l'application numérique présentée dans la sous-section suivante, on pose $p_i = 0.1$, $p_e = 10$ et $\rho_e = 10^{-2}$. La compression étant sphérique, le paramètre géométrique ν est égal à 3 ce qui donne la valeur de la constante adiabatique $\gamma = \frac{5}{3}$. On obtient alors $\rho_i = 6.31 \times 10^{-4}$, $s = 2.15 \times 10^4$ et $\tau = 6.72 \times 10^{-3}$.

Grâce aux relations (5.7) et (5.9), on déduit l'expression suivante pour la vitesse du son à tout instant $t \in [0,\tau[$

$$c^s = \sqrt{\gamma \tfrac{p}{\rho}} = \frac{1}{h(t)} \sqrt{\gamma \tfrac{p_0}{\rho_0}} = \frac{1}{h(t)}\, c_0^s.$$

La fonction temporelle h atteint son maximum pour $t = t_f$ et la vitesse du son initiale c_0^s est maximale sur l'extérieur de la coquille. La vitesse du son effective c_{eff} intervenant dans l'équation (5.3) est donc

$$c_{\text{eff}} = \frac{1}{h(t_f)}\, c_e^s = \frac{1}{h(t_f)} \sqrt{k_s\, \gamma\, \rho_e^{\gamma-1}}. \tag{5.11}$$

5.3.3 Résultats numériques

Les erreurs L^2 sur les variables suivantes sont considérées en figure 5.9 :

— la densité, pour la précision ;
— le rapport $\frac{p}{k_s\, \rho^\gamma}$, pour mesurer l'isentropie de la solution numérique ;
— la norme euclidienne de la vitesse $\|\boldsymbol{u}\|$, pour mesurer l'impact des flux de quantité de mouvement ;
— la variation lagrangienne des masses nodales δm_p, pour mesurer l'erreur venant des masses nodales variables.

La variation lagrangienne des masses nodales est la quantité définie par

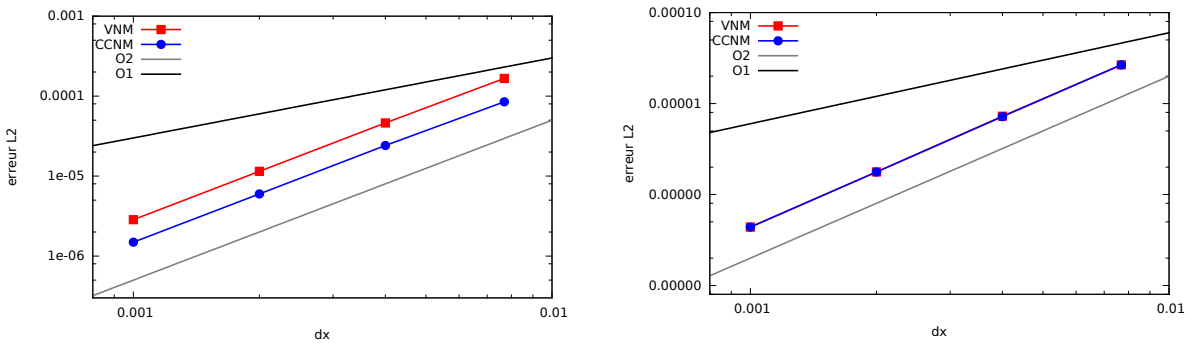
$$\delta m_p = \tfrac{1}{m_p^0} \sum_n |m_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}|. \tag{5.12}$$

Pour une compression parfaitement isentropique, le rapport $\frac{p}{k_s\, \rho^\gamma}$ reste constant et

$$\tfrac{p}{k_s\, \rho^\gamma} = \tfrac{p_0}{k_s\, \rho_0^\gamma} = 1.$$

La précision à l'ordre 2 attendue est effectivement retrouvée sur toutes les variables considérées. En particulier, le caractère isentropique de l'écoulement est respecté pour les deux schémas. La variation des masses nodales δm_p disparaît effectivement avec le raffinement du maillage, à l'ordre 2, comme on peut le voir sur la figure 5.9(d).

On superpose les deux maillages 25×15 finaux obtenus avec les corrections d'anti-dérive



(a) ρ (b) $\frac{p}{k_s\,\rho^\gamma}$

(c) $\|\boldsymbol{u}\|$ (d) δm_p

FIGURE 5.9 – Compression isentropique de Kidder [149]. Erreurs L^2 sur les maillages 13×8, 25×15, 50×30 et 100×60 pour les schémas VNM et CCNM : (a) densité avec des ordres estimés à $\simeq 1.99$ pour les deux schémas ; (b) rapport $\frac{p}{k_s\,\rho^\gamma}$ avec des ordres estimés à $\simeq 2.01$ pour les deux schémas ; (c) norme euclidienne de la vitesse avec des ordres estimés à $\simeq 2.88$ pour les deux schémas ; et (d) variation des masses nodales δm_p avec un ordre estimé à $\simeq 2.38$.

en force et par filtrage inertiel. On amplifie les différences en ajoutant une perturbation initiale et aléatoire limitée à 2.5 % de Δr^s sur la position des nœuds internes. La compression est également effectuée jusqu'à 99 % du temps de focalisation. Les différences entre les deux corrections sont en effet trop faibles sur les maillages alignés avec l'écoulement et pour $t_f = 0.9\,\tau$. Une vue globale du domaine avec le maillage et la carte de densité sont présentées en figure 5.10 et les zooms effectués sont donnés en figure 5.11. La figure 5.11(b) montre clairement que le maillage est plus lisse pour le filtrage inertiel. À dissipation équivalente, les corrections en force sont en effet moins efficaces à cause de la sur-dissipation qui a un impact important sur le maillage. En présence de ces corrections, la dégradation du maillage vient à la fois de la suppression de certains modes linéaires, mais aussi de certains modes d'anti-dérive toujours présents et qui auraient dû être corrigés.

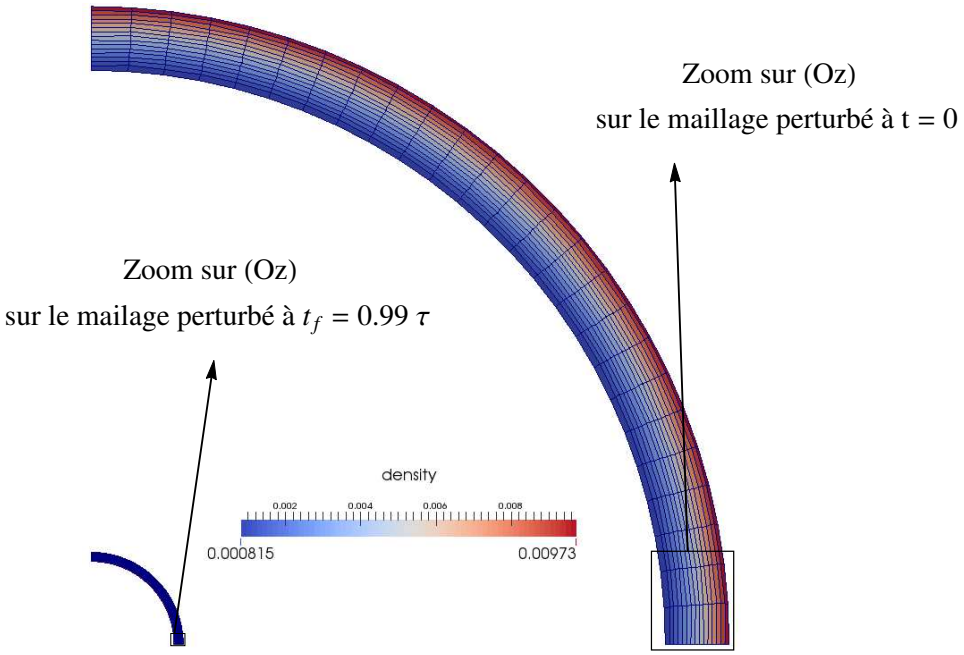
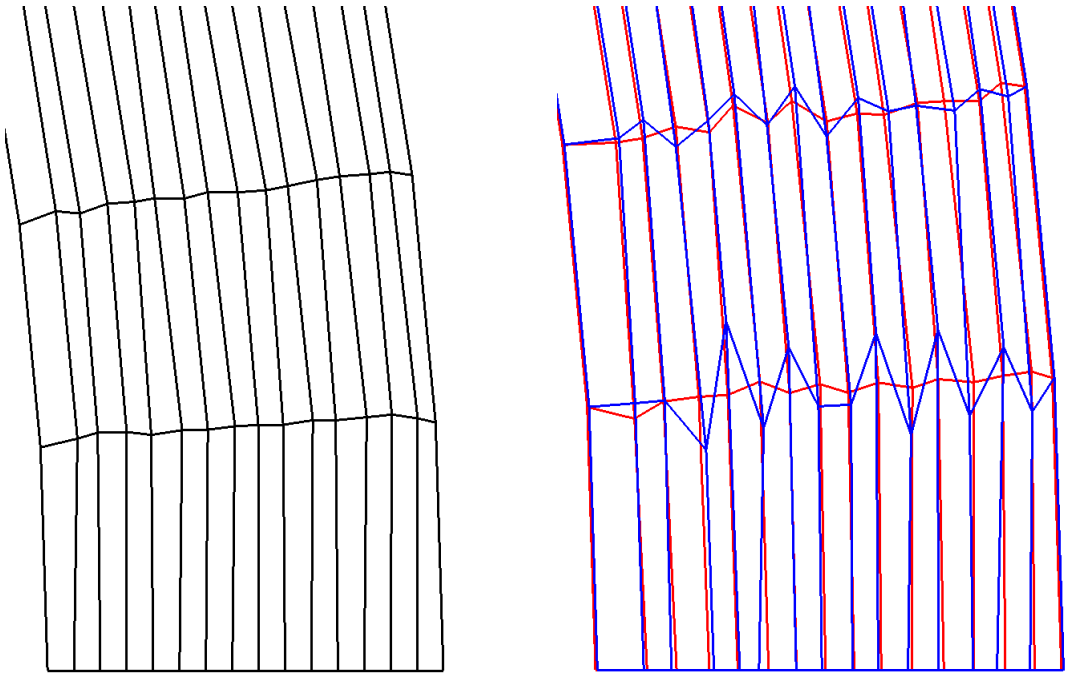


FIGURE 5.10 – Compression isentropique de Kidder [149]. Maillage perturbé 25×15 aux temps $t = 0$ et $t = 0.99\,\tau$ avec carte de densité obtenu pour les corrections avec le filtrage inertiel. Zooms effectués sur l'axe (Oz) présentés en figure 5.11.



(a) (b)

FIGURE 5.11 – Compression isentropique de Kidder [149] : (a) maillage initial perturbé 25×15 avec zoom autour de (Oz) ; et (b) maillage final 25×15 : VNM + filtrage inertiel et VNM + correction en force avec zoom autour de (Oz).

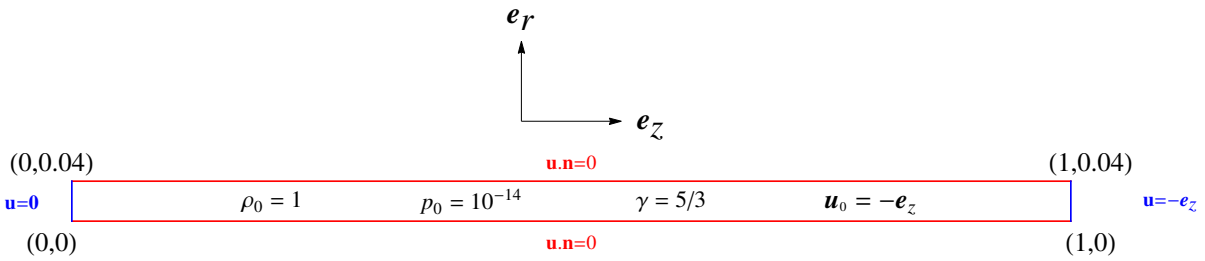


FIGURE 5.12 – Tube à choc de Noh [154] plan en géométrie axisymétrique. Conditions initiales et conditions aux limites.

5.4 Onde de choc de Noh

5.4.1 Présentation des cas test

Le cas test de Noh [154] correspond à une onde de choc infiniment forte, autrement dit se propageant dans un milieu à pression p_0 négligeable. L'onde de choc est générée par la collision sur le mur à l'origine du gaz (gaz parfait de constante adiabatique γ) initialement animé d'une vitesse uniforme. L'énergie cinétique est ici totalement convertie en énergie interne derrière l'onde. Comme pour le cas test de Sod, les deux variantes où l'onde de choc est soit plane soit sphérique sont considérées dans cette thèse. Ces deux variantes mettent en avant le caractère conservatif des schémas puisqu'elles impliquent cette fois un choc infiniment fort contrairement au cas test de Sod.

5.4.1.1 Onde de choc de Noh plan

L'état initial est décrit dans la figure 5.12. Ce cas est réalisé sur le domaine $[0,1]\times[0,0.04]$. En plus de la validation de la conservation exacte de l'énergie totale, il nous permet de s'assurer une nouvelle fois du comportement de nos schémas sur une solution purement axiale.

5.4.1.2 Onde de choc de Noh sphérique

Le cas test de Noh sphérique consiste en une onde de choc sphérique et divergente générée par la collision du gaz sur le mur à l'origine. Il est réalisé sur maillages polaires équi-angulaires alignés avec le mouvement mais aussi sur un maillage cartésien. L'état initial est donné dans la figure 5.13. Concernant le maillage cartésien, le fait qu'il ne soit pas aligné avec l'écoulement est intéressant puisque le cas requiert l'utilisation des corrections d'anti-dérive. Les profils de densité pour la convergence en maillage n'apportent rien de plus par rapport à ceux obtenus sur maillages polaires et ne sont donc pas donnés. L'état initial est décrit dans la figure 5.14.

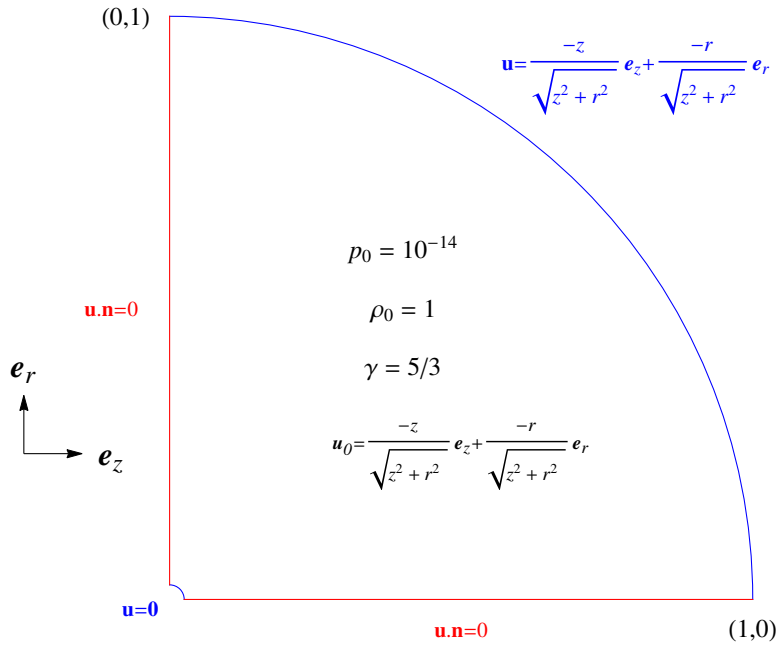


FIGURE 5.13 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites pour le maillage polaire.

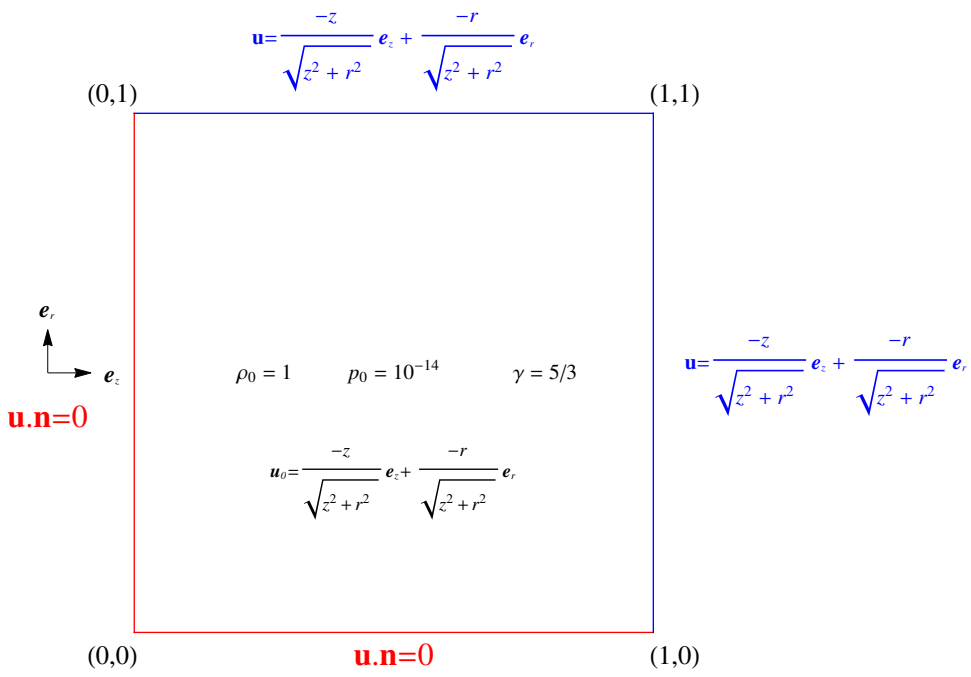


FIGURE 5.14 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites pour le maillage cartésien.

δ	r_δ	ρ_1	ρ_+	$\rho_-\,(r_\delta,t)$
1 plane	z	4	1	$\rho_0 = 1$
2 cylindrique	$\sqrt{x^2+y^2}$	16	4	$1+\frac{t}{r_\delta}$
3 sphérique	$\sqrt{z^2+r^2}$	64	16	$\left(1+\frac{t}{r_\delta}\right)^2$

TABLE 5.2 – Tube à choc de Noh [154]. Récapitulatif des différentes quantités intervenant dans la solution analytique pour toutes les géométries.

5.4.2 Solution de référence

Quelle que soit la géométrie, désignée par le paramètre δ, la solution analytique est connue et explicitée par Noh en 1983 dans [154]. Le paramètre δ prend seulement trois valeurs entières : $\delta = 1$ pour une onde plane, $\delta = 2$ pour une onde cylindrique et $\delta = 3$ pour une onde sphérique. La relation entre la densité post-choc ρ_1, uniforme, et la densité immédiatement devant l'onde de choc notée ρ_+ ; ainsi que la vitesse du choc u_{choc} ; sont indépendantes de la géométrie :

$$\rho_1 = \tfrac{\gamma+1}{\gamma-1}\rho_+, \text{ donc } \rho_1 = 4\,\rho_+ \text{ pour } \gamma = \tfrac{5}{3}, \tag{5.13}$$

$$u_{\text{choc}} = \tfrac{1}{3}. \tag{5.14}$$

Le temps final usuel pour le cas test de Noh étant $t_f = 0.6$, on en déduit directement que le choc doit atteindre la position $r_{\text{choc}} = 0.2$ à $t = 0.6$. La principale différence entre les solutions analytiques décrites par Noh dans [154] réside dans la densité pré-choc, notée ρ_-, et elle est due à la valeur de δ. Cette densité pré-choc est définie par

$$\rho_-\,(r_\delta,t) = \left(1+\frac{t}{r_\delta}\right)^{\delta-1}. \tag{5.15}$$

Le tableau 5.2 résume toutes les quantités introduites pour calculer la solution analytique du tube à choc de Noh.

La zone limitant le pas de temps (vitesse du son maximale) dans ce cas test est clairement la zone choquée dont la vitesse du son est donnée par

$$c_1 = \sqrt{\gamma\left(\tfrac{p_1}{\rho_1}\right)} = \sqrt{\gamma\,(\gamma-1)\;e_1}.$$

L'énergie cinétique pré-choc est $\frac{1}{2}\,\rho_0\,(\boldsymbol{u}_0)^2 = \frac{1}{2}$ ce qui implique que l'énergie interne post-choc e_1 vaut également $\frac{1}{2}$: l'énergie cinétique est entièrement convertie en énergie interne par l'onde. Enfin, on ajoute à la vitesse du son c_1 un facteur 4 correspondant au taux de compression des mailles choquées pour retrouver la vitesse du son effective c_{eff} pour le cas

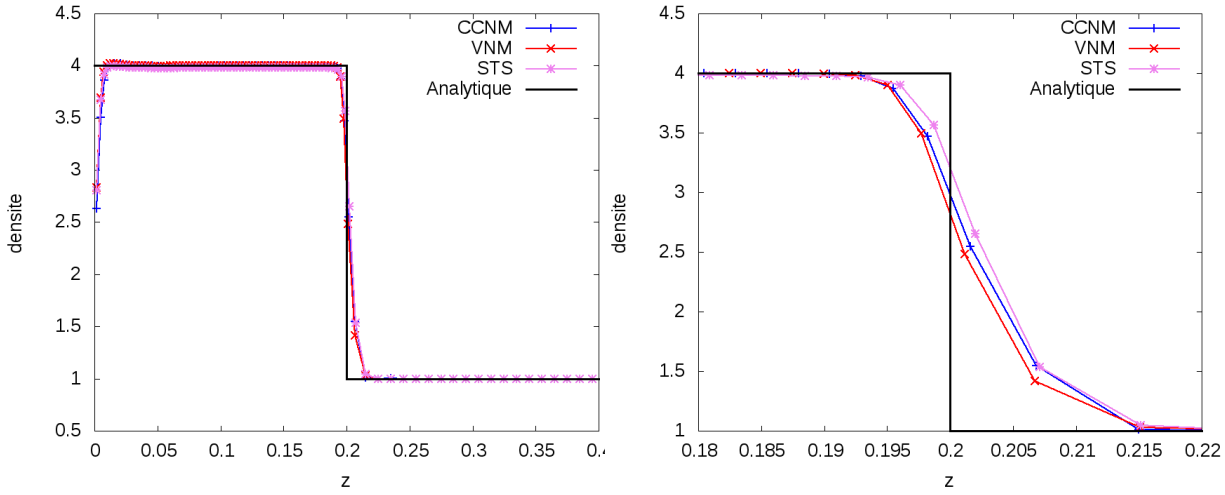


FIGURE 5.15 – Tube à choc de Noh [154] plan en géométrie axisymétrique. Profils de densité pour les schémas VNM, CCNM et STS : (a) domaine complet et (b) zoom autour de la zone de choc $[0.18; 0.22]$.

test de Noh

$$c_{\text{eff}} = 4\,\frac{\sqrt{5}}{3}.$$

5.4.3 Résultats numériques

5.4.3.1 Onde de choc plane de Noh

Les profils de densité sont donnés dans la figure 5.15. L'uniformité de la solution suivant $\boldsymbol{e}_r$ et l'absence de mouvement radial sont respectées. Les schémas conservatifs restituent correctement le plateau analytique $\rho_1 = 4$ et la position du choc $r_{\text{choc}} = 0.2$ (cas $\delta = 1$ dans la sous-section 5.4.1). En raison du coefficient CFL bas, le caractère non conservatif du schéma STS n'est pas mis en avant ici et il semble capturer la position analytique $r_{\text{choc}} = 0.2$ du choc. En regardant de plus près sur la figure 5.15(b), on peut tout de même apercevoir une erreur plus conséquente sur la valeur du plateau analytique $\rho_1 = 4$ par rapport aux schémas conservatifs. Le phénomène classique de « wall-heating » [154, 161, 162] est observé près du mur en $z = 0$. Cette erreur est inévitablement présente pour tous les schémas numériques et se produit durant le régime transitoire où le choc se forme et est trop raide pour être capturé sur le maillage.

5.4.3.2 Onde de choc de Noh sphérique sur maillages polaires

Le schéma à masses constantes et non diagonales ne permet pas d'atteindre le temps final sur ce cas test et ce, malgré le faible coefficient CFL choisi. Plusieurs raisons expliquent ce comportement une fois que la symétrie sphérique de l'écoulement est brisée : (i) le

caractère constant de la matrice de masse ne permet pas de prendre en compte ces erreurs sur la symétrie sphérique ; (ii) le pas de temps constant tiré de la solution analytique ne prend également pas en compte les erreurs de symétrie ; (iii) le caractère non diagonal de la matrice de masse peut propager plus rapidement les erreurs et réduit la stabilité du schéma.

On donne dans la figure 5.16 le maillage 10×100 et la densité au temps final pour le schéma VNM. Le nombre de maille choisi permet d'obtenir initialement des mailles avec un bon rapport d'aspect au niveau de l'origine. Les deux maillages finaux 10×100 pour les schémas VNM et STS sont comparés sur la figure 5.17. On effectue un zoom sur l'axe de symétrie incluant l'onde de choc et un autre zoom près de l'origine, ce qui correspond aux régions du domaine où les différences sont les plus importantes. Sur la figure 5.17(b), on remarque la forte influence des masses nodales choisies concernant le schéma VNM, conduisant à une perte évidente de symétrie. Cela montre que la définition considérée dans cette thèse n'est pas parfaite. Elle permet de respecter la symétrie plane mais ne fournit pas les corrections nécessaires pour préserver la symétrie sphérique sur un maillage polaire.

Ces singularités sur l'axe et près de l'origine n'ont pas été observées pour le tube à choc de Sod sphérique sur maillage polaire. Les mouvements proches de l'origine étant beaucoup moins importants pour Sod par rapport à Noh, ces problèmes n'ont en effet pas le temps d'apparaître sur la figure 5.6. Le cas test de Noh sur maillage polaire en géométrie axisymétrique est donc beaucoup plus exigent et contraignant concernant la symétrie sphérique. Il implique en effet un mouvement beaucoup plus important sur l'axe $r = 0$ et proche de l'origine où les dépendances radiales sont les plus fortes et où les mailles quadrangulaires dégénèrent le plus vers des triangles. C'est la raison pour laquelle le choix d'une matrice de masse constante et non diagonale permet d'obtenir un meilleur résultat sur le cas test de Sod alors qu'il ne permet même pas d'atteindre le temps final ici.

Les profils de densité sont donnés dans la figure 5.18. Le schéma conservatif VNM produit une solution éloignée de la solution de référence ($\rho_1 = 64$ et $r_{\text{choc}} = 0.2$), en particulier vis-à-vis du résultat obtenus dans l'article CSTS [53]. Outre le fait que le maillage est plus fin dans [53], ce comportement est attribué à trois facteurs : (i) la suppression des mailles pour $r^s = \sqrt{z^2 + r^2} < 0.025$ ce qui modifie le profil de densité en amont du choc et décale la position du choc ; (ii) le coefficient quadratique q_2 du terme de pseudo-viscosité qui est plus important ; et (iii) le phénomène important de « wall-heating » et l'étalement naturel du choc dû au terme de pseudo-viscosité [53]. Concernant le schéma STS qui est non conservatif, les valeurs analytiques $\rho_1 = 64$ et $r_{\text{choc}} = 0.2$ ne seront jamais atteintes—en omettant l'erreur commise par la suppression des mailles à l'origine—malgré le raffinement du maillage car les relations de saut de Rankine-Hugoniot ne sont pas respectées. Des différences sur la position du choc et le plateau entre STS et VNM commencent en effet à apparaître sur le maillage 20×200 comme on peut le voir sur la figure 5.18(b). Le schéma STS est alors légèrement en avance par rapport à VNM

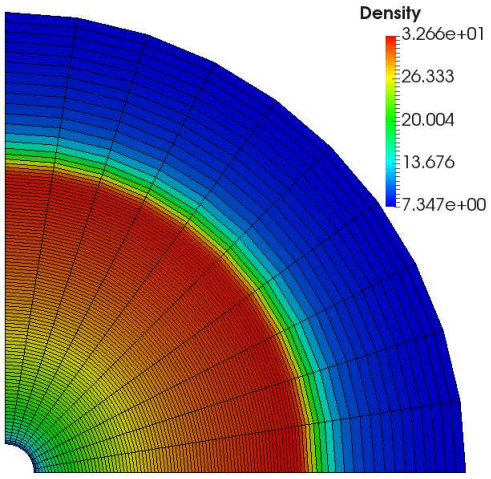


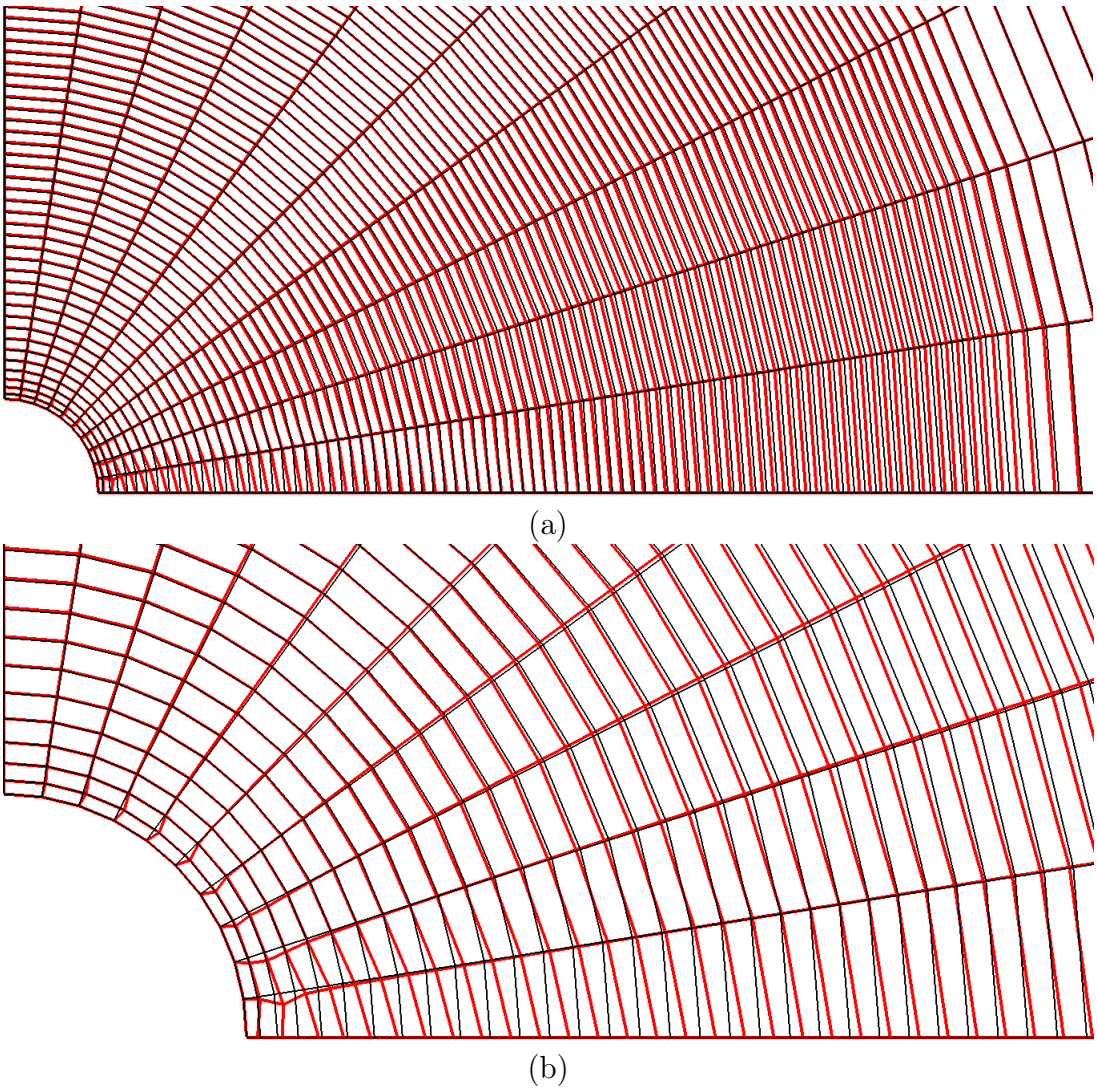
FIGURE 5.16 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique : maillage polaire 10×100 et carte de densité au temps final pour le schéma VNM.

concernant la position du choc.

5.4.3.3 Onde de choc de Noh sphérique sur maillage cartésien

Le maillage cartésien 50×50 et la carte de densité sont affichés dans la figure 5.19 pour le schéma VNM. La variation associée des masses nodales δm_p—équation (5.12)—est également étudiée en figure 5.20 sur les maillages 50×50 et 100×100. Cette variation est loin d'être négligeable et il est donc crucial de la prendre en compte. C'est ce qui est fait grâce aux flux de quantité de mouvement intervenant les équations (2.65) et (2.69). Les variations sont les plus fortes sur la diagonale au niveau de l'onde de choc et à l'origine où les déformations de maille sont les plus importantes. Contrairement à ce qui a été observé sur la compression isentropique de Kidder, on note que ces variations de masse ne disparaissent pas avec le raffinement du maillage. Au contraire, elles empirent dans les zones singulières de l'écoulement où les développement de Taylor ne sont pas applicables.

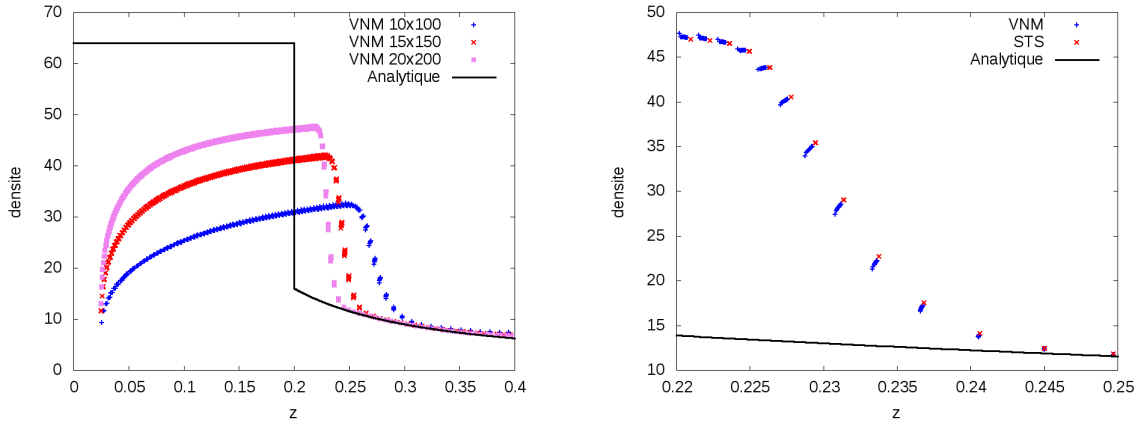
Le plateau restitué par le schéma VNM sur la figure 5.19 est faible comparé à la valeur analytique $\rho_1 = 64$. On peut voir également qu'il en est de même pour la positon du choc. Pour les mêmes raisons que celles évoquées dans la sous-section 5.4.3.2, la vitesse de convergence vers la solution analytique est lente. La symétrie sphérique est correctement respectée dans la zone de l'onde de choc mais elle est clairement brisée près de l'origine : voir figure 5.21. Une fois de plus, on note le fort impact du choix de la matrice de masse donnant un résultat très différent entre les schémas VNM et CCNM. À noter également que la symétrie n'est pas exactement préservée pour STS bien que ce soit peu visible. Enfin, le cas test confirme le caractère entropique des corrections d'anti-dérive par filtrage inertiel. Aucune pression négative n'apparaît alors que l'onde de choc se déplace dans un milieu à pression négligeable $p_0 = 10^{-14}$.



(a)

(b)

FIGURE 5.17 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique. Maillages 10×100 finaux superposés pour les schémas **VNM** et STS : (a) zoom sur l'origine et l'onde de choc et (b) zoom sur l'origine.



(a) (b)

FIGURE 5.18 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique. Profil de densité obtenu sur maillage polaire : (a) convergence en maillage pour le schéma VNM ; et (b) comparaison entre les schémas VNM et STS sur le maillage 20×200 avec un zoom sur la position numérique du choc.

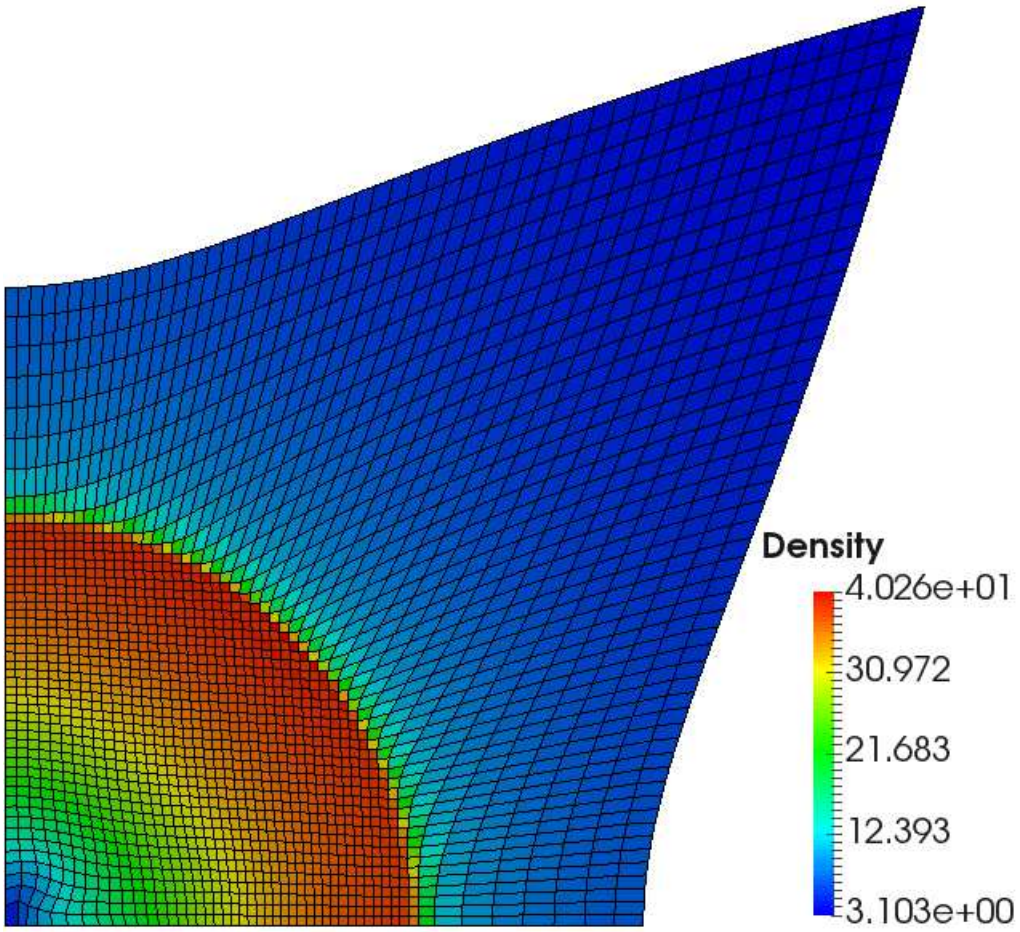
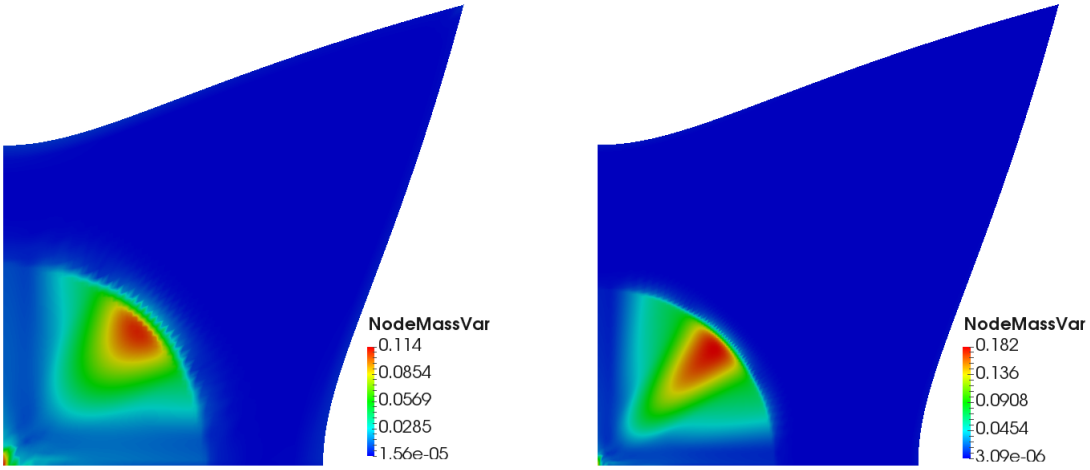


FIGURE 5.19 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique : maillage cartésien 50×50 et carte de densité au temps au temps final pour le schéma VNM.



(a) Maillage 50×50 (b) Maillage 100×100

FIGURE 5.20 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique. Variation des masses nodales δm_p : (a) maillage 50×50 ; et (b) maillage 100×100.

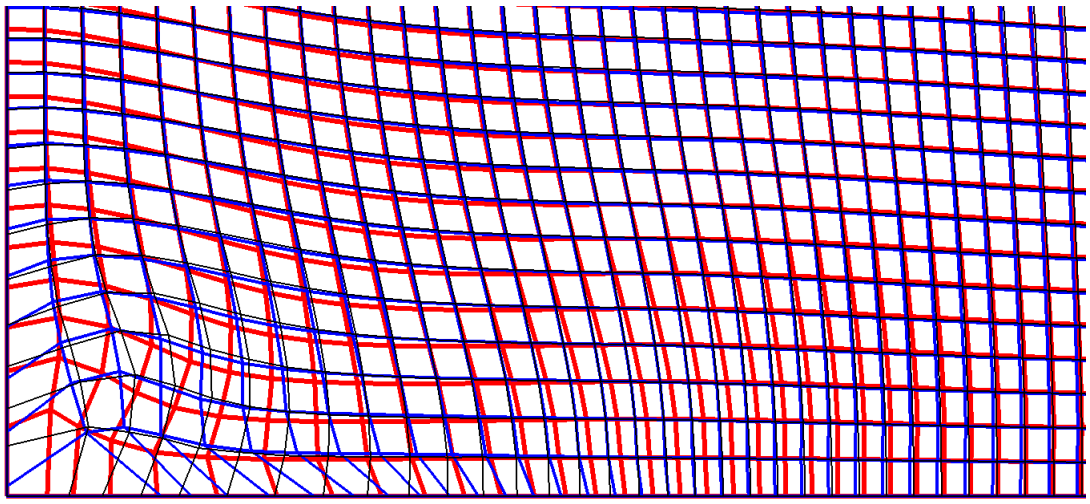


FIGURE 5.21 – Tube à choc de Noh [154] sphérique en géométrie axisymétrique. Maillages cartésiens finaux 50×50 superposés : VNM, CCNM et STS.

5.5 Onde de choc de Sedov

5.5.1 Présentation du cas test

Le cas test de Sedov [158] correspond à une onde de choc infiniment forte, comme dans le cas test de Noh, générée à $t = 0$ par un dépôt ponctuel d'énergie $\mathcal{E}_{\text{init}}$ à l'origine. Seul le cas d'une onde sphérique divergente est considéré dans cette thèse. L'énergie interne est ici totalement convertie en énergie cinétique par l'onde de choc ce qui fait que ce cas test peut être considéré comme le dual du cas test de Noh. La valeur de $\mathcal{E}_{\text{init}}$ est spécifiée dans la sous-section suivante sur la solution de référence. L'onde se déplace dans un gaz parfait de constante adiabatique γ et à pression p_0 négligeable. La densité et la pression initiales sont uniformes et égales à $\rho_0 = 1$ et $p_0 = 10^{-14}$. La vitesse initiale $\boldsymbol{u}_0$ est également uniforme et nulle. L'état initial est décrit dans la figure 5.22. Le maillage n'étant également pas aligné avec la direction de propagation de l'onde, l'utilisation de correction d'anti-dérive est nécessaire. De plus, ce cas impliquant un choc fort, une convergence en maillage et un suivi de la variation d'énergie totale sont réalisés. L'objectif est de vérifier la conservation stricte de l'énergie totale en présence de corrections d'anti-dérive—construite pour conserver l'énergie totale—et lorsque le pas de temps n'est pas constant.

5.5.2 Solution de référence

Le mouvement est auto-similaire, *i.e.* toutes les variables dépendent de la variable ξ, appelée variable auto-similaire, et définie par

$$\xi\left(t\right) = r^s \left(\frac{\rho_0}{\mathcal{E}_{\text{init}}\, t^2}\right)^{1/5}, \tag{5.16}$$

où $r^s = \sqrt{z^2 + r^2}$ est le rayon sphérique. Sous l'hypothèse de choc infiniment fort, *i.e.* lorsque la pression pré-choc p_0 est négligeable, les relations de saut de Rankine-Hugoniot permettent d'obtenir

$$u_1 = \frac{2u_{\text{choc}}}{\gamma + 1}, \tag{5.17}$$

$$\rho_1 = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}\,\rho_0, \tag{5.18}$$

$$p_1 = \frac{2\,\rho_0\, u_{\text{choc}}^2}{\gamma + 1} \tag{5.19}$$

où u_1, ρ_1 et p_1 sont respectivement les valeurs de vitesse, de densité et de pression immédiatement derrière l'onde de choc. La vitesse u_{choc} désigne la vitesse de propagation de l'onde de choc qui s'écrit, en fonction de sa position r_{choc} :

$$r_{\text{choc}} = \left(\frac{\mathcal{E}_{\text{init}}\, t^2}{\alpha\, \rho_0} \right)^{1/5}, \tag{5.20}$$

$$u_{\text{choc}} = \frac{2}{5} \frac{r_{\text{choc}}}{t}. \tag{5.21}$$

On voit dans l'expression (5.20) de r_{choc} que la dépendance en ξ est relativement simple. Dans le cas où $\gamma = \frac{5}{3}$, on obtient un pic théorique de $\rho_1 = 4$. Bien que certaines expressions analytiques peuvent être dérivées, la solution exacte n'est pas connue. En effet, des calculs d'intégrales ou de racines sont nécessaires mais ne sont pas analytiquement réalisables et des méthodes numériques sont requises. C'est le cas pour le coefficient α intervenant dans la relation (5.20) qui ne dépend que de la géométrie, de la densité initiale et de γ. Pour les choix faits dans cette thèse, autrement dit une onde de choc sphérique se propageant dans un milieu à densité initiale uniforme $\rho_0 = 1$ et avec $\gamma = \frac{5}{3}$, on trouve $\alpha \simeq 0.4935902$. Afin d'avoir une onde de choc dont la position est $r_{\text{choc}} = 1$, à $t = 1$, il est évident en regardant l'équation (5.20) qu'il faut prendre $\mathcal{E}_{\text{init}} = \alpha \simeq 0.4935902$. En pratique, l'énergie à $t = 0$ est déposée sous forme d'énergie interne spécifique dans la maille à l'origine de sorte à obtenir une énergie totale égale à $\frac{\mathcal{E}_{\text{init}}}{2}$. Seulement la moitié de l'énergie $\mathcal{E}_{\text{init}}$ est déposée puisque le domaine sur lequel on réalise la simulation correspond à une demi-sphère. Plus de détails sur ces relations peuvent être trouvés dans [159, 160]. La solution de référence est quant à elle obtenue avec un programme Fortran tiré de [160]. La description de la méthode étape par étape y est également fournie.

5.5.3 Résultats numériques

Le maillage 50×50 et la carte de densité au temps final sont présentés dans la figure 5.23 pour le schéma VNM. La symétrie sphérique semble bien préservée au niveau de l'onde de choc et même à l'origine. On se rend compte que ce n'est finalement pas le cas au niveau de l'onde de choc comme on peut le voir sur la figure 5.25(b). Ces distorsions de maillage, uniquement observées pour le schéma à masses nodales variables, empirent avec le raffinement du maillage. En effet, la zone où l'énergie interne est déposée initialement se réduit au fur et à mesure que le nombre de mailles augmente conduisant à des déformations plus importantes dans les premiers instants au niveau de l'origine. On précise que ces distorsions sont également présentes en géométrie plane. Elles sont générées initialement par les flux de quantité de mouvement, dues aux masses variables, et empirent ensuite au cours du mouvement. L'amplification des erreurs est d'autant plus importante en géométrie axisymétrique. Les corrections apportées par les masses nodales ne sont en effet plus valides lorsque les mailles s'éloignent de parfaits rectangles. On s'aperçoit donc que les flux de quantité de mouvement—bien que nécessaires pour préserver la cohérence

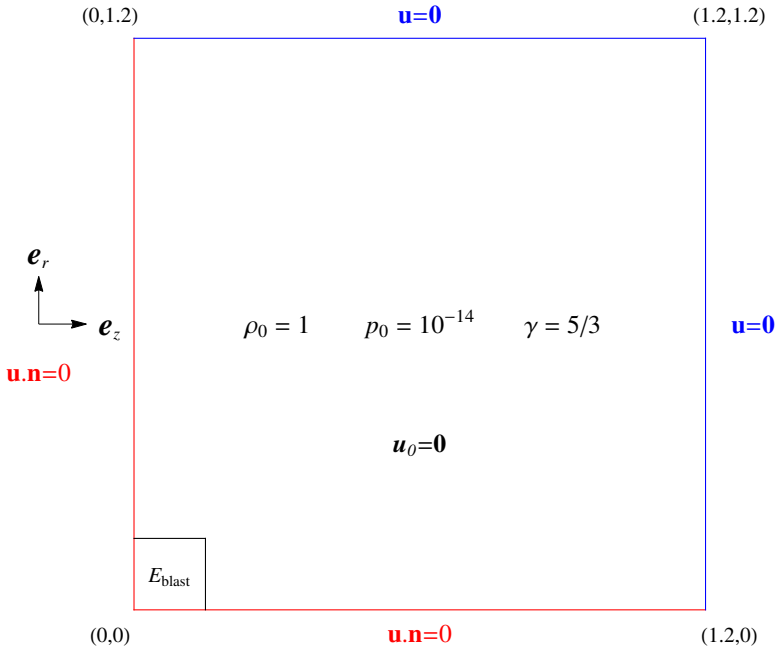


FIGURE 5.22 – Onde de choc de Sedov en géométrie axisymétrique sur maillage cartésien : conditions initiales et conditions aux limites.

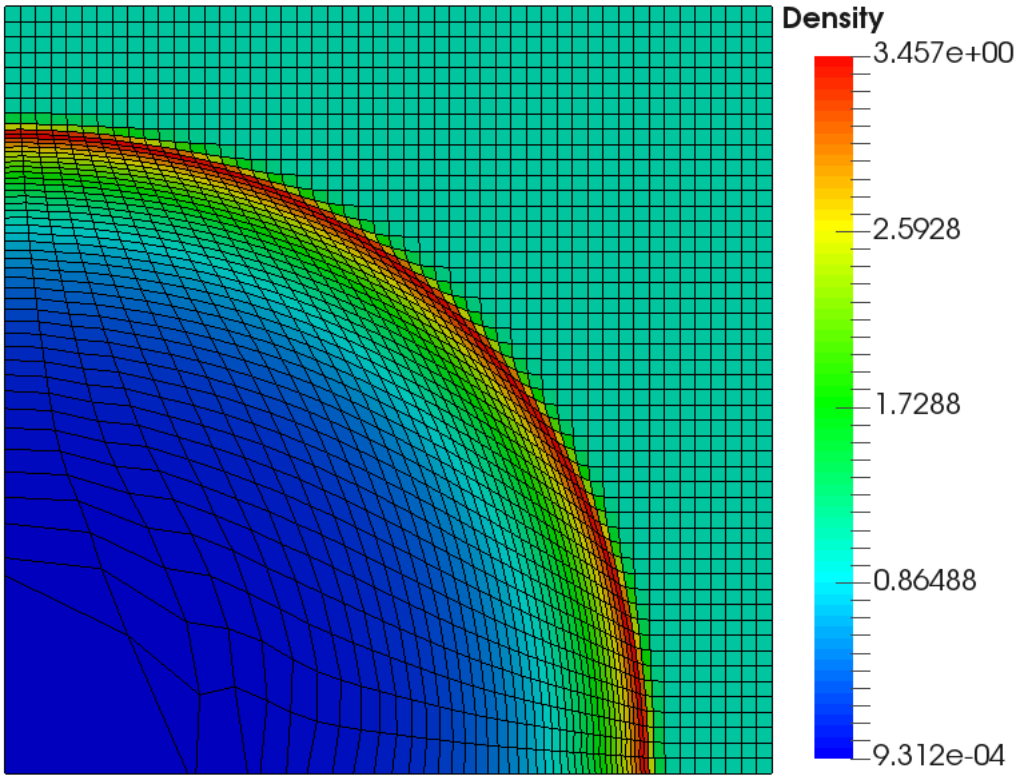
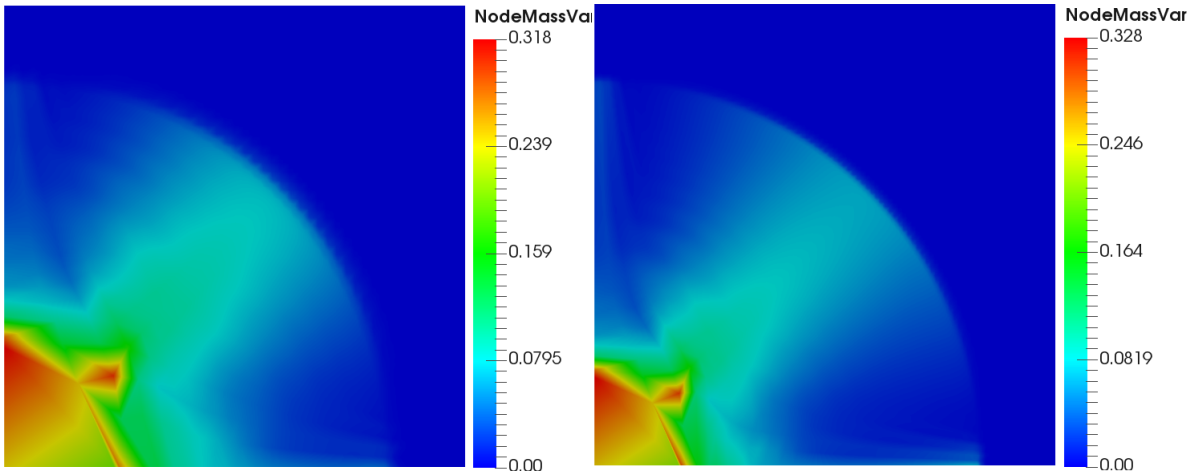
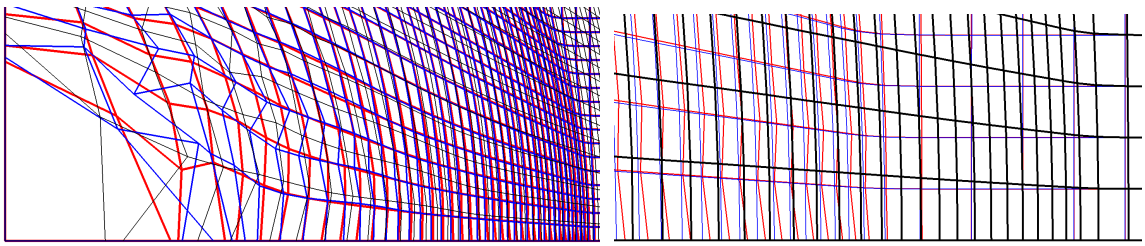


FIGURE 5.23 – Onde de choc sphérique de Sedov [158] en géométrie axisymétrique : maillage cartésien 50×50 et carte de densité au temps final pour le schéma VNM.



(a) Maillage 50×50 (b) Maillage 100×100

FIGURE 5.24 – Onde de choc sphérique de Sedov [158] en géométrie axisymétrique. Variation des masses nodales δm_p : (a) maillage 50×50 ; et (b) maillage 100×100.



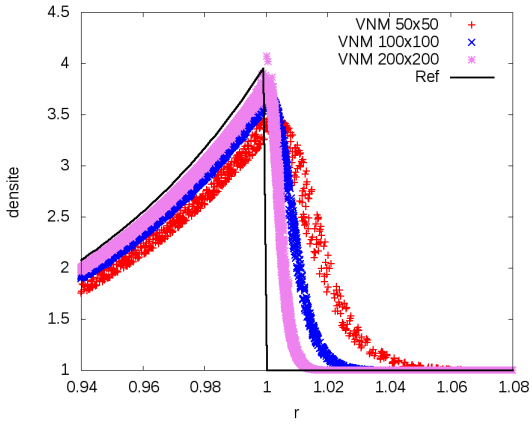
(a) (b)

FIGURE 5.25 – Onde de choc sphérique de Sedov [158] en géométrie axisymétrique. Comparaison des maillages cartésiens 50×50 finaux pour les schémas **VNM**, CCNM et STS : (a) zoom sur l'origine et l'onde de choc ; et (b) zoom sur l'onde de choc.

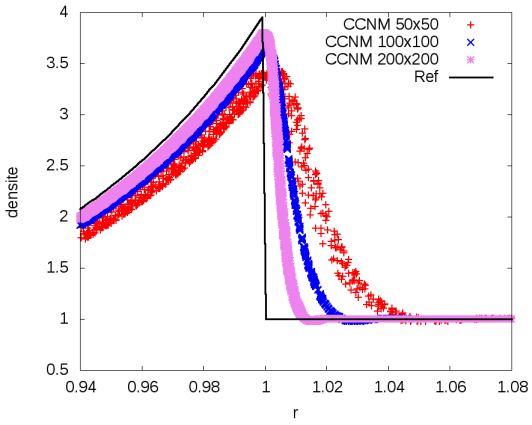
thermodynamique—peuvent également causer des erreurs dans la quantité de mouvement lorsque l'écoulement n'est pas régulier. En effet, l'analyse sur la variation des masses nodales effectuée dans les sections 2.5.7.2 et 3.6 n'est valide que dans les zones régulières. Même dans ces zones régulières, on a montré que les flux de quantité de mouvement sont seulement à l'ordre 1 sur l'axe $r = 0$, et non à l'ordre du schéma.

Ces conclusions sont en accord avec les variations de masse δm_p présentées sur la figure 5.24. Elles sont effectivement plus importantes à l'origine et loin d'être négligeables. Les maillages considérés étant encore trop grossiers et le filtrage inertiel aidant à corriger les distorsions du maillage, la variation δm_p reste assez faible sur l'axe et au niveau de l'onde de choc. Comme pour le cas du test de Noh sphérique sur maillage cartésien, on remarque que la variation de masse δm_p ne disparaît pas avec le raffinement du maillage.

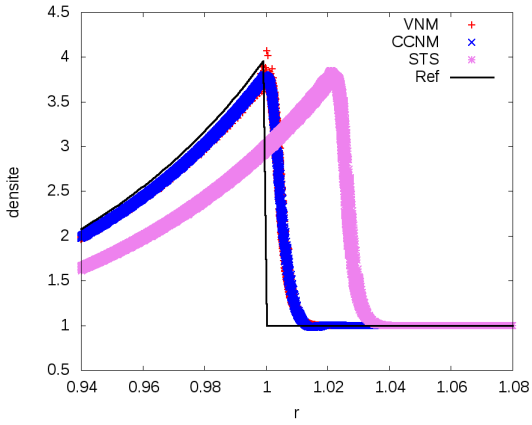
Sur la figure 5.25(b), le schéma CCNM n'est logiquement pas affecté par ces distorsions, la matrice de masse étant constante. Il préserve alors la symétrie sphérique de façon bien plus précise que le schéma à masses variables, en particulier après raffinement du maillage.



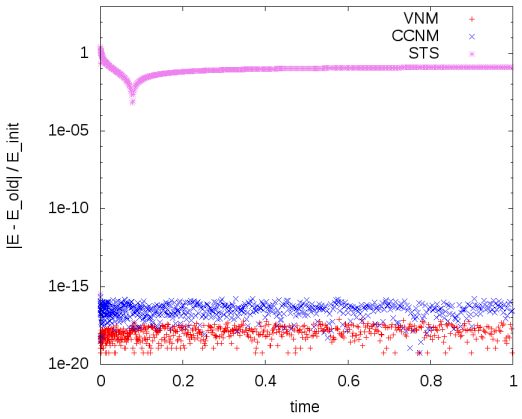
(a) VNM



(b) CCNM



(c) Comparaison des schémas



(d) $|\mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2}| \,/\, \mathcal{E}^0$

FIGURE 5.26 – Onde de choc sphérique de Sedov [158] en géométrie axisymétrique : (a) convergence en maillage pour le schéma VNM ; (b) convergence en maillage pour le schéma CCNM ; (c) comparaison des schémas VNM, CCNM et STS sur le maillage 200×200 ; et (d) suivi de l'évolution de l'énergie totale sur le maillage 50×50.

	STS	VNM	CCNM
CFL max	0.59	0.64	0.34

TABLE 5.3 – Onde de choc sphérique de Sedov [158] en géométrie axisymétrique. Coefficient CFL maximum obtenu pour les schémas VNM, CCNM et STS.

C'est cependant bien le schéma à masses variables qui respecte le mieux la sphéricité à l'origine comme le montre la figure 5.25(a). La symétrie du maillage final pour le schéma VNM est même clairement meilleure comparée au schéma STS, qui constitue pourtant notre référence dans ce domaine.

La conservation de l'énergie totale est validée par la figure 5.26. Les schémas conservatifs convergent effectivement vers la solution de référence détaillée dans la sous-section 5.5.2. On note dans les figures 5.26(a) et 5.26(c) les quelques points singuliers pour le schéma VNM. Ils sont dus aux distorsions de maillage au niveau de l'onde de choc évoquées un peu plus tôt. Le schéma STS, non conservatif, semble quant à lui capturer la bonne valeur pour le pic analytique de densité—sur le maillage 200×200 en tout cas—mais converge clairement vers une position erronée et trop avancée avec une erreur de l'ordre de 2.5 %.

La valeur propre minimum $\lambda_{\min}$ de la matrice de masse non diagonale pré-conditionnée par la matrice de masse diagonale et variable du schéma VNM est calculée numériquement sur ce cas test. Les valeurs trouvées au cours du temps sont toutes de l'ordre de $\frac{1}{4}$ à 10^{-2} près. C'est en accord avec les valeurs du coefficient CFL maximum affichées dans le tableau 5.3. On remarque en effet que le coefficient CFL pour le schéma CCNM est effectivement multiplié par approximativement $\sqrt{\lambda_{\min}} = \frac{1}{\sqrt{4}} = \frac{1}{2}$ par rapport au schéma VNM.

5.6 Conclusion du chapitre

La matrice de masse constante et non diagonale constitue un meilleur choix que la matrice de masse variable et diagonale lorsque les distorsions de maillage—en particulier les erreurs de symétrie—sont faibles. Le tube à choc de Sod sphérique sur maillage polaire en sous-section 5.2.1.2 en est un bon exemple. En revanche, cette matrice est un handicap lorsque les distorsions deviennent plus importantes. C'est le cas pour l'onde de choc sphérique de Noh sur maillage polaire, en raison de la perte de symétrie sphérique sur l'axe et proche de l'origine (voir la figure 5.17(b) pour le schéma VNM). Malgré le faible coefficient CFL choisi (CFL=0.1), les trop fortes distorsions du maillage empêchent alors le schéma CCNM d'atteindre le temps final en l'absence de correction par filtrage inertiel. De façon générale, les deux raisons de ce comportement sont évoquées dans la sous-section 5.4.1.2 : (i) le caractère constant de la matrice de masse ne permet pas de prendre en compte les éventuelles distorsions du maillage ; (ii) le caractère non diagonal de la matrice de masse peut propager plus vite les éventuelles erreurs dues aux distorsions de maillage.

De plus, dans le cas particulier de l'onde de choc de Noh, le pas de temps constant exacerbe les défauts de la matrice de masse non diagonale et constante. On rappelle finalement que le schéma CCNM demande la résolution de deux systèmes linéaires (cas en prédicteur/correcteur) par itération et que, numériquement, le coefficient CFL est divisé approximativement par deux par rapport au schéma à masses variables. Tous ces points nous amènent à choisir le schéma VNM pour la suite de cette thèse.

La masse nodale m_p choisie dans le chapitre 3 n'est pas parfaite. Elle préserve en effet parfaitement la symétrie plane sur un maillage cartésien—par construction—mais la symétrie sphérique est clairement perdue, même sur maillage polaire. Au niveau de l'axe $r = 0$ et proche de l'origine, les mailles deviennent des aiguilles et ne peuvent donc plus être assimilées à des rectangles, sur lesquelles la masse nodale m_p apporte les bonnes corrections. Elle constitue cependant un meilleur choix que les masses nodales classiques en géométrie axisymétrique, de type « Wilkins » [47], « Goad » [46] ou Caramana et coll. [62–65] par exemple. En effet, ces masses nodales produisent de fortes singularités proches de l'axe de symétrie, même sur un maillage cartésien, et elles ne permettent donc pas de capturer un écoulement plan en géométrie axisymétrique : voir la figure 5.4 pour le tube à choc de Sod.

L'extension à la méthodologie ALE dans le chapitre suivant est donc réalisée pour le schéma VNM avec la masse nodale m_p construite dans la sous-section 3.3.1.

Chapitre 6

Extension des schémas CSTS à la méthodologie ALE

Dans ce chapitre, on décrit en détails le développement d'un algorithme ALE multi-matériaux, de type « Lagrange + Projection », pour le schéma VNM dans une géométrie quelconque (2D plan, 2D axisymétrique ou 3D). La phase lagrangienne étant déjà construite dans le chapitre 2, on détaille ici la phase de projection. On conclut ce chapitre en vérifiant les propriétés de notre schéma ainsi qu'en résumant l'algorithme. Le travail de ce chapitre fait l'objet d'un article en cours d'écriture [126].

6.1 Introduction au schéma ALE

On se place dans le cadre d'un schéma ALE de type « Lagrange + Projection » pour une géométrie quelconque. On retrouve alors, dans notre algorithme, les étapes classiques et bien distinctes correspondant à une phase lagrangienne, une phase de lissage du maillage (ou régularisation) et une phase de projection. Les deux phases de remaillage et de projection sont considérées comme instantanées à l'échelle de l'hydrodynamique. Dans le cadre de cette thèse, seules des méthodes de lissage existantes sont utilisées et ce point n'est donc que très peu abordé dans la suite. À l'inverse, les phases lagrangiennes et de projection comportent des aspects nouveaux et sont alors explicitées en détails dans ce travail. L'introduction de ces nouveautés s'explique entre autre par le respect des propriétés de conservation et de cohérence thermodynamique dans un contexte décalé en temps et en espace. Le choix de projection au demi-instant $t^{n+1/2}$—impliquant la nécessité de définir la géométrie $\{\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}\}$—est l'une de ces nouveautés. Ce choix n'est pas unique et les phases de régularisation et de projection peuvent également être effectuées aux instants entiers t^n, tout en garantissant conservations et cohérence thermodynamique. La projection au demi-instant nous a paru cependant plus simple à mettre en œuvre pour des raisons de contrôle de l'entropie et constitue donc un choix subjectif.

Le travail de ce chapitre constitue une preuve de concept dans l'application de la méthodologie ALE à des schémas lagrangiens CSTS comportant des masses nodales plus générales. En particulier, l'analyse des défauts de conservation et de cohérence thermodynamique après la phase de projection permet d'exhiber la propriété que doivent respecter les masses nodales dans le cadre de la méthode de projection utilisée ici. Malgré tout, ce travail reste dans un cadre où un volume de contrôle V_p peut être associé à la masse nodale m_p. De façon générale, ce n'est pas forcément le cas : les masses nodales ne sont pas nécessairement basées sur un maillage dual construit géométriquement sur le maillage primal—voir pas exemple le cas du schéma CCNM—comme lors de la projection (voir aussi la remarque 2.7). Dans un contexte où la géométrie au demi-instant $t^{n+1/2}$ doit être déterminée, la méthode du point milieu pour définir la masse nodale $m_p^{n+1/2}$ semble tout indiquée. Comme pour la projection au demi-instant, d'autres choix sont possibles. En particulier, la méthode des trapèzes, discutée brièvement dans le chapitre 2, paraît plus adéquate si les phases de régularisation et de projection sont effectuées aux instants entiers t^n.

La phase lagrangienne et la gestion des mailles mixtes sont décrits dans le chapitre 2. On se concentre ici sur la phase de projection. Le respect de la cohérence thermodynamique dans un contexte conservatif oblige finalement à ajouter une phase de correction, toujours instantanée et à l'instant $t^{n+1/2}$, sur la vitesse et l'énergie interne. Ce chapitre décrit alors : (i) une phase, instantanée, de régularisation du maillage et de projection au temps $t^{n+1/2}$ des quantités du maillage lagrangien au maillage régularisé (section 6.2) ; (ii) une phase, instantanée, de correction de la vitesse et de l'énergie interne en $t^{n+1/2}$ (section 6.3) ; (iii) l'analyse des propriétés de la phase de projection et de l'algorithme ALE complet (section 6.4) ; et (iv) un résumé de l'algorithme ALE complet avec les équations correspondantes est présenté dans le tableau 6.1. Pour l'instant, sans autant de détails, toutes les étapes de l'algorithme ALE sont retranscrites dans la figure 6.1 pour faciliter la compréhension.

6.2 Phase de régularisation et de projection à l'instant $t^{n+1/2}$

6.2.1 Introduction

La phase de projection est une étape instantanée et bien distincte de l'évolution lagrangienne. Bien que des calculs eulériens, nécessitant une projection à tous les pas de temps sur la grille initiale, seront menés dans cette thèse, l'objectif est bien sûr de limiter son utilisation pour des raisons de coût de calcul et de précision. Ceci justifie l'approche générale choisie concernant la phase de projection, consistant à calculer les intersections exactes entre maillages. La phase de régularisation n'est pas abordée dans cette thèse :

Phase lagrangienne

1. Calcul du pas de temps $\Delta t^{n+1/2}$ entre les instants t^n et t^{n+1}
2. Calcul des vitesses prédites $\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2}$
3. Calcul des termes dissipatifs $\mathcal{D}_{cp}^{\varphi,n} = \{q_c^{\varphi,n}, \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n}\}$
4. Calcul des masses nodales $m_p^{\varphi,n+1/2}$ et des variations de masse $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1/2}$
5. Calcul des vitesses $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$
6. Mise à jour des positions $\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$
7. Calcul des énergies internes partielles $e_c^{\varphi,n+1/2}$

Régularisation instantanée au temps $t^{n+1/2}$

8. Régularisation des positions $\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$

Projection instantanée au temps $t^{n+1/2}$

9. Projection des variables centrées : $\rho_c^{\varphi,n+1/2}$, $\rho_c^{\varphi,n+1/2}\, e_c^{\varphi,n+1/2}$
10. Calcul des masses nodales $m_p^{\varphi,n+1/2}$ et des variations de masse $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1/2}$ sur la nouvelle géométrie
11. Projection des variables nodales : $\rho_p^{n+1/2}$, $\rho_p^{n+1/2}\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ et $\frac{1}{2}\, \rho_p^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\right)^2$

Corrections instantanée au temps $t^{n+1/2}$

12. Calcul des masses post-projection $m_p^{n+1/2,\mathrm{Proj}}$
13. Correction des vitesses $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ due au transfert de masse
14. Correction des énergies internes $e_c^{\varphi,n+1/2}$ due au transfert de masse et à la projection de la quantité de mouvement

Phase lagrangienne

15. Mise à jour des positions $\boldsymbol{x}_p^{n+1}$
16. Calcul des termes dissipatifs $\mathcal{D}_{cp}^{\varphi,n+1/2} = \{q_c^{\varphi,n+1/2}, \boldsymbol{f}_{cp}^{\varphi,n+1/2}\}$
17. Calcul des énergies internes partielles $e_c^{\varphi,n+1}$
18. Application de l'équation d'état du matériau φ pour les pressions partielles $p_c^{\varphi,n+1}$
19. Calcul des valeurs globales e_c^{n+1} et p_c^{n+1}

FIGURE 6.1 – Résumé de l'algorithme ALE

seul l'algorithme existant de Jun [29] est utilisé et rien de nouveau n'est apporté sur le sujet. Le lecteur peut se rapporter aux références pour plus de détails sur les méthodes de régularisation de Winslow [163, 164], de Tipton [27], de Brackbill et Saltzmann [28] et de Knupp [30]. Pour simplifier l'analyse et les notations, on se limite à des régularisations ne modifiant pas la connectivité du maillage : aucune maille et aucun nœud n'est créé ou détruit. Seules les positions des nœuds $\boldsymbol{x}_p$ sont donc modifiées dans l'objectif d'améliorer la qualité du maillage. Cependant, les conclusions se généralisent à des algorithmes de régularisation modifiant la connectivité [31].

6.2.2 Attentes sur la phase de projection

Une phase de projection doit respecter certaines propriétés [78, 79]. Le cahier des charges considéré dans cette thèse est le suivant :

1. Conservation : la phase de projection doit strictement conserver la quantité de mouvement et l'énergie totale du système ;
2. Cohérence thermodynamique : la phase de projection doit localement respecter les écoulements isentropiques et le second principe de la thermodynamique à l'ordre du schéma ;
3. Condition de DeBar [50] : un champ de vitesse uniforme doit être exactement préservé dans la phase de projection quelle que soit la distribution de densité ;
4. Continuité : aucune quantité n'est modifiée par la projection si le maillage n'est pas régularisé.

Les deux dernières conditions sont classiquement ajoutées dans la phase de projection des schémas ALE [5, 78, 79]. La condition de DeBar permet de ne pas créer de quantité de mouvement parasite à l'ordre 0 pouvant, entre autre, briser les éventuelles symétries tandis que la continuité empêche la création de résidus trop importants lorsque le maillage est peu ou pas régularisé. Comme annoncé en introduction 6.1, les phases de régularisation et de projection sont réalisées au demi-instant $t^{n+1/2}$ et sont instantanées. Ce sont donc les positions $\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$ qui sont régularisées. Afin d'alléger les équations, on simplifie les notations de cette section.

Notation 6.1. *L'exposant temporel est supprimé pour toutes les quantités projetées au temps $t^{n+1/2}$. Il est remplacé par*

- *« New » : quantité définie sur le maillage régularisé ;*
- *« Old » : quantité définie sur le maillage lagrangien ;*
- *« Proj » : quantité temporaire définie sur le maillage régularisé.*

La phase de régularisation ne modifiant pas la connectivité, c^{Old} et c^{New} se réfèrent en particulier à la même maille c : c^{Old} est la maille dans sa configuration lagrangienne (position lagrangienne des nœuds) tandis que c^{New} désigne la maille dans sa configuration

régularisée. L'aspect temporaire des quantités « Proj » signifie qu'elles n'interviennent que pour corriger la vitesse et l'énergie interne et seront oubliées ensuite. La section 6.3 décrit en détails ces corrections.

Le respect des conditions établies dans cette introduction est démontré dans la sous-section 6.2.6 après avoir décrit la méthode de projection (sous-section 6.2.3), la projection des variables nodales (sous-section 6.2.5) et la projection des variables centrées (sous-section 6.2.4).

6.2.3 Méthode de Dukowicz

La méthode de projection décrite ici est celle de J. Dukowicz [32, 33, 165, 166]. Pour une quantité centrée ι quelconque, la projection consiste à calculer la distribution discrète $\left\{\iota_c^{\text{New}}\right\}$ sur le maillage lissé connaissant $\left\{\iota_c^{\text{Old}}\right\}$ définie sur le maillage lagrangien.

Définition 6.1. *La valeur ι_c^{New} est la moyenne de ι sur chaque maille c^{New}*

$$\iota_c^{New} = \frac{1}{V_c^{New}} \int_{c^{New}} \iota \, dV, \tag{6.1}$$

où le volume infinitésimal est $dV = dx\,dy$ en géométrie plane et $dV = 2\,\pi\,r\,dr\,dz$ en géométrie axisymétrique.

Remarque 6.1. *La définition 6.1 est écrite en mesure de volume. Elle devient pour une mesure de masse*

$$\iota_c^{New} = \frac{1}{m_c^{New}} \int_{c^{New}} \rho\,\iota \, dV. \tag{6.2}$$

La méthode de Dukowicz consiste à reconstruire la quantité ι par un développement de Taylor. La reconstruction est notée $\widetilde{\iota}$ dans toute la suite. Pour une projection à l'ordre 1, on a $\widetilde{\iota}_c^{\text{Old}} = \iota_c^{\text{Old}}$ [165, 166]. Pour une projection à l'ordre 2 [32, 33], on réalise un développement à l'ordre supérieur, sur chaque maille c^{Old}, suivant

$$\widetilde{\iota}_c^{\text{Old}} = \iota_c^{\text{Old}} + \left(\boldsymbol{\nabla}\iota\right)_c^{\text{Old}} \cdot \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c^{\text{Old}}\right). \tag{6.3}$$

La position $\boldsymbol{x}_c^{\text{Old}}$ désigne la position du centre de masse de la maille c^{Old}. On décompose chaque maille c^{New} suivant $c^{\text{New}} = \bigcup_{c'} c^{\text{New}} \cap \left(c'\right)^{\text{Old}}$ pour obtenir la formule de projection, qui est donc à l'ordre 2,

$$\iota_c^{\text{New}} = \frac{1}{V_c^{\text{New}}} \sum_{c'} \int_{c^{\text{New}} \cap \left(c'\right)^{\text{Old}}} \widetilde{\iota}_{c'}^{\text{Old}} \, dV \tag{6.4}$$

$$= \frac{1}{V_c^{\text{New}}} \sum_{c'} V_{c^{\text{New}} \cap \left(c'\right)^{\text{Old}}} \left[\iota_{c'}^{\text{Old}} + \left(\boldsymbol{\nabla}\iota\right)_{c'}^{\text{Old}} \cdot \left(\boldsymbol{x}_{c^{\text{New}} \cap \left(c'\right)^{\text{Old}}} - \boldsymbol{x}_{c'}^{\text{Old}}\right)\right]. \tag{6.5}$$

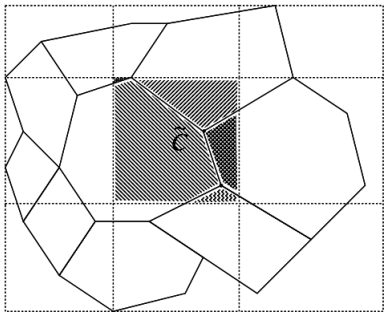


FIGURE 6.2 – Projection des quantités avec calcul exact des intersections entre les maillages lagrangien (lignes pleines) et régularisé (lignes pointillées). Pour reconstruire la quantité dans la maille lissée $\tilde{c}$, notée c^{New} dans cette thèse, les volumes et centres de masses des intersections élémentaires (zones hachurées) doivent être calculés. Image extraite de [3].

La position $\boldsymbol{x}_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}}$ est la position du centre de masse de l'intersection élémentaire $c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}$. En pratique, l'équation (6.5) est utilisée. L'intégrale (6.4) est donc évaluée de manière exacte. Cela consiste à définir géométriquement les polygones élémentaires $c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}$ puis à calculer son volume $V_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}}$ et son centre de masse $\boldsymbol{x}_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}}$: voir figure 6.2. Cette méthode constitue l'approche la plus générale et la plus robuste mais est coûteuse en temps de calcul. On précise que la somme dans les relations (6.4) et (6.5) porte sur toutes les mailles c' du domaine, y compris la maille courante c, et lorsque l'intersection $c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}$ est vide, son volume est nul, soit $V_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\text{Old}}} = 0$. Afin d'obtenir une projection monotone, le gradient $(\boldsymbol{\nabla}\iota)_c^{\text{Old}}$ dans la construction (6.3) est limité suivant la méthode de VanLeer [19].

6.2.4 Projection sur le maillage primal

Avant de définir les quantités projetées, on donne quelques détails sur la gestion des mailles mixtes.

6.2.4.1 Aspect multi-matériaux

Les quantités centrées que l'on projette dépendent du matériau φ. Les définitions et remarques de la sous-section 6.2.3 restent toujours valides mais un indice matériau φ est à ajouter sur toutes les quantités. Sans reprendre tous les détails, la quantité partielle projetée $\iota_c^{\varphi,\text{New}}$ est

$$\iota_c^{\varphi,\text{New}} = \frac{1}{V_c^{\varphi,\text{New}}} \sum_{c'} \int_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\varphi,\text{Old}}} \widetilde{\iota}_{c'}^{\varphi,\text{Old}} \, dV \tag{6.6}$$

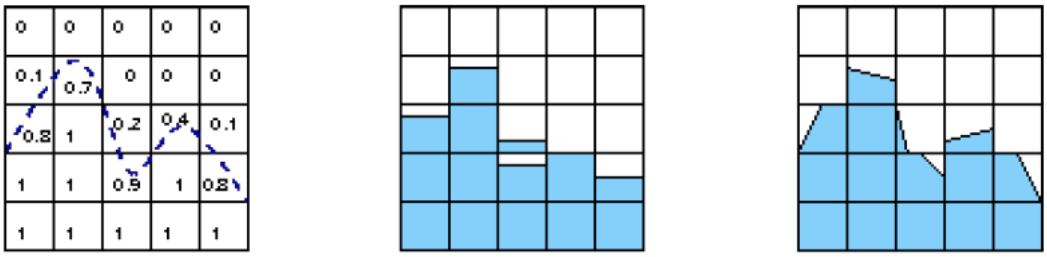
$$= \frac{1}{V_c^{\varphi,\text{New}}} \sum_{c'} V_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\varphi,\text{Old}}} \left[\iota_{c'}^{\varphi,\text{Old}} + (\boldsymbol{\nabla}\iota)_{c'}^{\varphi,\text{Old}} \cdot \left(\boldsymbol{x}_{c^{\text{New}} \cap (c')^{\varphi,\text{Old}}} - \boldsymbol{x}_{c'}^{\varphi,\text{Old}} \right) \right], \tag{6.7}$$

où $\boldsymbol{x}_{c'}^{\varphi,\mathrm{Old}}$ est le centre de masse de la maille matériau $(c')^{\varphi,\mathrm{Old}}$. Dans la reconstruction $\widetilde{\iota}_c^{\varphi,\mathrm{Old}}$, le terme d'ordre un est alors défini au centre de masse de $(c')^{\varphi,\mathrm{Old}}$ et non de $(c')^{\mathrm{Old}}$ ce qui permet d'être conservatif par matériau. Afin d'évaluer géométriquement l'intersection $c^{\mathrm{New}} \cap (c')^{\varphi,\mathrm{Old}}$ et le centre de masse $\boldsymbol{x}_{c'}^{\varphi,\mathrm{Old}}$, intervenant dans la relation (6.7), la définition, également géométrique, de la maille matériau lagrangienne $c^{\varphi,\mathrm{Old}}$ doit être connue. De nombreuses méthodes existent pour construire $c^{\varphi,\mathrm{Old}}$, permettant alors de définir uniquement des mailles pures et d'utiliser la méthode de Dukowicz telle quelle. On considère dans cette thèse les méthodes de reconstruction d'interfaces de type VoF (Volume of Fluid), utilisant les fractions volumiques f_c^φ : voir figure 6.3(a). Les premières méthodes de ce type, et également les plus simples, sont nommées VoF-SLIC [34, 35] (Simple Line Interface Calculation). Elles définissent une interface entre matériaux non-miscibles dans une maille mixte avec un segment parallèle aux lignes du maillage : figure 6.3(b). Ces reconstructions étant uniquement d'ordre un, on considère ici une méthode de type VoF-PLIC [36] (Piecewise Linear Interface Calculation). Une interface dans une maille mixte est alors représentée par un segment mais qui n'est plus nécessairement parallèle aux lignes du maillage : figure 6.3(c). Le segment est défini par une normale $\boldsymbol{n}_c$ et une distance d à un point de référence (origine ou un nœud dans la maille). La normale par matériau φ est déterminée grâce aux fractions volumiques f_c^φ, par une méthode des moindres-carré par exemple [167], suivant

$$\boldsymbol{n}_c^\varphi = \frac{\boldsymbol{\nabla} f_c^\varphi}{|\boldsymbol{\nabla} f_c^\varphi|}. \tag{6.8}$$

La distance d^φ au point de référence est déterminée de façon à strictement respecter la fraction volumique f_c^φ. Les formules analytiques de [168] pour des mailles convexes en 2D plan ou axisymétrique sont utilisées dans cette thèse. Sous réserve d'une précision à l'ordre deux pour le transport des fractions volumiques et le calcul de la normale $\boldsymbol{n}_c$, les méthodes de type VoF-PLIC permettent de retrouver l'ordre deux. De plus, elles conservent strictement les volumes par construction et sont simples à mettre en œuvre, même dans le cas d'une maille contenant plus de 2 matériaux. Finalement, on remarque que le volume matériau $V_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ sur le maillage lissé est également requis pour le calcul de $\iota_c^{\varphi,\mathrm{New}}$. Ce volume est déduit des fractions volumiques projetées $f_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ (voir la sous-section 6.2.4.2 suivante).

La méthode de reconstruction d'interface décrite souffre de plusieurs défauts : (i) l'unicité de la normale pour tous les matériaux peut engendrer des éclats, (ii) l'interface n'est pas continue d'une maille à l'autre, (iii) les fractions volumiques étant discontinues à l'interface par construction, le calcul du gradient peut se révéler imprécis. Ces défauts sont corrigées dans de nombreuses autres méthodes, dérivées ou non de celle décrite, mais cela dépasse le cadre de cette thèse. À titre d'exemple, les méthodes Level-Set [169–172] ont beaucoup de succès. Il faut également citer les méthodes de type MoF (Moment of Fluid) [37, 38] qui introduisent des informations supplémentaires dans l'algorithme VoF



(a) Fractions volumiques (b) SLIC (c) PLIC

FIGURE 6.3 – Reconstruction d'interface sur un maillage cartésien : (a) fractions volumiques f_c^{φ} ; (b) méthode SLIC [34, 35] ; et (c) méthode PLIC [36]. Images extraites de [169].

permettant de gérer le cas de mailles mixtes contenant trois matériaux ou plus. Une comparaison entre différentes méthodes de reconstruction d'interface est disponible dans [173].

6.2.4.2 Définition des quantités centrées projetées

La première étape consiste à définir les fractions volumiques $f_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ sur le maillage régularisé. Le principe est le suivant : (i) on construit le maillage lagrangien matériau formé des mailles $c^{\varphi,\mathrm{Old}}$ avec la reconstruction d'interface ; (ii) on projette ce maillage matériau sur le maillage régularisé formé des mailles c^{New} et (iii) on recalcule les fractions volumiques à partir de cette projection. Ceci revient à évaluer l'expression (6.9) de la définition 6.2. Comme expliqué précédemment, cela permet aussi de définir les volumes matériaux $V_c^{\varphi,\mathrm{New}}$.

Définition 6.2. *Les fractions volumiques sur le maillage régularisé sont obtenues par*

$$f_c^{\varphi,New} = \frac{1}{V_c^{New}} \sum_{c'} \int_{c^{New} \cap (c')^{\varphi,Old}} dV. \tag{6.9}$$

Le volume matériau $V_c^{\varphi,New}$ est ensuite défini par $V_c^{\varphi,New} = f_c^{\varphi,New} V_c^{New}$.

Les projections des quantités centrées sont à présent possibles.

Définition 6.3. *Les quantités matériaux centrées que l'on projette dans l'algorithme ALE sont*

$$\rho_c^{\varphi,Old}, \tag{6.10a}$$

$$(\rho\, e)_c^{\varphi,Old} = \rho_c^{\varphi,Old}\, e_c^{\varphi,Old}. \tag{6.10b}$$

Remarque 6.2. *La pression et la température sont projetées afin d'initialiser l'algorithme de Newton appliqué au système (2.71)-(2.43) au temps t^{n+1}. Les valeurs p_c^n et T_c^n de l'itération précédente sont transportées des instants t^n à $t^{n+1/2}$, la projection est effectuée*

puis ces quantités sont à nouveaux supposées transportées des instants $t^{n+1/2}$ à t^{n+1}. L'état thermodynamique obtenu est grossier mais il est suffisant en pratique pour obtenir la convergence de l'algorithme de Newton pour l'équation d'état des gaz parfaits (voir aussi la remarque 2.5).

On obtient, sur le maillage lissé, les quantités détaillées dans la définition 6.4.

Définition 6.4. *La densité partielle et l'énergie interne partielle projetées sont*

$$\rho_c^{\varphi,New} = \frac{1}{V_c^{\varphi,New}} \sum_{c'} \int_{c^{New} \cap (c')^{\varphi,Old}} \widetilde{\rho}_c^{\varphi,Old} \, dV, \tag{6.11a}$$

$$e_c^{\varphi,Proj} = \frac{(\rho\, e)_c^{\varphi,New}}{\rho_c^{\varphi,New}}, \text{ où } (\rho\, e)_c^{\varphi,New} = \frac{1}{V_c^{\varphi,New}} \sum_{c'} \int_{c^{New} \cap (c')^{\varphi,Old}} \widetilde{(\rho\, e)}_{c'}^{\varphi,Old} \, dV. \tag{6.11b}$$

Remarque 6.3. *L'énergie interne projetée est délibérément notée différemment des autres quantités centrées en vu de la correction à venir : section 6.3. De plus, le gradient d'énergie interne volumique intervenant dans la reconstruction $\widetilde{(\rho\, e)}$ de la relation (6.11b) possède une définition particulière et, entre autre, n'est pas limité comme annoncé dans la partie 6.2.3. Ceci est discuté au moment de l'analyse de la cohérence thermodynamique de la phase de projection dans la partie 6.2.6.4.*

Finalement, les masses partielles et globales des mailles sont évaluées de la façon suivante

$$m_c^{\varphi,\mathrm{New}} = \rho_c^{\varphi,\mathrm{New}} \, V_c^{\varphi,\mathrm{New}}, \tag{6.12}$$

$$m_c^{\mathrm{New}} = \sum_{\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}, \tag{6.13}$$

ce qui permet d'obtenir des masses nodales géométriques ainsi que leur variation sur le maillage régularisé suivant la définition 2.11

$$m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}} = \frac{V_{cp}^{\mathrm{New}}}{V_c^{\mathrm{New}}} \, m_c^{\varphi,\mathrm{New}}, \tag{6.14}$$

$$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,\mathrm{New}} = \frac{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_c^{\mathrm{New}}} \, \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\mathrm{New}}. \tag{6.15}$$

On rappelle que V_{cp} est le volume de coin de la définition 3.4. Évidemment, on retrouve les masses nodales et les variations de masses globales si on somme sur les matériaux conformément aux équations (2.73) et (2.74)

$$m_{cp}^{\mathrm{New}} = \sum_{\varphi} m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}} \text{ et } m_p^{\mathrm{New}} = \sum_{c \in C(p)} m_{cp}^{\mathrm{New}},$$

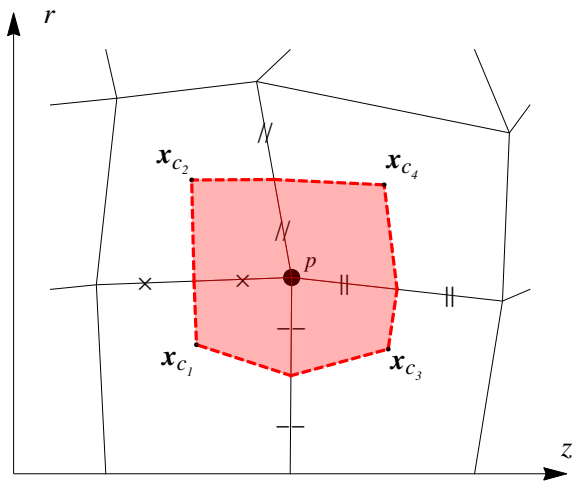


FIGURE 6.4 – Exemple d'une maille duale p (zone colorée) de projection utilisée dans cette thèse en géométrie axisymétrique. Elle est construite sur un maillage primal quadrangulaire. Le volume V_p^{D} est défini avec les centres de masse des mailles primales et les milieux des arêtes connectées au nœud p. Le volume V_p^{D} ne correspond pas au volume dual pondéré V_p de la définition 3.4 utilisé pour construire les masses nodales scalaires du schéma VNM : voir la sous-section 3.3.

$$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\mathrm{New}} = \sum_{\varphi} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,\mathrm{New}}.$$

6.2.5 Projection sur le maillage dual

Les définitions et remarques de la sous-section précédente s'appliquent pour la projection des quantités aux nœuds. On définit pour cela un maillage dual dont les nœuds sont les centres de masse des mailles c du maillage primal. Chaque élément de ce maillage dual est appelé maille duale. On note également que, sous l'hypothèse d'iso-déformation, toutes les quantités intervenant dans cette sous-section sont globales et donc communes à tous les matériaux φ.

Définition 6.5. *Le maillage dual est construit géométriquement à partir du maillage primal. Les mailles duales, toujours notées p, ont pour sommets les milieux des arêtes et les centres de masse du maillage primal et sont délimitées par des segments. Une maille duale p a pour volume V_p^D : voir la figure 6.4.*

Remarque 6.4. *Sur un maillage 2D quadrangulaire, les mailles duales p ne sont plus des quadrangles mais des octogones. De plus, un nœud p du maillage primal n'est pas nécessairement le centre de masse de la maille duale associée. On note enfin que le volume V_p^D est différent du volume de contrôle $\sum_{c\in C(p)} V_{cp} = V_p$ où V_{cp} est le volume de coin pondéré de la définition 3.4.*

En considérant la remarque 6.4, on spécifie alors l'équivalent de la reconstruction (6.3) faite sur une maille primale pour éviter toute ambiguïté. Pour une quantité nodale quelconque η, on effectue le développement de Taylor suivant sur le maillage dual lagrangien :

$$\widetilde{\eta}_p^{\text{Old}} = \eta_p^{\text{Old}} + (\boldsymbol{\nabla}\eta)_p^{\text{Old}} \cdot \left(\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{x}}_p^{\text{Old}}\right), \tag{6.16}$$

où $\hat{\boldsymbol{x}}_p^{\text{Old}}$ est le centre de masse de la maille duale lagrangienne p. Il est à ne surtout pas confondre avec la position $\boldsymbol{x}_p$ du nœud p sur le maillage primal. Le terme d'ordre un dans la reconstruction (6.16) est donc bien défini au centre de masse de la maille duale p et non en $\boldsymbol{x}_p$, ce qui est fondamental pour les propriétés de conservation (voir la proposition 6.1). La quantité projetée η_p^{New}, en mesure de volume, est donc

$$\eta_p^{\text{New}} = \frac{1}{V_p^{\text{D,New}}} \sum_{p'} \int_{p^{\text{New}} \cap (p')^{\text{Old}}} \widetilde{\eta}_{p'}^{\text{Old}} \, dV \tag{6.17}$$

$$= \frac{1}{V_p^{\text{D,New}}} \sum_{p'} V_{p^{\text{New}} \cap (p')^{\text{Old}}} \left[\eta_{p'}^{\text{Old}} + (\boldsymbol{\nabla}\eta)_{p'}^{\text{Old}} \cdot \left(\hat{\boldsymbol{x}}_{p^{\text{New}} \cap (p')^{\text{Old}}} - \hat{\boldsymbol{x}}_{p'}^{\text{Old}}\right)\right], \tag{6.18}$$

où la somme sur p' porte sur tous les nœuds du maillage, y compris sur le nœud p. On peut à présent définir les quantités nodales qui sont projetées dans notre algorithme ALE.

Définition 6.6. *Les quantités nodales que l'on projette dans l'algorithme ALE sont*

$$\rho_p^{Old} = \frac{m_p^{Old}}{V_p^{D,Old}}, \tag{6.19a}$$

$$(\rho\,\boldsymbol{u})_p^{Old} = \rho_p^{Old}\,\boldsymbol{u}_p^{Old}, \tag{6.19b}$$

$$\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{Old} = \tfrac{1}{2}\,\rho_p^{Old}\,\left(\boldsymbol{u}_p^{Old}\right)^2. \tag{6.19c}$$

On obtient alors une nouvelle masse nodale, appelée masse nodale post-projection et notée m_p^{Proj}. Cette masse joue un rôle important dans la suite ce qui sera discuté dans la section 6.3 suivante.

Définition 6.7. *On définit la masse post-projection m_p^{Proj} par*

$$m_p^{Proj} = \rho_p^{New}\, V_p^{D,New}, \text{ où } \rho_p^{New} = \frac{1}{V_p^{D,New}} \sum_{p'} \int_{p^{New} \cap (p')^{Old}} \widetilde{\rho}_{p'}^{Old} \, dV. \tag{6.20}$$

On définit également les masses post-projection pour chaque coin et par matériau φ

$$m_{cp}^{Proj} = \frac{m_{cp}^{New}}{m_p^{New}} m_p^{Proj} \text{ et } m_{cp}^{\varphi,Proj} = \frac{m_{cp}^{\varphi,New}}{m_{cp}^{New}}\, m_{cp}^{Proj}, \tag{6.21}$$

où les masses m_{cp}^{New}, $m_{cp}^{\varphi,New}$ et m_p^{New} sont les masses géométriques construites dans la sous-section 6.2.4 lors de la projection des quantités centrées.

On note la similarité avec l'approche de Kenamond et coll. [5] en géométrie axisymétrique où deux masses nodales différentes apparaissent également après projection. La première, notée m_p^{ng}, est celle utilisée lors de la phase lagrangienne. En particulier, cette masse nodale ne correspond pas à un objet géométrique car $m_p^{\text{ng}} = 0$ lorsque le nœud p est sur l'axe de symétrie, soit $r_p = 0$ (approche « area-weighted »). La seconde masse nodale, notée m_p^{geom}, est attachée à un volume géométrique et est projetée. La masse nodale m_p^{ng} de [5] (resp. m_p^{geom}) est donc l'équivalent de la masse m_p (resp. m_p^{Proj}) utilisée dans cette thèse. La vitesse et l'énergie cinétique projetées sont quant à elles données dans la définition suivante.

Définition 6.8. *La vitesse et l'énergie cinétique projetées sont :*

$$\boldsymbol{u}_p^{Proj} = \frac{(\rho\,\boldsymbol{u})_p^{New}}{\rho_p^{New}}, \text{ où } (\rho\,\boldsymbol{u})_p^{New} = \frac{1}{V_p^{D,New}} \sum_{p'} \int_{p^{New}\cap(p')^{Old}} \widetilde{(\rho\,\boldsymbol{u})}_{p'}^{Old}\, dV, \tag{6.22a}$$

$$\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{New} = \frac{1}{V_p^{D,New}} \sum_{p'} \int_{p^{New}\cap(p')^{Old}} \widetilde{\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)}_{p'}^{Old}\, dV. \tag{6.22b}$$

Remarque 6.5. *Comme pour l'énergie interne (remarque 6.3), la vitesse projetée est notée différemment des autres quantités nodales. En effet, elle subira une correction dans la section suivante.*

Remarque 6.6. *Dans le cas de la projection de l'impulsion (6.19b), le gradient à construire est $(\boldsymbol{\nabla}\rho\,\boldsymbol{u})_p^{Old}$. En pratique, ce gradient est séparé en deux parties*

$$(\boldsymbol{\nabla}\rho\,\boldsymbol{u})_p^{Old} = \rho_p^{Old}\,(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u})_p^{Old} + \boldsymbol{u}_p^{Old} \otimes (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p^{Old}. \tag{6.23}$$

Cela permet de projeter un champ de vitesse uniforme de manière exacte (voir la partie 6.2.6.5).

6.2.6 Résultats intermédiaires sur la phase de projection

Cette partie est consacrée à la démonstration du cahier des charges mis en place au début de cette section 6.2. Cela permet d'alléger les démonstrations pour les propriétés de l'algorithme ALE complet en section 6.4.

6.2.6.1 Conservation des quantités projetées

Le résultat qui suit est fondamental puisqu'il permet d'assurer que la projection est strictement conservative.

Proposition 6.1. *La projection est strictement conservative pour les quantités nodales et les quantités centrées par matériau, autrement dit*

$$\sum_p V_p^{D,New}\,\eta_p^{New} = \sum_p V_p^{D,Old}\,\eta_p^{Old}, \tag{6.24a}$$

$$\sum_c V_c^{\varphi,New}\,\iota_c^{\varphi,New} = \sum_c V_c^{\varphi,Old}\,\iota_c^{\varphi,Old}, \tag{6.24b}$$

pour toute quantité nodale η et toute quantité partielle et centrée ι.

Démonstration. Concernant l'égalité (6.24a), on écrit

$$\begin{aligned}
\sum_p V_p^{\mathrm{New}}\,\eta_p^{\mathrm{New}} &= \sum_p \sum_{p'} \int_{p^{\mathrm{New}}\cap (p')^{\mathrm{Old}}} \widetilde{\eta}_{p'}^{\mathrm{Old}}\,dV \\
&= \sum_{p'} \sum_p \int_{p^{\mathrm{New}}\cap (p')^{\mathrm{Old}}} \widetilde{\eta}_{p'}^{\mathrm{Old}}\,dV \\
&= \sum_{p'} \int_{(p')^{\mathrm{Old}}} \widetilde{\eta}_{p'}^{\mathrm{Old}}\,dV \\
&= \sum_{p'} V_{p'}^{\mathrm{Old}}\,\eta_{p'}^{\mathrm{Old}},
\end{aligned}$$

car le terme d'ordre un dans la reconstruction $\widetilde{\eta}_{p'}^{\mathrm{Old}}$ est défini au centre de masse de la maille duale $(p')^{\mathrm{Old}}$. De la même manière, on obtient l'égalité (6.24b)

$$\sum_c V_c^{\varphi,\mathrm{New}}\,\iota_c^{\varphi,\mathrm{New}} = \sum_c V_c^{\varphi,\mathrm{Old}}\,\iota_c^{\varphi,\mathrm{Old}}.$$

□

6.2.6.2 Conservation de la quantité de mouvement

Le résultat sur la conservation de la quantité de mouvement est une application directe de la proposition 6.1.

Théorème 6.1. *La quantité de mouvement conservée après projection est*

$$\sum_p m_p^{Proj}\,\boldsymbol{u}_p^{Proj}, \tag{6.25}$$

autrement dit

$$\sum_p \left(m_p^{Proj}\,\boldsymbol{u}_p^{Proj} - m_p^{Old}\,\boldsymbol{u}_p^{Old}\right) = \mathbf{0}. \tag{6.26}$$

Démonstration. On a

$$\begin{aligned}\sum_p m_p^{\mathrm{Proj}}\,\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} &= \sum_p V_p^{\mathrm{D,New}}\,(\rho\,\boldsymbol{u})_p^{\mathrm{New}}\\ &= \sum_p V_p^{\mathrm{D,Old}}\,(\rho\,\boldsymbol{u})_p^{\mathrm{Old}}\\ &= \sum_p m_p^{Old}\,\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Old}},\end{aligned}$$

par construction de ρ_p^{Old} : voir la définition 6.6. □

Remarque 6.7. *Le résultat 6.1 permet de voir que c'est la masse nodale post-projection m_p^{Proj} qui intervient dans la quantité de mouvement conservée après projection. Ce constat est discuté dans la section 6.3.*

6.2.6.3 Conservation de l'énergie totale

On exprime ici la définition de l'énergie totale conservée après la phase de projection.

Théorème 6.2. *L'énergie totale du système conservée après la phase de projection est*

$$\sum_p V_p^{New}\,\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{New} + \sum_c m_c^{New}\,e_c^{Proj}, \tag{6.27}$$

autrement dit

$$\sum_p \left[V_p^{New}\,\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{New} - \tfrac{1}{2}m_p^{Old}\left(\boldsymbol{u}_p^{Old}\right)^2\right] + \sum_c \left[m_c^{New}\,e_c^{Proj} - m_c^{Old}\,e_c^{Old}\right] = 0. \tag{6.28}$$

Démonstration. On applique la proposition 6.1 pour obtenir

$$\begin{aligned}\sum_p V_p^{\mathrm{D,New}}\,\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} &= \sum_p V_p^{\mathrm{D,Old}}\,\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{Old}}\\ &= \sum_p V_p^{\mathrm{D,Old}}\,\tfrac{1}{2}\rho_p^{\mathrm{Old}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Old}}\right)^2\\ &= \sum_p \tfrac{1}{2}m_p^{\mathrm{Old}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Old}}\right)^2,\end{aligned}$$

par définition de ρ_p^{Old}. Concernant l'énergie interne partielle, on utilise également la proposition 6.1. On a

$$\begin{aligned}\sum_c m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\,e_c^{\varphi,\mathrm{Proj}} &= \sum_c V_c^{\varphi,\mathrm{New}}\,(\rho\,e)_c^{\varphi,\mathrm{New}}\\ &= \sum_c V_c^{\varphi,\mathrm{Old}}\,(\rho\,e)_c^{\varphi,\mathrm{Old}}\end{aligned}$$

$$= \sum_c V_c^{\varphi,\text{Old}}\, \rho_c^{\varphi,\text{Old}}\, e_c^{\varphi,\text{Old}}$$
$$= \sum_c m_c^{\varphi,\text{Old}}\, e_c^{\varphi,\text{Old}},$$

pour chaque matériau φ. Il reste à sommer le résultat précédent sur les matériaux pour avoir $\sum_c m_c^{\text{New}}\, e_c^{\text{Proj}} = \sum_c m_c^{\text{Old}}\, e_c^{\text{Old}}$. La relation

$$\sum_p \left[V_p^{\text{New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} - \tfrac{1}{2} m_p^{\text{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Old}}\right)^2 \right] + \sum_c \left[m_c^{\text{New}}\, e_c^{\text{Proj}} - m_c^{\text{Old}}\, e_c^{\text{Old}} \right] = 0,$$

est donc vérifiée. □

Remarque 6.8. *De façon analogue à la quantité de mouvement (remarque 6.7), on note que la définition de l'énergie cinétique intervenant dans le bilan d'énergie totale conservée n'est pas celle attendue, autrement dit elle est différente de* $\sum_p \frac{1}{2}\, m_p^{New} \left(\boldsymbol{u}_p^{Proj}\right)^2$. *Une discussion à ce sujet est menée dans la section suivante 6.3 et des corrections seront présentées.*

6.2.6.4 Cohérence thermodynamique

Les problèmes de cohérence thermodynamique dans la phase de projection décrite ici ne peuvent apparaître que lors de la projection de l'énergie interne. Globalement, l'énergie interne volumique du système est strictement conservée et il n'y a donc aucune production ou destruction d'entropie : voir la proposition 6.1. Localement, cette énergie interne est simplement relocalisée. Si on veut s'assurer que cette relocalisation ne brise pas la cohérence thermodynamique, le gradient $\boldsymbol{\nabla} \rho\, e$ ne peut pas être évalué de n'importe quelle manière. Dans cette thèse, on fait l'hypothèse d'uniformité de l'entropie au premier ordre, autrement dit $\boldsymbol{\nabla} s = \mathbf{0}$ [127–131]. Toute l'entropie nécessaire (physique) étant déposée lors de la phase lagrangienne, cela permet de ne créer que des résidus d'entropie aux ordres supérieurs lors de la projection de l'énergie interne.

En partant de la relation (1.5), on obtient $\boldsymbol{\nabla} e = -p\, \boldsymbol{\nabla} v + T\, \boldsymbol{\nabla} s$, où $v = \frac{1}{\rho}$ est le volume spécifique. En faisant apparaître le gradient de densité dans cette dernière équation et en appliquant l'hypothèse $\boldsymbol{\nabla} s = \mathbf{0}$, on a $\boldsymbol{\nabla} e = -p\, \boldsymbol{\nabla} v = \frac{p}{\rho^2}\, \boldsymbol{\nabla} \rho$. On multiplie par la densité ρ pour avoir $\rho\, \boldsymbol{\nabla} e = \frac{p}{\rho} \boldsymbol{\nabla} \rho$ et on ajoute $e\, \boldsymbol{\nabla} \rho$

$$\boldsymbol{\nabla} \rho\, e = \rho\, \boldsymbol{\nabla} e + e\, \boldsymbol{\nabla} \rho = \tfrac{p}{\rho}\, \boldsymbol{\nabla} \rho + e\, \boldsymbol{\nabla} \rho = \left(\tfrac{p}{\rho} + e\right) \boldsymbol{\nabla} \rho. \tag{6.29}$$

Le gradient (6.29) est appelé gradient isentropique. L'hypothèse $\boldsymbol{\nabla} s = \mathbf{0}$ détermine donc le gradient d'énergie interne volumique $\boldsymbol{\nabla} \rho\, e$. On note que le gradient $\boldsymbol{\nabla} \rho\, e$ n'est plus limité et que la monotonie n'est plus assurée pour l'énergie interne volumique. Le choix (6.29)

pour la projection de l'énergie interne revient alors à privilégier l'entropie à la monotonie [132].

6.2.6.5 Préservation d'un champ de vitesse constant

Cette propriété, que l'on doit à DeBar [50], est propre à la phase de projection. Elle stipule qu'un champ de vitesse constant doit être exactement projeté quelle que soit la distribution de densité. Son respect permet d'éviter la création de forces parasites à l'ordre zéro pouvant notamment briser les éventuelles symétries. Bien que cette propriété paraît évidente pour une projection à l'ordre deux, elle n'est pas nécessairement vérifiée si aucune précaution n'est prise pour le calcul du gradient $(\boldsymbol{\nabla}\rho\,\boldsymbol{u})_p^{\mathrm{Old}}$ dans la reconstruction (6.16).

Proposition 6.2. *Si on suppose que* $\boldsymbol{u}_p^{Old} = \boldsymbol{u}$, $\forall p$, *alors on a* $\boldsymbol{u}_p^{Proj} = \boldsymbol{u}$, $\forall p$.

Démonstration. On rappelle la définition de la vitesse projetée $\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}$

$$\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} = \frac{(\rho\,\boldsymbol{u})_p^{\mathrm{New}}}{\rho_p^{\mathrm{New}}}, \text{ avec } (\rho\,\boldsymbol{u})_p^{\mathrm{New}} = \frac{1}{V_p^{\mathrm{D,New}}} \sum_{p'} \int_{p^{\mathrm{New}} \cap (p')^{\mathrm{Old}}} \widetilde{(\rho\,\boldsymbol{u})}_{p'}^{\mathrm{Old}}\, dV.$$

Sous l'hypothèse $\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Old}} = \boldsymbol{u}$, $\forall p$, et parce que l'on sépare le gradient $\boldsymbol{\nabla}\rho\,\boldsymbol{u}$ en deux parties (remarque 6.6), on obtient que $\widetilde{(\rho\,\boldsymbol{u})}_{p'}^{\mathrm{Old}} = \widetilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}}\,\boldsymbol{u}$, pour tout p'. Il suffit simplement de remarquer que $\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u} = 0$ sous l'hypothèse d'uniformité de la vitesse. Ceci implique que

$$(\rho\,\boldsymbol{u})_p^{\mathrm{New}} = \rho_p^{\mathrm{New}}\,\boldsymbol{u},$$

et conclut la preuve. □

6.2.6.6 Continuité de la projection

La continuité est fondamentale dans les simulations ne nécessitant pas de régularisation à chaque pas de temps. Elle assure qu'aucun résidu numérique important n'apparaît dans les quantités projetées, lors de la phase de projection, lorsque le maillage est peu ou pas régularisé. En remarquant que les mailles primales et duales sont confondues, soit $c^{\mathrm{New}} = c^{\mathrm{Old}}$ et $p^{\mathrm{New}} = p^{\mathrm{Old}}$, si la position des nœuds est inchangée, on obtient directement que

$$\iota_c^{\varphi,\mathrm{New}} = \iota_c^{\varphi,\mathrm{Old}} \text{ et } \eta_p^{\mathrm{New}} = \eta_p^{\mathrm{Old}}, \tag{6.30}$$

pour toute quantité nodale η et toute quantité partielle et centrée ι. On termine par formuler un résultat jouant un rôle important pour démontrer la continuité de l'algorithme ALE complet (sous-section 6.4.4).

Proposition 6.3. *Si aucune projection n'est effectuée à l'instant $t^{n+1/2}$, les masses géométriques et les masses post-projection sont confondues, autrement dit*

$$m_p^{Proj} = m_p^{New} = m_p^{Old} \text{ et } m_{cp}^{Proj} = m_{cp}^{New} = m_{cp}^{Old}. \tag{6.31}$$

Démonstration. Il suffit d'appliquer l'équation nodale de (6.30) sur $m_p^{\mathrm{Old}} = \rho_p^{\mathrm{Old}} V_p^{\mathrm{D,Old}}$ pour obtenir $m_p^{\mathrm{Old}} = \rho_p^{\mathrm{New}} V_p^{\mathrm{D,Old}}$. Finalement, l'égalité des volumes $V_p^{\mathrm{D,New}} = V_p^{\mathrm{D,Old}}$ permet de prouver que $m_p^{\mathrm{Proj}} = m_p^{\mathrm{Old}}$. La dernière relation de (6.31) vient directement du fait que $m_p^{\mathrm{Proj}} = m_p^{\mathrm{Old}}$ en regardant la définition 6.7. Les égalités $m_p^{\mathrm{New}} = m_p^{\mathrm{Old}}$ et $m_{cp}^{\mathrm{New}} = m_{cp}^{\mathrm{Old}}$ sont évidentes étant donné que ces quantités ne dépendent que de la géométrie et que $m_c^{\mathrm{New}} = m_c^{\mathrm{Old}}$. □

6.3 Transfert de masse et erreur d'énergie cinétique

6.3.1 Introduction

La discussion de cette section est basée sur les résultats théorèmes 6.1 et 6.2 statuant respectivement sur la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie totale au cours de la phase de projection. L'étape que l'on décrit ici est également réalisée instantanément à l'instant $t^{n+1/2}$. On reprend alors la notation 6.1 de la section précédente : l'exposant temporel $n+1/2$ est supprimé et est remplacé par « New » ou « Old », désignant une quantité respectivement définie sur le maillage régularisé ou le maillage lagrangien. Les quantités notées « Proj » sont définies sur le maillage régularisé et ne sont utiles que pour effectuer les corrections décrites dans cette section et sont oubliées ensuite. Comme annoncé dans les remarques 6.7 et 6.8 correspondantes, les définitions de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique intervenant dans les bilans de conservation ne sont pas celles attendues. En effet, après la phase de projection au temps $t^{n+1/2}$, la quantité de mouvement conservée ainsi que l'énergie cinétique intervenant dans le bilan d'énergie totale conservée sont respectivement

$$\sum_p m_p^{\mathrm{Proj}} \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} \text{ et } \sum_p V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}}.$$

On rappelle que la masse nodale post-projection m_p^{Proj} est définie par la relation (6.20). Ces définitions ne correspondent pas à celles faisant intervenir les masses géométriques m_p^{New}, calculées sur le maillage régularisé, autrement dit

$$\sum_p m_p^{\mathrm{Proj}} \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} \neq \sum_p m_p^{\mathrm{New}} \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} \text{ et} \tag{6.32}$$

$$\sum_p V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} \neq \sum_p \tfrac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2. \tag{6.33}$$

Ces différences s'expliquent par deux raisons : (i) un transfert de masse a lieu au cours de la projection et (ii) la projection de la quantité de mouvement cause une erreur d'énergie cinétique. Bien que l'erreur due au transfert de masse soit prise en compte dans la quantité de mouvement [78–80, 174], elle n'est que rarement notifiée, et encore moins contrôlée, dans l'énergie cinétique. L'exception concerne le travail de Bailey et coll. [89] (basé sur [90]) où l'erreur d'énergie cinétique est minimisée. Cependant, ce travail n'est effectué que dans le cadre d'une projection par flux—ne prenant pas en compte un possible changement de connectivité par le lissage—et ne permet pas d'obtenir la positivité de l'erreur d'énergie cinétique. Pour contrôler cette erreur, seule la positivité de l'énergie interne est assurée dans la littérature à notre connaissance [3, § 9.3], sans jamais parler de cohérence thermodynamique ni d'entropie mais seulement en invoquant la monotonie. La positivité de l'énergie interne est obtenue grâce à des corrections *a posteriori*, désignées par le terme « repair » dans [21–23]. Mais ces corrections, possibles seulement si la projection est dissipative, ne permettent pas de contrôler directement l'erreur en énergie cinétique et peuvent être non locales [22]. On propose ici des corrections instantanées en vitesse ainsi qu'en énergie interne permettant de retrouver une cohérence thermodynamique stricte dans un contexte conservatif. Ces corrections sont locales et explicites donc simples à mettre en oœuvre et peu coûteuses.

6.3.2 Transfert de masse

Le transfert de masse est caractérisé par l'écart $m_p^{\mathrm{New}} - m_p^{\mathrm{Proj}}$. On souhaite ici évaluer cet écart. On rappelle que les deux masses nodales sont définies sur le maillage régularisé.

Proposition 6.4. *Sur un maillage régulier et pour les masses nodales m_p^{New} et les masses de coin m_{cp}^{New} construites avec le volume de coin V_{cp} de la définition 3.4, l'erreur de masse est*

$$m_p^{New} - m_p^{Proj} = m_p^{Proj} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \tag{6.34a}$$
$$m_{cp}^{New} - m_{cp}^{Proj} = m_{cp}^{Proj} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \tag{6.34b}$$

en géométrie axisymétrique. En géométrie plane, l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$.

Démonstration. Toutes les quantités intervenants dans cette démonstration sont définies sur le maillage lissé, l'exposant New est donc omis afin d'alléger les équations. Il est seulement présent sur la masse nodale m_p pour la distinguer de la masse post-projection m_p^{Proj}. On commence par écrire la masse nodale m_p^{New} sous la forme $m_p^{\mathrm{New}} = \sum_{c\in C(p)} \beta_{cp}\, m_c$.

En géométrie axisymétrique, on obtient

$$
\begin{aligned}
m_p^{\text{New}} &= \sum_{c\in C(p)} \beta_{cp} \int_{V_c} \rho(\boldsymbol{x})\, r\, dr\, dz + V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \text{ grâce à la relation (D.3)},\\
&= \sum_{c\in C(p)} \beta_{cp} \int_{V_c} \Big[\rho(\boldsymbol{x}_p) + (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)\Big]\,[(r-r_p)+r_p]\, dr\, dz\\
&\qquad\qquad + V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)\\
&= \left(\sum_{c\in C(p)} \beta_{cp}\, V_c\right) \rho(\boldsymbol{x}_p) \;+ \underbrace{\sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} \int_{V_c} (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)\, r_p\, dr\, dz}_{\text{Terme A}}\\
&\qquad + \underbrace{\sum_{c\in C(p)} \left(\beta_{cp} - \tfrac{1}{4}\right) \int_{V_c} (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)\, r_p\, dr\, dz}_{\text{Terme B}}\\
&\qquad + \underbrace{\sum_{c\in C(p)} \beta_{cp} \int_{V_c} (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)\,(r-r_p)\; dr\, dz}_{\text{Terme C}}\\
&\qquad\qquad + V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).
\end{aligned}
$$

Sous l'hypothèse d'un maillage suffisamment régulier où $\boldsymbol{x}_p$ est proche du centre de masse 2D plan de $\cup_{c\in C(p)} V_c$, le terme A est d'ordre supérieur. Sachant que $\beta_{cp} = \frac{V_{cp}^{\text{M}}}{V_c}$ ou $\beta_{cp} = \frac{1}{4}$ dans le cas particulier de la masse nodale m_p^{New}, la relation (C.9) permet de dire que le terme B est de l'ordre de $V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)$. Enfin, le terme C se réécrit

$$
\begin{aligned}
\sum_{c\in C(p)} \beta_{cp} \int_{V_c} (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)\,(r-r_p)\; dr\, dz &= \sum_{c\in C(p)} \beta_{cp} \int_{V_c} (\boldsymbol{\nabla}\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)\, \tfrac{r-r_p}{r}\, r\; dr\, dz\\
&= \left(\sum_{c\in C(p)} \beta_{cp}\, V_c\right) \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)\\
&= V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).
\end{aligned}
$$

On a donc

$$
m_p^{\text{New}} = \left(\sum_{c\in C(p)} \beta_{cp}\, V_c\right) \rho(\boldsymbol{x}_p) + V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r). \tag{6.35}
$$

On note que, dans l'équation précédente, le terme d'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme en $\mathcal{O}(\Delta x)$ en géométrie plane. De la même manière, on peut écrire une relation similaire pour la masse post-projection m_p^{Proj} puisque $\boldsymbol{x}_p$ est proche du centre de masse 2D plan du volume V_p^{D} (hypothèse de régularité du maillage). Pour la masse post-projection,

on a alors

$$m_p^{\text{Proj}} = V_p^{\text{D}}\,\rho(\boldsymbol{x}_p) + V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r). \tag{6.36}$$

Dans l'équation précédente, le terme d'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme en $\mathcal{O}(\Delta x)$ en géométrie plane. On rassemble maintenant les relations (6.35) et (6.36)

$$m_p^{\text{New}} - m_p^{\text{Proj}} = \left(\left[\sum_{c \in C(p)} \beta_{cp}\, V_c \right] - V_p^{\text{D}} \right) \rho(\boldsymbol{x}_p) + V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).$$

Les relations (D.2) et (D.1) permettent finalement de contrôler le terme

$$\left(\sum_{c \in C(p)} \beta_{cp}\, V_c \right) - V_p^{\text{D}},$$

et on obtient

$$m_p^{\text{New}} - m_p^{\text{Proj}} = V_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).$$

En géométrie plane, les intégrales se font avec la mesure $dA = dr\,dz$ et les erreurs en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ sont remplacées par des termes de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$ à chaque étape de la démonstration. La dernière équation devient $m_p^{\text{New}} - m_p^{\text{Proj}} = A_p^{\text{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2)$. Concernant les masses de coin m_{cp}, il suffit de remarquer que

$$m_{cp}^{\text{New}} - m_{cp}^{\text{Proj}} = \frac{m_{cp}^{\text{New}}}{m_p^{\text{New}}} \left(m_p^{\text{New}} - m_p^{\text{Proj}} \right).$$

□

La démonstration de la proposition 6.4 présente plus de difficultés en géométrie axisymétrique. Les calculs sont donc détaillés en géométrie axisymétrique et seules quelques remarques sont faite pour le cas de la géométrie plane. Bien que tous les détails de la démonstration ne soient pas importants, elle permet d'expliquer l'origine du transfert de masse et expose les conditions à remplir afin de le contrôler. Ces conditions sont : (i) le contrôle de la différence $V_p^{\text{D}} - V_p$; et (ii) un maillage régulier.

6.3.3 Corrections de vitesse

Le transfert de masse est pris en compte instantanément *via* une correction sur la vitesse. Cette correction peut être formulée en force ou, de manière équivalente, en vitesse

$$\boldsymbol{u}_p^{\text{New}} = \lambda_p\, \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} \;\Leftrightarrow\; m_p^{\text{New}}\, \boldsymbol{u}_p^{\text{New}} - m_p^{\text{Proj}}\, \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} = \boldsymbol{F}_p\, \Delta t. \tag{6.37}$$

Il reste à spécifier la forme de la correction λ_p (ou $\boldsymbol{F}_p\,\Delta t$ de manière équivalente), dictée par la conservation de la quantité de mouvement et la cohérence thermodynamique. Une

correction possible (formulée en force) est

$$\boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \sum_{c\in C(p)} \boldsymbol{F}_{cp}\,\Delta t = \sum_{c\in C(p)} \delta K_c\,\frac{\bar{\boldsymbol{u}}_p - \bar{\boldsymbol{u}}_c}{\sum\limits_{q\in P(c)} |\bar{\boldsymbol{u}}_q - \bar{\boldsymbol{u}}_c|^2}, \tag{6.38a}$$

$$\bar{\boldsymbol{u}}_p = \frac{\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}} + \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}}{2} \text{ et } \bar{\boldsymbol{u}}_c = \tfrac{1}{|P(c)|} \sum_{p\in P(c)} \bar{\boldsymbol{u}}_p, \tag{6.38b}$$

$$\delta K_c = \sum_{p\in P(c)} \tfrac{1}{2}\left(m_{cp}^{\mathrm{New}} - m_{cp}^{\mathrm{Proj}}\right) \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}} \cdot \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}. \tag{6.38c}$$

Elle permet de conserver la quantité de mouvement et annule l'erreur d'énergie cinétique due au transfert de masse de façon globale, soit

$$\sum_p m_p^{\mathrm{New}}\,\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}} = \sum_p m_p^{\mathrm{Proj}}\,\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} \text{ et } \sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 = \sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2.$$

Cette correction est cependant non linéaire, globale et implicite—$\boldsymbol{F}_p\,\Delta t$ dépend des vitesses $\boldsymbol{u}_q^{\mathrm{New}}$, où $q \in Q(p)$—mais surtout singulière en cas de vitesses uniforme, soit lorsque $\bar{\boldsymbol{u}}_p = \bar{\boldsymbol{u}}_c$. En plus d'un coût de calcul conséquent, des difficultés dans la convergence des algorithmes résolvant (6.37) peuvent alors apparaître et ont été observées. Des corrections alternatives plus simples, moins coûteuses car explicites, sont donc mises en place.

Définition 6.9. *On considère quatre corrections en vitesse*

— *Version de base, sans correction, notée « VB »*

$$\lambda_p = 1 \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \left(m_p^{New} - m_p^{Proj}\right)\boldsymbol{u}_p^{Proj}; \tag{6.39}$$

— *Version pour la quantité de mouvement, notée « VQ »*

$$\lambda_p = \frac{m_p^{Proj}}{m_p^{New}} \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \boldsymbol{0}; \tag{6.40}$$

— *Version entropique, notée « VE »*

$$\lambda_p = \sqrt{\frac{\kappa_p^{New}}{\frac{1}{2}\,m_p^{New}\left(\boldsymbol{u}_p^{Proj}\right)^2}}$$

$$\Leftrightarrow\; \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \left(\sqrt{\frac{\kappa_p^{New}}{\frac{1}{2}\,m_p^{New}\left(\boldsymbol{u}_p^{Proj}\right)^2}}\,m_p^{New} - m_p^{Proj}\right)\boldsymbol{u}_p^{Proj}, \tag{6.41}$$

où $\kappa_p^{New} = min\left(V_p^{D,New}\left(\frac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{New}, \frac{1}{2}\,m_p^{Proj}\left(\boldsymbol{u}_p^{Proj}\right)^2\right)$;

— *Version mixte, notée « VM »*

$$\lambda_p = 1 - \frac{1}{m_p^{New}\,\boldsymbol{u}_p^{Proj}} \sum_{c\in C(p)} \boldsymbol{F}_c\,\Delta t$$

$$\Leftrightarrow\quad \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \left(m_p^{New} - m_p^{Proj}\right)\boldsymbol{u}_p^{Proj} - \sum_{c\in C(p)} \boldsymbol{F}_c\,\Delta t, \quad (6.42)$$

où $\boldsymbol{F}_c\,\Delta t = \frac{1}{|P(c)|}\sum_{p\in P(c)}\left(m_{cp}^{New} - m_{cp}^{Proj}\right)\boldsymbol{u}_p^{Proj}$.

Les différentes corrections de la définition 6.9 ont chacune un objectif bien précis : (i) la correction « VB » permet la comparaison avec les autres corrections en vitesse ; (ii) la correction « VQ » privilégie la quantité de mouvement sur l'entropie afin de voir l'impact d'un tel choix sur les résultats numériques et la robustesse ; (iii) la correction « VE », à l'inverse, privilégie l'entropie à la quantité de mouvement et (iv) la correction « VM » permet de tester un compromis entre les corrections « VQ » et « VE ». On remarque qu'il n'existe pas de correction idéale réunissant toutes les attentes et un choix est à faire entre la conservation de la quantité de mouvement et la cohérence thermodynamique. Quelle que soit l'erreur commise (dans la quantité de mouvement ou l'entropie), on peut toujours la quantifier par la différence $m_{cp}^{\mathrm{New}} - m_{cp}^{\mathrm{Proj}}$. La proposition 6.4 justifie alors toutes les corrections de la définition 6.9 d'un point de vue théorique. Malgré cette proposition, la conservation globale de la quantité de mouvement est perdue pour la correction « VE ». Le compromis présenté permet de la retrouver tout en améliorant la cohérence thermodynamique comparé aux corrections « VB » et « VQ ». Plus de détails à ce sujet sont donnés dans la partie 6.3.4. Enfin, la proposition suivante permet de montrer la continuité des phases de projection et de correction avec le schéma lagrangien en l'absence de remaillage.

Proposition 6.5. *En l'absence de projection à l'instant* $t^{n+1/2}$*, les corrections en vitesse sont nulles*

$$\lambda_p = 1 \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \boldsymbol{0}. \quad (6.43)$$

Démonstration. En l'absence de projection en $t^{n+1/2}$, la proposition 6.3 permet de dire que $m_p^{\mathrm{New}} = m_p^{\mathrm{Proj}}$ et $m_{cp}^{\mathrm{New}} = m_{cp}^{\mathrm{Proj}}$. La relation (6.43) est obtenue directement à partir des définitions pour les corrections « VB », « VQ » et « VM ». Concernant la correction « VE », il suffit de remarquer que $V_p^{\mathrm{D,New}}\left(\frac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} = \frac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 = \frac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2$ pour montrer que $\lambda_p = 1 \Leftrightarrow \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \boldsymbol{0}$. □

6.3.4 Corrections de l'énergie interne

Une correction est requise pour compenser l'erreur d'énergie cinétique causée par l'étape de projection. Maintenant que le transfert de masse est pris en compte dans la vitesse

$\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}$, la différence d'énergie cinétique explicitée dans (6.33) devient

$$\sum_p V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} \neq \sum_p \tfrac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2.$$

Cette différence est à la fois due à la projection de la quantité de mouvement mais aussi au transfert de masse. On ajoute donc cette différence dans l'énergie interne de façon à rester strictement conservatif, quelle que soit la correction en vitesse de la définition 6.9 choisie.

Définition 6.10. *L'énergie interne partielle corrigée, notée $e_c^{\varphi,New}$, est*

$$e_c^{\varphi,New} = e_c^{\varphi,Proj} + \delta e_c^{\varphi,New}, \tag{6.44}$$

où

$$\delta e_c^{\varphi,New} = \frac{1}{m_c^{\varphi,New}} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,New}}{m_p^{New}} V_p^{D,New} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{New} - \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\varphi,New} \left(\boldsymbol{u}_p^{New}\right)^2 \right\}. \tag{6.45}$$

On rappelle que les masses $m_{cp}^{\varphi,New}$ et m_p^{New} sont les masses géométriques construites dans la projection des quantités centrées : équations (6.14) et (2.73).

Remarque 6.9. *La correction $\delta e_c^{\varphi,New}$ se décompose de manière évidente sous la forme d'une contribution venant du transfert de masse, notée $\hat{\delta e}_c^{\varphi,New}$, et d'une contribution venant de la projection de la quantité de mouvement, notée $\check{\delta e}_c^{\varphi,New}$. Autrement dit*

$$\delta e_c^{\varphi,New} = \underbrace{\hat{\delta e}_c^{\varphi,New}}_{\substack{\text{projection quantité de mouvement}}} + \underbrace{\check{\delta e}_c^{\varphi,New}}_{\substack{\text{transfert de masse}}}, \tag{6.46}$$

avec

$$\hat{\delta e}_c^{\varphi,New} = \frac{1}{m_c^{\varphi,New}} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,New}}{m_p^{New}} V_p^{D,New} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{New} - \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\varphi,Proj} \left(\boldsymbol{u}_p^{Proj}\right)^2 \right\},$$

et

$$\check{\delta e}_c^{\varphi,New} = \frac{1}{m_c^{\varphi,New}} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\varphi,Proj} \left(\boldsymbol{u}_p^{Proj}\right)^2 - \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\varphi,New} \left(\boldsymbol{u}_p^{New}\right)^2 \right\}.$$

La cohérence thermodynamique impose le contrôle de la correction $\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}}$, qui est plus ou moins strict suivant la correction en vitesse choisie. Comme annoncé dans la partie précédente, la proposition 6.4 justifie toutes les corrections en vitesse et notre choix se base alors sur deux points : (i) la robustesse et (ii) la cohérence avec la phase lagrangienne. De ce point de vue, le choix se porte clairement sur la correction « VE ». De la même manière que les flux de quantité de mouvement présents dans le schéma lagrangien VNM (voir chapitre 2), cette correction autorise des erreurs dans la quantité de mouvement afin

de privilégier la cohérence thermodynamique dans un cadre conservatif. Les flux dans la phase lagrangienne peuvent en effet être interprétés comme une erreur dans la quantité de mouvement puisque les masses sont constantes dans la limite continue (description lagrangienne). De plus, le respect du second principe à la précision machine, assuré par la correction « VE », améliore fortement la robustesse sans toutefois oublier la conservation de l'entropie dans les zones isentropiques.

Proposition 6.6. *Sur maillage régulier, dans le cas de la correction « VE » de la définition 6.9, la correction en énergie interne* $\delta e_c^{\varphi,New}$ *vérifie*

$$\delta e_c^{\varphi,New} \geq 0 \text{ partout : second principe,} \tag{6.47a}$$

$$\delta e_c^{\varphi,New} = \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r) \text{ dans les zones isentropiques,} \tag{6.47b}$$

en géométrie axisymétrique, quel que soit le matériau φ*. En géométrie plane, le résultat reste vrai mais le terme d'erreur en* $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ *dans la relation (6.47b) est remplacé par* $\mathcal{O}(\Delta x)$*.*

Démonstration. Voir annexe D section D.2. □

Même si cela dépasse le cadre de cette thèse, il est intéressant de noter que cette proposition prend plus d'importance dans le cas d'équations d'états plus contrastées que les gaz parfaits, où la robustesse est d'autant plus cruciale. Enfin, de façon similaire à la proposition 6.5 pour le transfert de masse, on formule un résultat de continuité servant dans la sous-section 6.4.4.

Proposition 6.7. *En l'absence de projection à l'instant* $t^{n+1/2}$*, la correction d'énergie interne* $\delta e_c^{\varphi,New}$ *est nulle soit*

$$\delta e_c^{\varphi,New} = 0. \tag{6.48}$$

Démonstration. Voir annexe D section D.3. □

Si les autres corrections en vitesse de la définition 6.9 ne retiennent pas notre attention car ne fournissant pas un contrôle strict sur l'entropie, il est tout de même intéressant d'exprimer l'erreur d'énergie interne produite. De façon générale, en faisant intervenir le coefficient λ_p (définition 6.9), on peut réécrire la correction $\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ de la façon suivante

$$\begin{aligned}
\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}} &= \check{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}} + \breve{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}} \\
&= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\varphi,\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 \right\} \\
&\qquad - \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \frac{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_c^{\mathrm{New}}} \left\{ \tfrac{1}{2} \left(m_{cp}^{\mathrm{Proj}} - \lambda_p^2\, m_{cp}^{\mathrm{New}}\right) \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{6.49}$$

La séparation entre l'erreur venant de la projection de la quantité de mouvement $\hat{\delta e}_c^{\varphi,\text{New}}$ et l'erreur venant du transfert de masse $\breve{\delta e}_c^{\varphi,\text{New}}$ est effectuée dans la relation précédente : remarque 6.9. L'erreur due à la projection de la quantité de mouvement $\hat{\delta e}_c^{\varphi,\text{New}}$ est inévitablement présente pour toutes les corrections. Elle est de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)$ en géométrie axisymétrique et $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ en géométrie plane. Seule la correction « VE » permet de contrôler son signe à la précision machine. La différence entre les autres corrections se situe sur l'erreur due au transfert de masse $\breve{\delta e}_c^{\varphi,\text{New}}$. En remarquant que $\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} = \boldsymbol{u}_c^{\text{Proj}} + \mathcal{O}(\Delta x)$, pour $p \in P(c)$, cette erreur est de l'ordre de $\sum_{p\in P(c)} \left(m_{cp}^{\text{New}} - m_{cp}^{\text{Proj}}\right)$ lorsqu'aucune précaution n'est prise sur l'entropie, autrement dit lorsque $\lambda_p = 1$ ou $\lambda_p = \frac{m_p^{\text{Proj}}}{m_p^{\text{New}}}$. En revanche, elle est d'un ordre supérieur avec le correction « VM ». Pour s'en rendre compte, il faut remplacer λ_p par son expression (6.42) dans la relation (6.49) puis faire quelques réarrangements dans la correction venant du transfert de masse $\breve{\delta e}_c^{\varphi,\text{New}}$

$$\breve{\delta e}_c^{\varphi,\text{New}} = -\frac{1}{m_c^{\varphi,\text{New}}} \sum_{p\in P(c)} \frac{m_c^{\varphi,\text{New}}}{m_c^{\text{New}}} \Big\{ \tfrac{1}{2} \left(m_{cp}^{\text{New}} - m_{cp}^{\text{Proj}}\right) \left[\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} \cdot \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{New}} + \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right) - \boldsymbol{u}_p^{\text{New}} \cdot \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right] - \boldsymbol{F}_c \, \Delta t \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{\text{New}} + \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}}{2} \Big\}.$$

Le terme $\boldsymbol{F}_c \, \Delta t$ est donné dans la définition 6.9. Enfin, on utilise $\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} = \boldsymbol{u}_c^{\text{Proj}} + \mathcal{O}(\Delta x)$ et $\boldsymbol{u}_p^{\text{New}} = \boldsymbol{u}_c^{\text{New}} + \mathcal{O}(\Delta x)$ lorsque $p \in P(c)$ pour obtenir une différence entre deux termes de l'ordre de $\sum_{p\in P(c)} \left(m_{cp}^{\text{New}} - m_{cp}^{\text{Proj}}\right)$.

6.4 Propriétés de l'algorithme ALE global

Cette section rassemble les différents résultats intermédiaires de la phase de projection (sous-section 6.2.6) et de la phase de correction (section 6.3) qui, couplés avec les propriétés du schéma lagrangien VNM, permettent d'établir les propriétés du schéma ALE complet. Les résultats de conservation et de cohérence thermodynamique sont formulés au demi-instant. Dans les démonstrations, la notation 6.1 de la phase de projection est reprise afin de différencier les quantités au temps $t^{n+1/2}$ définies sur le maillage lagrangien (quantités « Old ») de celles définies sur le maillage régularisé (quantités « New »). On reprend également, dans les démonstrations, la notation utilisée dans la section 6.3 pour les corrections en vitesse et énergie interne. On a finalement besoin d'introduire ici une notation supplémentaire concernant la masse des mailles c.

Notation 6.2. *Dans le cas d'une projection à l'instant $t^{n+1/2}$, les masses sont relocalisées et la quantité m_c n'est plus constante. On désigne alors par m_c^n (resp. $m_c^{\varphi,n}$) la masse lagrangienne globale (resp. partielle pour le matériau φ) de la maille c entre les instants $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$. Sous la notation 6.1 de la section précédente, on a $m_c^n = m_c^{Old}$ et $m_c^{n+1} = m_c^{New}$ dans le cas d'une projection au temps $t^{n+1/2}$.*

6.4.1 Conservation de la quantité de mouvement

On commence par le résultat concernant la quantité de mouvement.

Théorème 6.3. *Pour la correction « VE », le schéma ALE conserve la quantité de mouvement à l'ordre du schéma dans la direction axiale en géométrie axisymétrique, autrement dit*

$$\left(\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2}\right) \cdot \boldsymbol{e}_z = \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \tag{6.50}$$

où $\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} = \sum_p \boldsymbol{\mu}_p^{n+1/2} = \sum_p m_p^{n+1/2}\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$. *En géométrie plane, le terme en* $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ *est remplacée par un terme en* $\mathcal{O}(\Delta x)$ *et le résultat précédent est valide dans les deux directions.*

Démonstration. Voir annexe D section D.4. □

Remarque 6.10. *Pour les corrections « VQ » et « VM », la relation* $\sum_p \boldsymbol{F}_p\, \Delta t = \boldsymbol{0}$ *permet de dire que*

$$\sum_p m_p^{New}\, \boldsymbol{u}_p^{New} = \sum_p m_p^{Proj}\, \boldsymbol{u}_p^{Proj}.$$

La quantité de mouvement est donc strictement conservée. Concernant la correction « VB », le résultat est le même que pour la correction « VE ». Il suffit d'utiliser directement la proposition 6.4.

6.4.2 Conservation de l'énergie totale

Théorème 6.4. *Le schéma ALE conserve strictement l'énergie totale hors conditions aux limites, autrement dit*

$$\mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2} = 0, \tag{6.51}$$

où $\mathcal{E}^{n+1/2} = \sum_p \frac{1}{2}\, m_p^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\right)^2 + \sum_c m_c^{n+1}\, e_c^{n+1/2}$.

Démonstration. Voir annexe D section D.5. □

6.4.3 Respect de la cohérence thermodynamique

On regroupe ici les résultats et commentaires concernant la cohérence thermodynamique afin de formuler un résultat sur le contrôle de l'entropie dans le schéma ALE et ce, pour la correction « VE ».

Théorème 6.5. *Sur maillage régulier et dans le cas de la correction « VE » de la définition 6.9, le schéma ALE est cohérent thermodynamiquement à l'ordre 2, autrement*

dit

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^2\,,\Delta t^3) \geq 0 \text{ partout}, \tag{6.52a}$$

$$\begin{aligned} &s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^2\,,\Delta t^3) \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}({}^{\Delta r}/_{r}) = 0 \text{ dans les zones régulières}, \end{aligned} \tag{6.52b}$$

en géométrie axisymétrique et pour chaque matériau φ. En géométrie plane, l'erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}({}^{\Delta r}/_{r})$ est remplacée par un terme d'ordre $\mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Démonstration. Le terme d'erreur en $\mathcal{O}(\Delta x^2\,,\Delta t^3)$ provient de la phase lagrangienne. Pour plus de rigueur, on ajoute ici l'erreur spatiale : chapitre 2 section 2.5.7.5. Cette erreur, évidemment présente lors de la phase lagrangienne, résulte, entre autre, de la formule de quadrature utilisée pour la discrétisation du terme $(p+q)\,dV$ lorsque l'on considère la fonction entropie $s(\rho\,,e)$. Le second terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}({}^{\Delta r}/_{r})$ provient de la projection de l'énergie interne ainsi que de la correction « VE » donnée dans la définition 6.10. La discussion menée dans la partie 6.2.6.4 permet de conclure que seuls des résidus à l'ordre du schéma sont ajoutés lors de la projection de l'énergie interne, en particulier grâce à la reconstruction particulière de son gradient. Enfin, d'après la proposition 6.6, la correction $\delta e_c^{\varphi,\text{New}}$ est strictement positive partout— c'est pourquoi il n'y a pas de terme d'erreur supplémentaire dans l'inégalité (6.52a)— et à l'ordre du schéma dans les zones régulières et sur maillage régulier. En géométrie plane, toujours d'après la proposition 6.6, ce terme d'erreur est remplacé par un terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. □

6.4.4 Continuité du schéma ALE

On énonce le résultat suivant, assurant la continuité du schéma ALE vis-à-vis du schéma lagrangien VNM en l'absence de projection.

Théorème 6.6. *En l'absence de projection à l'instant $t^{n+1/2}$, le schéma ALE est strictement confondu avec le schéma lagrangien VNM.*

Démonstration. La projection ne modifie aucune quantité si aucune régularisation n'est effectuée au temps $t^{n+1/2}$: voir la partie 6.2.6.6. De plus, les propositions 6.5 et 6.7 démontrent que les corrections en vitesse et en énergie interne sont strictement nulles en l'absence de projection

$$\lambda_p = 1 \text{ et } \delta e_c^{\varphi,\text{New}} = 0.$$

□

6.5 Conclusion du chapitre

Le schéma « Lagrange + Projection » construit dans ce chapitre correspond à l'extension du schéma lagrangien VNM du chapitre 2. Il est précis à l'ordre deux, conservatif en énergie totale, cohérent thermodynamiquement et la continuité avec le schéma VNM est assurée en l'absence de projection. Le respect de la cohérence thermodynamique dans un contexte conservatif motive le choix, non usuel, de régulariser le maillage et de projeter les quantités à l'instant $t^{n+1/2}$. Cela implique également la nécessité d'effectuer des corrections, à la fois en vitesse et en énergie interne. Plusieurs corrections en vitesse sont proposées mais aucune ne satisfait toutes les exigences (conservation, cohérence thermodynamique). Un choix est alors à faire. La cohérence thermodynamique est privilégiée dans ce travail par rapport à la stricte conservation de la quantité de mouvement ce qui justifie le choix de la correction en vitesse « VE ». Cette correction annule l'erreur d'énergie cinétique, due à la projection, si elle est négative. Le prix à payer est que la quantité de mouvement est alors conservée uniquement à l'ordre deux. Les résultats numériques du chapitre suivant sont présentés avec la correction « VE ». Des comparaisons avec les autres choix sont tout de même effectuées sur le problème du point triple [31, 135]. Il faut noter que cette correction en vitesse joue le même rôle que les flux de quantité de mouvement dans le schéma lagrangien VNM : une erreur est ajoutée dans la quantité de mouvement de façon à préserver la cohérence thermodynamique et la conservation de l'énergie totale.

Les différentes étapes de l'algorithme ALE complet sont résumées dans la figure 6.1 en introduction du chapitre. Le tableau 6.1 fournit ici plus de détails : les différentes variables et leurs équations/sections correspondantes sont indiquées avec leur ordre d'évaluation lors d'une itération en temps.

Début du cycle	$\Delta t^{n-1/2}$	$\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}$	$\mathcal{D}_{cp}^{n-1}$	$m_p^{n-1/2}$	$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big\vert^{n-1/2}$	$\boldsymbol{x}_p^{n-1/2}$	$m_p^{n-1/2,\mathrm{Proj}}$	$e_c^{n-1/2}$	$\boldsymbol{x}_p^n$	$\mathcal{D}_{cp}^{n-1/2}$	e_c^n	p_c^n
(5.1)	$\Delta t^{n+1/2}$											
(2.60)		$\boldsymbol{u}_p^{*,n+1/2}$										
(4.10) & (2.23) & (4.34) & (2.24)			$\mathcal{D}_{cp}^{n}$									
(2.72a) & 3.3 & (2.72b) & 3.6				$m_p^{n+1/2}$	$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big\vert^{n+1/2}$							
(2.65)		$\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$										
(2.9)						$\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$						
(2.70) & (2.6)								$e_c^{n+1/2}$				
Régularisation						$\boldsymbol{x}_p^{n+1/2}$						
(6.11b) & (2.6)								$e_c^{n+1/2}$				
(2.72a) & 3.3 & (2.72b) & 3.6				$m_p^{n+1/2}$	$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big\vert^{n+1/2}$							
(6.22a)		$\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$										
(6.20)							$m_p^{n+1/2,\mathrm{Proj}}$					
(6.37) & (6.41)		$\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$										
(6.44) & (6.45) & (2.6)								$e_c^{n+1/2}$				
(2.10)									$\boldsymbol{x}_p^{n+1}$			
(4.10) & (2.23) & (4.34) & (2.24)										$\mathcal{D}_{cp}^{n+1/2}$		
(2.71) & (2.6)											e_c^{n+1}	
(2.43) & (2.23)												p_c^{n+1}

TABLE 6.1 – Algorithme du schéma ALE multi-matériaux complet : les traits pleins délimitent la phase lagrangienne, correspondant à une évolution temporelle des quantités, le trait en pointillé délimite les phases de projection et de correction. Les masses de coin m_{cp} sont calculées au même moment que la masse m_p correspondante. Les termes dissipatifs sont regroupés dans la variable $\mathcal{D}_{cp} = \{q_c\,, \boldsymbol{f}_{cp}\}$.

Chapitre 7

Résultats numériques en formulation ALE

Ce chapitre correspond à la validation numérique du schéma ALE au travers de différents cas tests usuels de la littérature. La phase lagrangienne correspond au schéma à masses variables VNM du chapitre 2, désigné simplement par CSTS dans la suite. Les propriétés de conservation et de cohérence thermodynamique sont vérifiées et des comparaisons avec un schéma décalé STS sont effectuées.

7.1 Généralités

Les cas tests de ce chapitre permettent de valider les propriétés démontrées dans le chapitre précédent. Pour notre nouveau schéma ALE, on souhaite donc vérifier la précision à l'ordre deux, la conservation des quantités, la cohérence thermodynamique et la robustesse. La présentation des résultats s'organise de la façon suivante : (i) le cas est présenté, (ii) la solution de référence est décrite et (iii) les résultats sont donnés puis commentés. Des comparaisons avec un schéma décalé STS [47] sont réalisées dans certains cas afin de mettre en avant les propriétés citées ci-dessus. En particulier, aucune correction en vitesse et énergie interne n'est effectuée dans la phase lagrangienne et de projection pour ce schéma STS. Les différents cas tests considérés sont résumés dans le tableau 7.1. L'ALE n'est pas indispensable pour certains de ces cas mais il est tout de même intéressant de comparer les résultats obtenus entre les différentes formulations lagrangienne, eulérienne ou ALE. Un renvoi au chapitre 5 est fait concernant les descriptions ou les solutions analytiques/références.

Pour tous les cas tests, on précise que

— en l'absence d'analyse stricte de la stabilité du schéma, le pas de temps est contrôlé par la condition CFL classique (5.1) de l'hydrodynamique avec pour coefficient $\mathrm{CFL} = 0.2$;

- en géométrie axisymétrique, l'abscisse correspond à la direction axiale $\boldsymbol{e}_z$ et l'ordonnée à la direction radiale $\boldsymbol{e}_r$;
- les corrections d'anti-dérive sont réalisées avec le filtrage inertiel où le coefficient utilisateur est $c_{\bar{\Phi}} = 1$;
- trois itérations de l'algorithme de Jun [29] sont utilisées pour le lissage ;
- la longueur caractéristique intervenant dans le calcul du pas de temps et le terme de pseudo-viscosité est $l_c = \sqrt{A_c}$;
- tous les maillages initiaux sont cartésiens ;
- le système d'unité utilisé est le système CGS ;
- la formulation Eulérienne signifie qu'une projection sur la grille initiale est effectué à tous les pas de temps ;
- la correction en vitesse « VE » est utilisée pour tous les cas.

La longueur caractéristique est choisie ici de manière quelconque afin de ne pas s'appuyer sur les symétries (plane, cylindrique ou sphérique) connues des cas tests présentés. Dans un cadre général, il parait en effet difficile de dériver une longueur caractéristique spécifique pour chaque cas, ce qui n'est de toute façon pas toujours possible.

Le calcul d'un pas de temps constant n'est également pas toujours réalisable. De plus, le pas de temps non constant permet d'activer tous les termes dans l'équation discrète d'énergie interne, permettant une étude plus précise du coefficient CFL maximum. Cette étude est seulement effectuée pour le problème du point triple en formulation ALE et sur le maillage le plus fin—correspondant au cas le plus exigent considéré dans cette thèse. Le même coefficient CFL = 0.2—permettant à tous les cas d'atteindre le temps final—est utilisé autrement pour plus de clarté ; quel que soit le schéma, la formulation utilisée et le cas test considéré. Le pas de temps hydrodynamique n'est limité par aucune autre condition—de type variation de volume ou taux d'augmentation maximum par exemple—afin de ne pas introduire d'autres paramètres utilisateurs.

La correction en vitesse « VE » de la définition 6.9 est choisie conformément à la conclusion de la sous-section 6.3.4 dans le chapitre 6. Cependant, on utilise le problème du point triple, sur le maillage le plus fin, pour comparer les différentes corrections en vitesse.

La conservation de l'énergie totale ainsi que la positivité de la correction en énergie interne sont vérifiées à la précision machine dans tous les cas.

Cas tests	Figures illustrant l'état initial	γ	Termes dissipatifs	Taille Domaine	Stratégie de remaillage	Temps final / CFL
Sod [145] plan cylindrique sphérique	7.1	$\frac{7}{5}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	55×55 sur $[0,1] \times [0,1]$	ALE & Euler remaillage tous les pas de temps	0.2 / 0.2
Vortex isentropique [175–178] plan	7.5	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0$ $q_2 = 0$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	50×50, 100×100, 200×200 et 400×400 sur $[0,1] \times [0,1]$	ALE & Euler remaillage tous les pas de temps	1 / 0.2
Sedov [158–160] sphérique	5.22	$\frac{5}{3}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 1$	50×50, 100×100 et 200×200 sur le carré $[0,1.2] \times [0,1.2]$	ALE & Euler remaillage tous les 20 pas de temps	1 / 0.2
Point triple [133–135] axisymétrique	7.13	$\gamma_1 = 1.5$ $\gamma_2 = 1.5$ $\gamma_3 = \frac{7}{5}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	140×60 et 490×210 sur $[0,7] \times [0,3]$	ALE & Euler remaillage tous les pas de temps	5 / 0.2
Interaction choc-bulle [137, 138] plan	7.18	He : 1.648 Air : $\frac{7}{5}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	180×50 sur $[0,0.65] \times [-0.0445,0.0445]$	ALE remaillage tous les pas de temps	134.2153×10^{-6} / 0.2
Interaction choc-bulle [137, 138] axisymétrique	7.19	He : 1.648 Air : $\frac{7}{5}$	$q_1 = 0.5$ $q_2 = {}^{(\gamma+1)}/_{4}$ $c_{\bar{\Phi}} = 0$	520×72 sur $[0,0.65] \times [0,0.0445]$	ALE remaillage tous les pas de temps	125.7463×10^{-6} / 0.2

TABLE 7.1 – Tableau récapitulatif des cas test effectués dans ce chapitre. Les coefficients q_1 et q_2 sont associés respectivement aux termes linéaire et quadratique de la pseudo-viscosité.

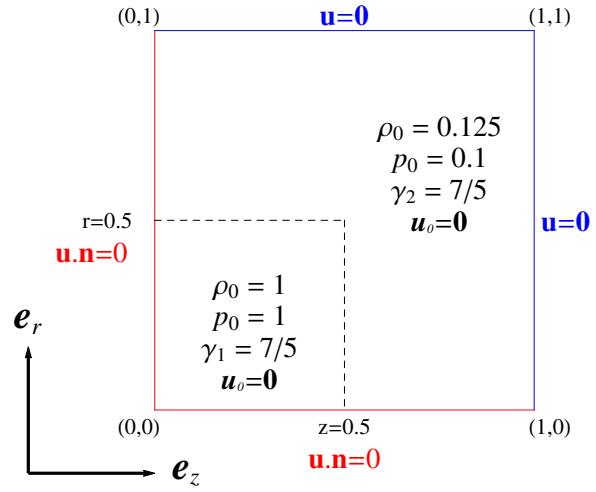


FIGURE 7.1 – Tube à choc de Sod en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites. La discontinuité est placée de façon à observer les trois ondes classiques en géométries plane, cylindrique et sphérique.

7.2 Tube à choc de Sod en géométrie axisymétrique

7.2.1 Présentation du cas test

Ce cas test est une variante du tube à choc de Sod [145] présenté dans le chapitre 5, section 5.2. Les conditions initiales et aux limites sont représentées dans la figure 7.1. Il s'agit d'un problème de Riemann à deux états où la discontinuité en densité et en pression est cette fois-ci placée de façon à ce que les trois ondes simples classiques (détente, discontinuité de contact et choc) soient : (i) planes dans la direction $\boldsymbol{e}_z$, (ii) cylindriques dans la direction $\boldsymbol{e}_r$ et (iii) sphériques dans la direction $r^s = \sqrt{z^2 + r^2}$. Aucune maille mixte n'est présente au temps initial. Ce cas test permet de valider le comportement du schéma CSTS pour les trois ondes simples se propageant dans les différentes géométries. La solution plane (sur l'axe de symétrie) est comparée avec la solution analytique comme c'est le cas dans la section 5.2. Enfin, le modèle de fermeture et la reconstruction d'interface sont testés grâce au profil de densités partielles et grâce à la comparaison avec la solution lagrangienne (sans maille mixte).

7.2.2 Solutions de référence

La solution analytique plane du tube à choc de Sod est détaillée dans la sous-section 5.2.2. Le lecteur peut se reporter à [145] pour plus de détails.

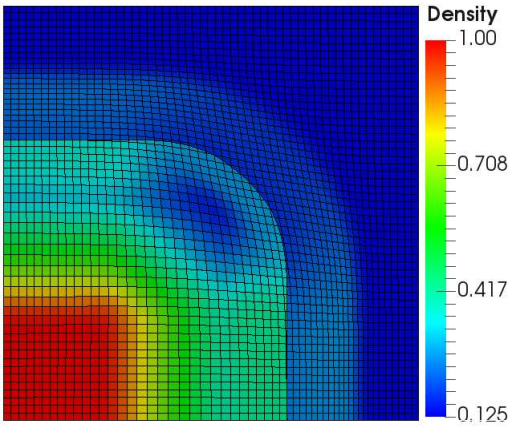


FIGURE 7.2 – Tube à choc de Sod en géométrie axisymétrique : carte de densité et maillage au temps final pour le schéma CSTS en formulation ALE.

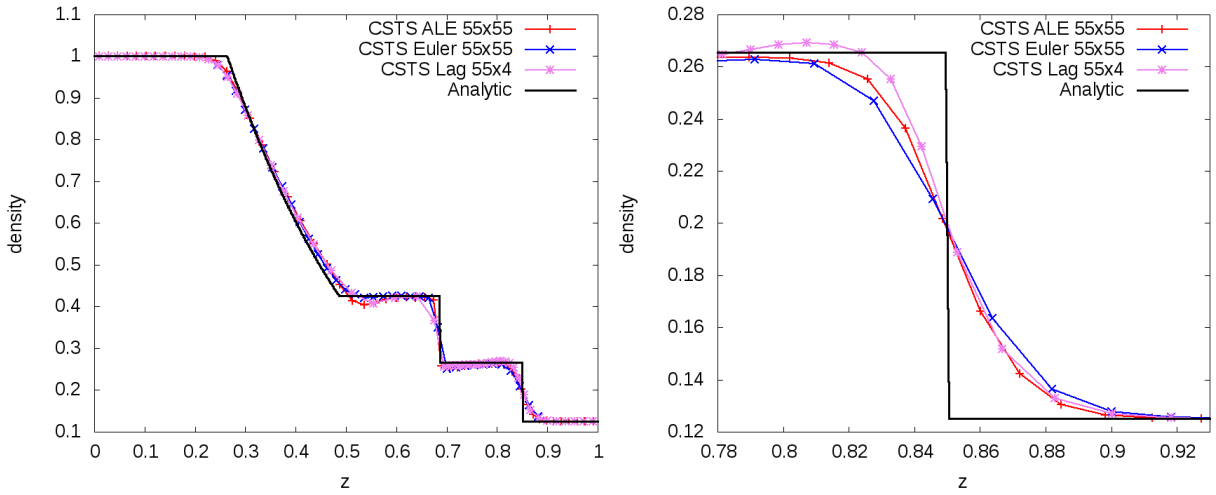
7.2.3 Résultats numériques

Les figures 7.2 et 7.3 montrent respectivement la carte de densité en formulation ALE ainsi que les profils de densité sur l'axe de symétrie en formulation ALE, Eulérienne et Lagrangienne pour le schéma CSTS. La solution sur l'axe concorde avec la solution analytique plane comme on peut le voir sur la figure 7.3. Comme attendu, en raison de la différence de dissipation, la formulation Lagrangienne capture le choc de manière un peu plus précise—figure 7.3(b)—mais le pied de la détente est meilleur en formulation Eulérienne—figure 7.3(a). La discontinuité de contact est mieux capturée par les formulations ALE et Eulérienne puisque un plus grand nombre de mailles sont présentes dans cette zone. Cela ressort encore plus sur le figure 7.4(a) et 7.4(b). Enfin, on ne remarque aucune valeur divergente pour la densité partielle dans la maille mixte. Ces résultats sont obtenus avec une fraction volumique de 40% pour le matériau détendu dans la maille mixte contre 60% pour le second matériau en formulation Eulérienne. Ces valeurs passent à 6% pour le matériau détendu contre 94% pour le second en formulation ALE. Malgré les fortes différences de valeurs pour les fractions volumiques entre les deux formulations, les résultats sont très similaires. Cela s'explique par le fait que les deux matériaux sont en réalité identiques ($\gamma = \frac{7}{5}$) et ont donc la même compressibilité.

7.3 Vortex isentropique

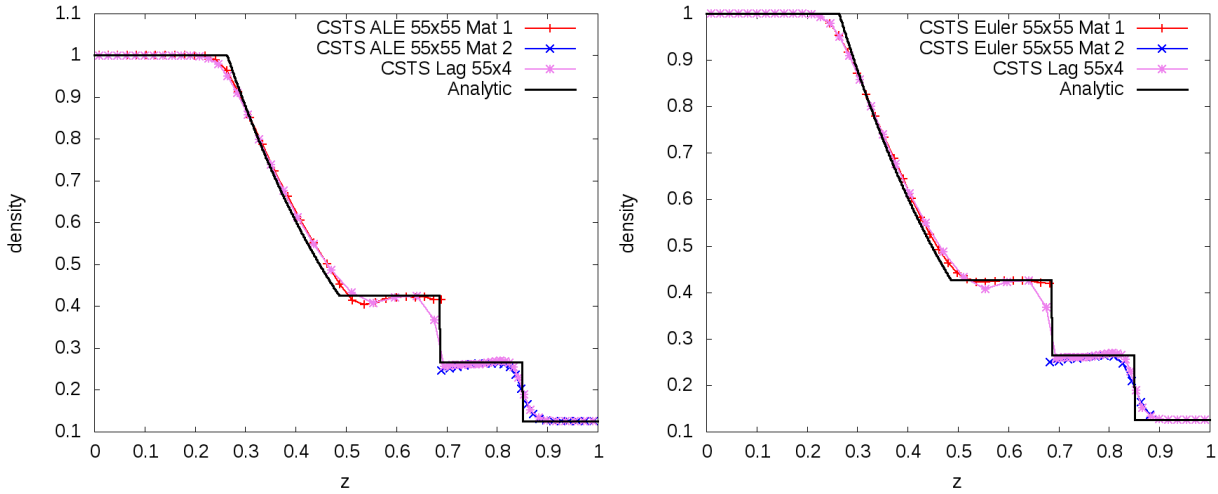
7.3.1 Présentation du cas test

On considère ici le problème du vortex isentropique proposé par exemple dans [175–178]. Un écoulement moyen $(\bar{\rho}_0\,,\bar{p}_0\,,\bar{\boldsymbol{u}}_0)$ est perturbé de façon isentropique par $(\delta\rho_0\,,\delta p_0\,,\delta\boldsymbol{u}_0)$



(a) (b)

FIGURE 7.3 – Tube à choc de Sod en géométrie axisymétrique. Profils de densité finale sur l'axe de symétrie pour le schéma CSTS en formulation Lagrangienne, Eulérienne et ALE avec la solution analytique : (a) vue globale ; et (b) zoom sur l'onde de choc.



(a) Formulation ALE (b) Formulation Eulérienne

FIGURE 7.4 – Tube à choc de Sod en géométrie axisymétrique. Profils de densité partielle sur l'axe de symétrie pour le schéma CSTS avec la solution analytique et la solution lagrangienne : (a) formulation ALE avec des fractions volumiques de l'ordre de 6% pour le matériau détendu contre 94% pour l'autre matériau ; et (b) formulation Eulérienne avec des fractions volumiques de l'ordre de 40% pour le matériau détendu contre 60% pour l'autre matériau.

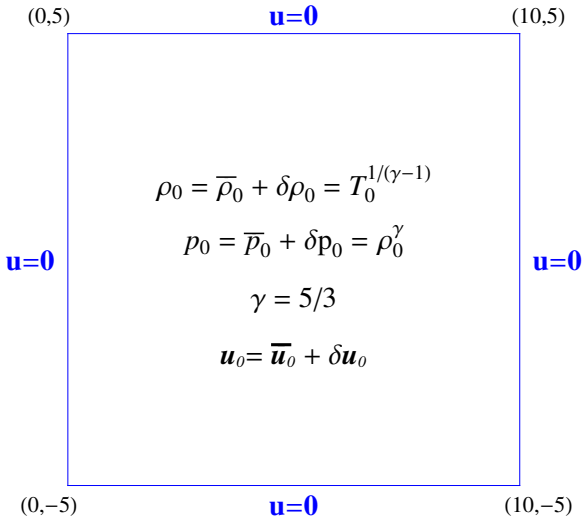


FIGURE 7.5 – Vortex isentropique : conditions initiales et conditions aux limites. La température est donnée par l'équation (7.2).

suivant

$$\begin{cases} (\bar{\rho}_0,\bar{p}_0,\bar{\boldsymbol{u}}_0) = (1\,,1\,,\mathbf{0}), \\ \delta\rho_0 = T_0^{1/(\gamma-1)} - 1, \\ \delta p_0 = T_0^{\gamma/(\gamma-1)} - 1, \\ \delta u_{0,x} = \frac{\beta}{2\,\pi} e^{(1-r^2)/2}\,(y_0 - y) \quad \text{et} \quad \delta u_{0,y} = \frac{\beta}{2\,\pi} e^{(1-r^2)/2}\,(x - x_0)\,, \end{cases} \tag{7.1}$$

où $(x_0\,,y_0) = (5\,,0)$ est le centre du vortex, $r = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}$ est la distance au centre du vortex et $\beta = 5$ est l'amplitude de sa force. La température est donnée par

$$T_0 = 1 - \frac{(\gamma-1)\,\beta^2}{8\,\gamma\,\pi^2}\, e^{1-r^2}. \tag{7.2}$$

Les conditions initiales et conditions aux limites sont résumées dans la figure 7.5.

Ce cas test permet de valider la précision du schéma mais également de tester son comportement sur un écoulement isentropique. Dans le cadre de la cohérence thermodynamique, on souhaite ainsi déterminer la capacité du schéma à conserver l'entropie. Dans le cas des gaz parfaits, l'entropie s'écrit

$$s(\rho\,,e) = c_v \ln\left(\frac{p}{\rho^\gamma}\right).$$

Le caractère isentropique du résultat numérique peut alors se mesurer avec le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$, qui doit rester constant. Pour un écoulement parfaitement isentropique et considérant les conditions initiales (7.1), on obtient $\frac{p}{\rho^\gamma} = \frac{p_0}{\rho_0^\gamma} = 1$.

7.3.2 Solution de référence

La solution analytique du vortex isentropique est connue [175–178] et correspond à la translation de la solution initiale à la vitesse de l'écoulement moyen $\bar{\boldsymbol{u}}_0 = \bar{u}_{0,x}\,\boldsymbol{e}_x + \bar{u}_{0,y}\,\boldsymbol{e}_y$. Cette vitesse étant nulle dans notre cas, soit $\bar{\boldsymbol{u}}_0 = \boldsymbol{0}$, le vortex est stationnaire et la solution analytique correspond alors à la solution initiale.

7.3.3 Résultats numériques

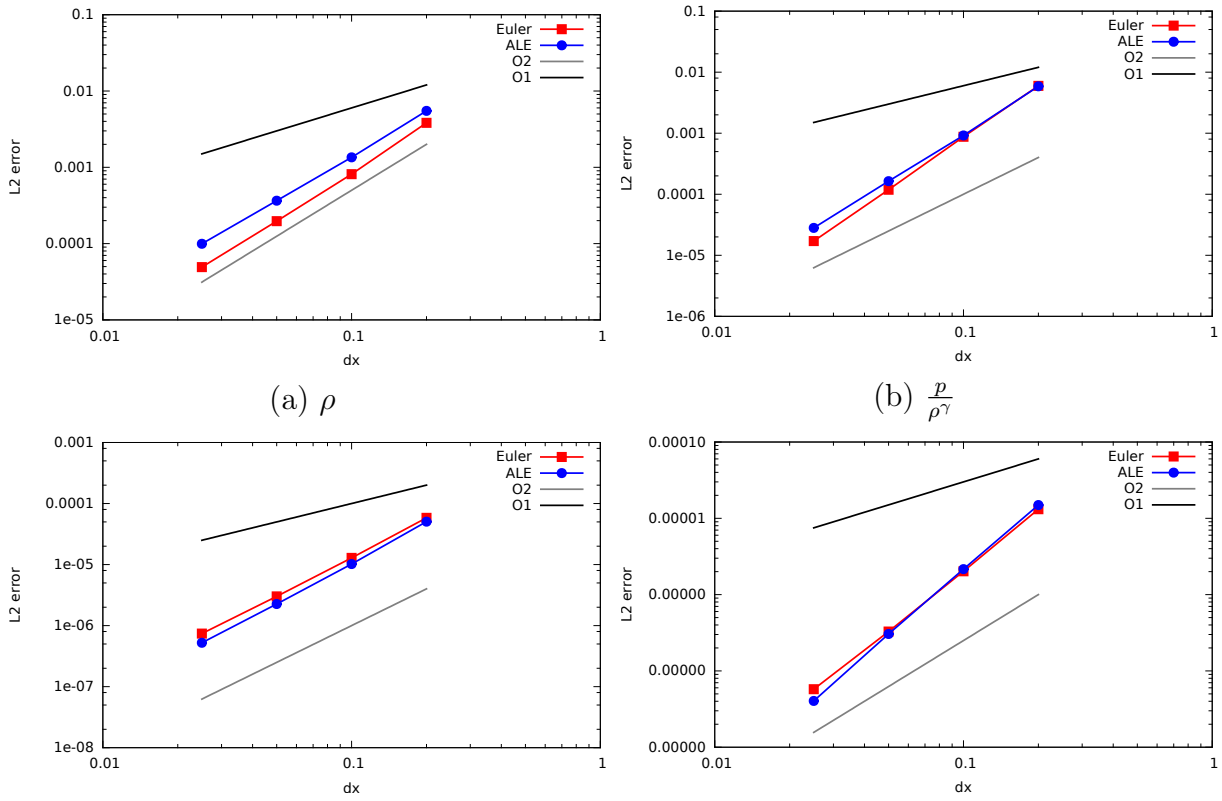
Les erreurs L^2 sur les variables suivantes sont calculées :

— la densité, pour la précision du schéma ALE ;
— le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$, pour mesurer l'isentropie de la solution numérique ;
— la norme euclidienne de la vitesse $\|\boldsymbol{u}\|$, pour mesurer l'erreur de quantité de mouvement due à la correction « VE » ;
— la variation lagrangienne des masses nodales δm_p, pour mesurer l'erreur venant des masses nodales variables.

La variation lagrangienne des masses nodales est la quantité définie par

$$\delta m_p = \frac{1}{m_p^0} \sum_n |m_p^{\mathrm{Old},n+1/2} - m_p^{n-1/2}|, \tag{7.3}$$

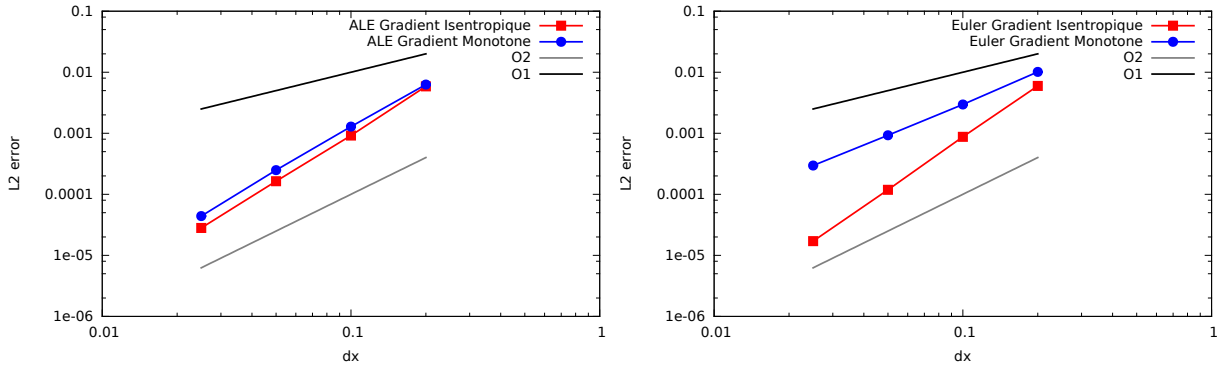
où on rappelle que $m_p^{\mathrm{Old},n+1/2}$ est la masse nodale sur la géométrie au temps $t^{n+1/2}$ avant un éventuel lissage. Ces erreurs sont données dans la figure 7.6. Le second ordre est obtenu sur toutes les quantités. Des valeurs plus élevées sont même observées sur le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$ et la variation des masses nodales. Cela peut s'expliquer par un temps final $t_f = 1$ trop faible et l'augmentation de la valeur de t_f peut permettre de retrouver les ordres attendus. La figure 7.6(c) atteste de la consistance de la quantité de mouvement : théorème 6.3. En particulier, la correction en vitesse « VE » est bien à l'ordre du schéma pour les masses nodales considérées ici comme cela a été démontré dans la proposition 6.4. Cela montre également que les flux de quantité de mouvement de la phase lagrangienne convergent vers zéro à l'ordre deux ce qui est confirmé par les figures 7.6(d) et 7.8. Enfin, l'apport du gradient d'énergie interne volumique isentropique construit dans la relation (6.29) est illustré sur la figure 7.7 comparé au gradient monotone (limité). Les erreurs sur le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$ sont toujours plus faibles et les ordres de convergence toujours plus élevés pour le gradient isentropique. La différence est d'autant plus flagrante que le remaillage est important. En particulier, on gagne un ordre de précision sur le caractère isentropique de l'écoulement en formulation Eulérienne : l'ordre estimé est à $\simeq 2.83$ pour le gradient isentropique contre $\simeq 1.7$ pour le gradient monotone. On note finalement que l'erreur sur le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$ est plus faible d'un facteur 10 sur le maillage 400×400 pour le gradient isentropique.



(a) ρ (b) $\frac{p}{\rho^\gamma}$

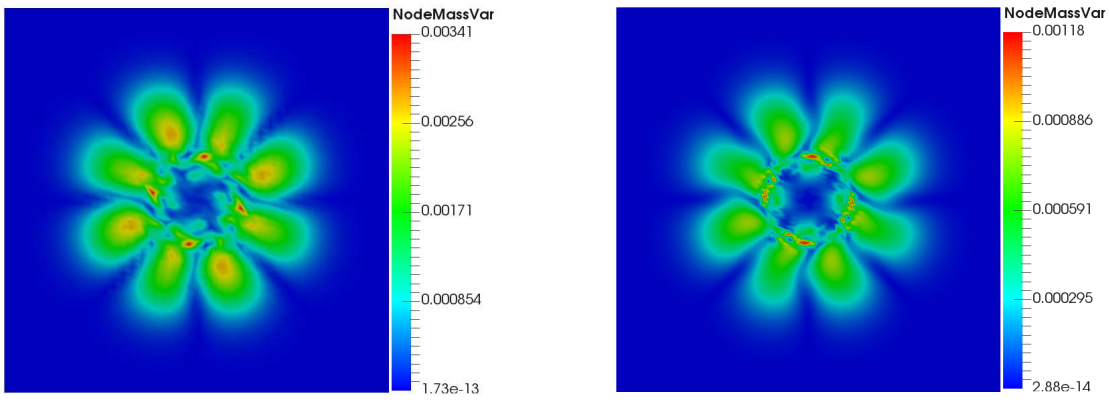
(c) $\|\boldsymbol{u}\|$ (d) δm_p

FIGURE 7.6 – Vortex isentropique. Erreurs L^2 pour le schéma CSTS en formulation Eulérienne et ALE : (a) erreurs sur la densité avec des ordres estimés à $\simeq 2.01$ pour la formulation Eulérienne et $\simeq 1.93$ pour l'ALE ; (b) erreurs sur le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$ avec des ordres estimés à $\simeq 2.83$ pour la formulation Eulérienne et $\simeq 2.57$ pour l'ALE ; (c) erreurs sur la norme euclidienne de la vitesse avec des ordres estimés à $\simeq 2.10$ pour la formulation Eulérienne et $\simeq 2.19$ pour l'ALE ; et (d) variation lagrangienne δm_p des masses nodales avec des ordres estimés à $\simeq 2.61$ pour la formulation Eulérienne et $\simeq 2.84$ pour l'ALE.



(a) Formulation ALE (b) Formulation Eulérienne

FIGURE 7.7 – Vortex isentropique. Comparaison entre le gradient d'énergie interne volumique monotone et le gradient (6.29) avec l'erreur L^2 sur le rapport $\frac{p}{\rho^\gamma}$ pour le schéma CSTS : (a) formulation ALE avec un ordre estimé à $\simeq 2.38$ lorsque le gradient est monotone ; et (b) formulation Eulérienne avec un ordre estimé à $\simeq 1.7$ lorsque le gradient est monotone.



(a) (b)

FIGURE 7.8 – Vortex isentropique. Variation lagrangienne δm_p des masses nodales et maillages finaux : (a) maillage 50×50 ; et (b) maillage 100×100.

7.4 Onde de choc sphérique de Sedov

7.4.1 Présentation du cas test

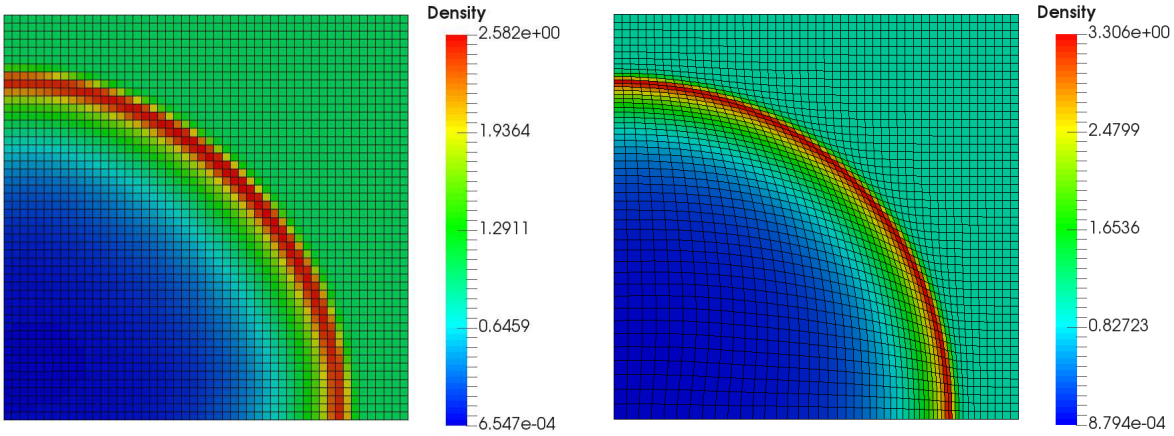
Ce cas test [158] a été présenté dans le chapitre 5, section 5.5. Bien que le calcul lagrangien peut être mené à son terme comme en atteste les résultats de la section 5.5, il est intéressant de réaliser ce cas test en formulation ALE pour : (i) valider la conservation de l'énergie totale et la robustesse ($p_0 = 10^{-14}$) comme pour le schéma lagrangien et (ii) comparer les différentes formulations (ALE, Eulérienne, Lagrangienne) avec la solution de référence.

7.4.2 Solution de référence

La solution auto-similaire, issue d'un code Fortran proposé dans [160], est explicitée dans la sous-section 5.5.2 du chapitre 5.

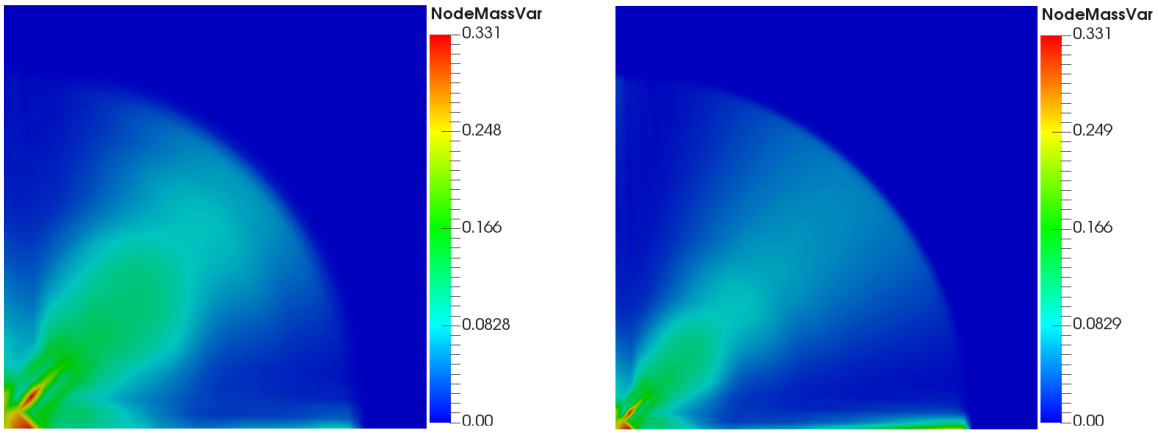
7.4.3 Résultats numériques

La remaillage est déclenché tous les vingt pas de temps dans le cas de l'ALE afin d'obtenir un maillage quasi-lagrangien sur le choc tandis que la maille à l'origine, où l'énergie est déposée, est beaucoup moins chahutée par rapport à un calcul lagrangien. La valeur du pic analytique de densité $\rho_1 = 4$ (voir la sous-section 5.5.2) est alors capturée de façon plus précise dans le cas de l'ALE par rapport au cas eulérien comme en atteste les figures 7.9 ou 7.11(c). La formulation Lagrangienne capture un pic de densité de $\simeq$ 3.4 contre $\simeq$ 3.3 pour la formulation ALE et $\simeq$ 2.6 pour la formulation Eulérienne. La conservation de l'énergie totale du schéma est validée grâce à la figure 7.12 réalisée sur le maillage 200×200. Ainsi, le schéma CSTS capture la solution analytique contrairement au schéma décalé non conservatif STS comme le montrent les figures 7.11(a) et 7.11(b). Enfin, la variation lagrangienne (7.3) des masses nodales est représentée sur deux maillages 50×50 et 100×100 dans la figure 7.10. Contrairement au vortex isentropique, on remarque que ces variations ne convergent pas vers 0 et qu'elles sont loin d'être négligeables. Il est donc important de les prendre en compte, ce qui est fait grâce aux flux de quantité de mouvement dans l'équation de quantité de mouvement (2.65). Les plus fortes variations sont observées au point singulier où l'énergie est déposée initialement—correspondant à la zone où les variations ne tendent pas vers 0—mais aussi au niveau de l'onde de choc sur l'axe de symétrie. Ceci est cohérent avec l'obtention de la consistance de la quantité de mouvement seulement à l'ordre 1 sur l'axe de symétrie.



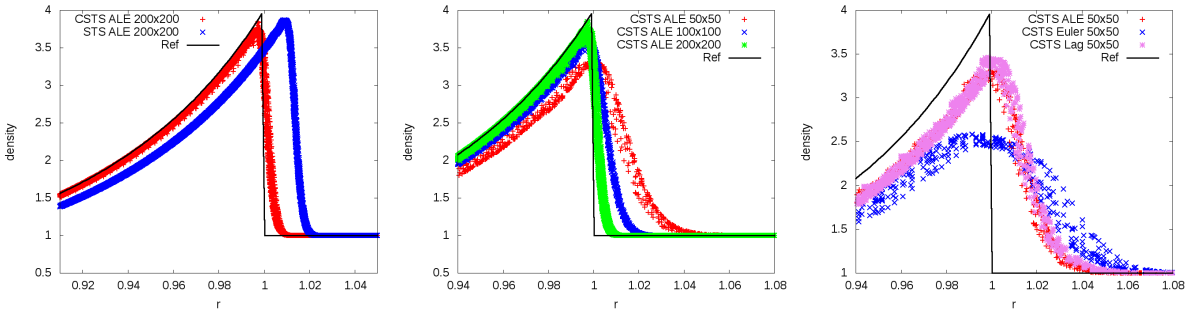
(a) formulation Eulérienne (b) formulation ALE

FIGURE 7.9 – Onde de choc sphérique de Sedov. Carte de densité et maillage au temps final pour le schéma CSTS : (a) formulation Eulérienne ; et (b) formulation ALE.



(a) maillage 50×50 (b) maillage 100×100

FIGURE 7.10 – Onde de choc sphérique de Sedov. Carte de variation lagrangienne des masses nodales et maillages ALE au temps final pour le schéma CSTS : (a) maillage 50×50 ; et (b) maillage 100×100.



(a) (b) (c)

FIGURE 7.11 – Onde de choc sphérique de Sedov. Profils de densité pour le schéma CSTS : (a) comparaison entre les schémas CSTS et STS sur le maillage 200×200 ; (b) convergence en maillage pour le schéma CSTS en formulation ALE ; et (c) comparaison entre les formulations Lagrangienne, Eulérienne et ALE pour le schéma CSTS sur le maillage 50×50.

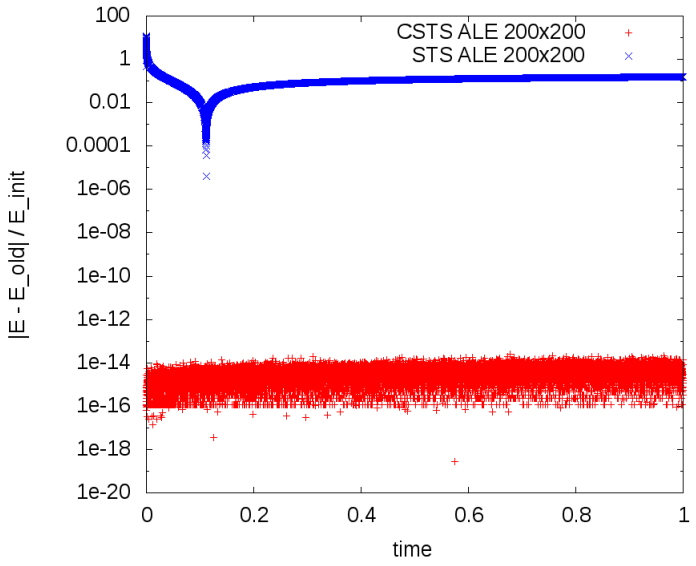


FIGURE 7.12 – Onde de choc sphérique de Sedov : évolution de la variation d'énergie totale pour les schémas CSTS et STS en formulation ALE sur le maillage 200×200.

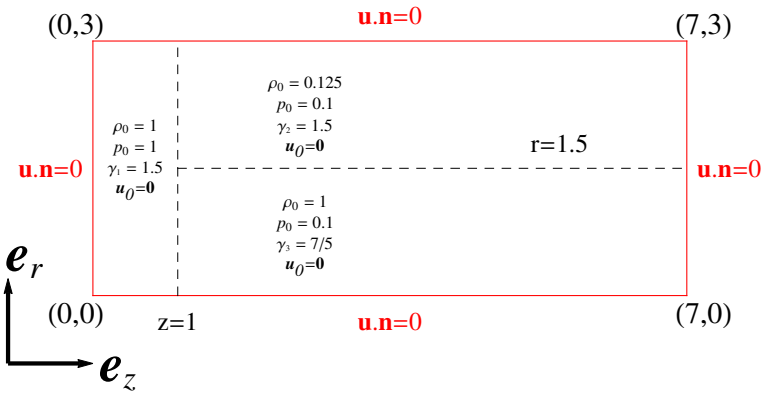


FIGURE 7.13 – Point triple en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites.

7.5 Point triple en géométrie axisymétrique

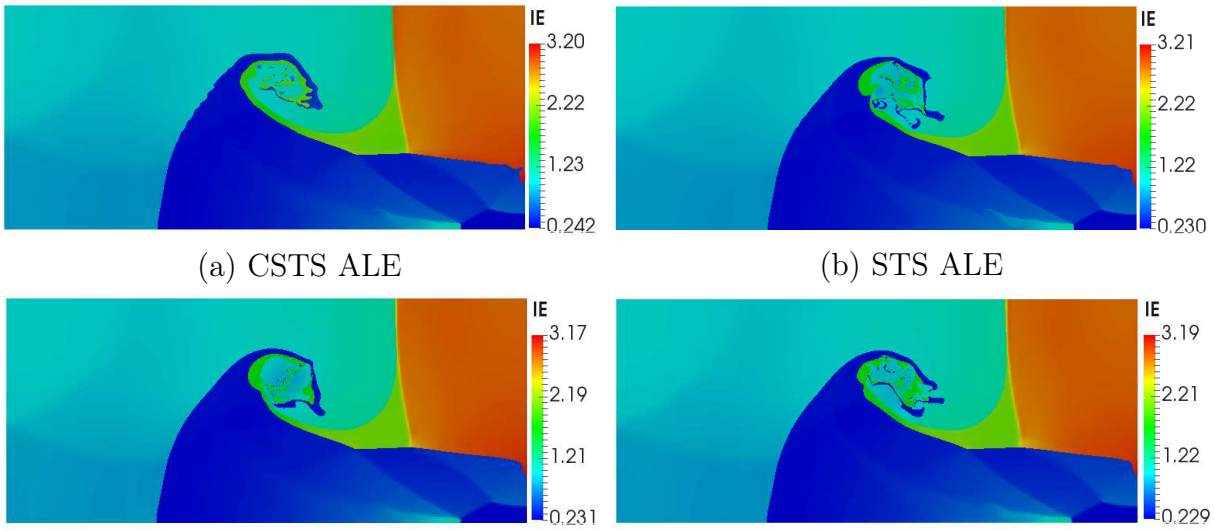
7.5.1 Présentation du cas test

Le problème du point triple correspond à un problème de Riemann à trois états et deux matériaux [31]. Initialement, le domaine rectangulaire $[0,7] \times [0,3]$ est rempli de gaz parfaits ayant les propriétés suivantes : (i) haute densité et haute pression $(\rho_0\,, p_0) = (1\,, 1)$, pour $z < 1$, avec $\gamma = 1.5$ (matériau 1), (ii) faible densité et faible pression $(\rho_0\,, p_0) = (0.125\,, 0.1)$, pour $z > 1$ et $r > 1.5$, avec $\gamma = 1.5$ (matériau 2) et (iii) haute densité et faible pression $(\rho_0\,, p_0) = (1\,, 0.1)$, pour $z > 1$ et $r < 1.5$, avec $\gamma = \frac{7}{5}$ (matériau 3). Tous les fluides sont au repos à $t = 0$, soit $\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{0}$. Les conditions initiales et les conditions aux limites sont présentées dans la figure 7.13. Un enroulement se déclenche à $t = 0$ au niveau du point triple en raison du cisaillement. Deux ondes de choc sont également générées au niveau du point triple. L'une se propage dans le matériau 1 dans la direction $-\boldsymbol{e}_z$ et la seconde, plus raide, se propage uniquement dans le matériau 2 dans le direction $\boldsymbol{e}_z$. Le temps final est fixé à $t_f = 5$. Ce cas test est répandu dans la littérature en géométrie plane [133, 134] mais il est beaucoup plus rare en géométrie axisymétrique [135]. Des comparaisons entre les deux géométries [135] montrent que l'axisymétrie affecte surtout le vortex qui est ici 3D.

La vorticité causant de trop grandes déformations du maillage, l'ALE est ici indispensable [31]. Le point triple met en évidence la robustesse du schéma et son habilité à capturer la vorticité ainsi que des ondes de choc se propageant dans plusieurs matériaux différents. L'aspect multi-matériaux permet également de tester le modèle de fermeture et la reconstruction d'interface.

7.5.2 Solution de référence

La solution analytique n'est pas disponible pour ce cas test. En particulier, l'enroulement dans le vortex devient de plus en fin et des instabilités peuvent être captées au fur et à



(a) CSTS ALE (b) STS ALE

(c) CSTS Euler (d) STS Euler

FIGURE 7.14 – Point triple en géométrie axisymétrique. Cartes d'énergie interne finales sur le maillage 490×210 : (a) schéma CSTS en formulation ALE ; (b) schéma STS en formulation ALE ; (c) schéma CSTS en formulation Eulérienne ; et (d) schéma STS en formulation Eulérienne.

mesure du raffinement du maillage et/ou du calcul. Ces instabilités sont dues, entre autre, aux nombreuses ondes de choc traversant les interfaces entres matériaux et à la présence de vitesses tangentielles au niveau de ces interfaces. Elles rendent la comparaison entre schémas particulièrement difficiles. Le développement et la croissance de ces instabilités dépendent particulièrement des schémas numériques utilisés car fortement liés à la dissipation. La dissipation—uniquement d'origine numérique lorsqu'on considère les équations d'Euler—peut beaucoup varier d'un schéma à l'autre (entre schémas centrés et décalés par exemple).

7.5.3 Résultats numériques

L'énergie interne et le maillage au temps final sont montrés en figure 7.15 pour le schéma CSTS en formulation ALE. La position du vortex, de l'onde de choc se propageant dans le matériau 2, et la position des matériaux sont en accord avec le résultat obtenu dans [135]. Une comparaison plus précise semble difficile au vu de la différence entres les méthodes utilisées. Une discrétisation centrée des variables est notamment choisie dans [135] impactant forcément le choix du schéma et donc la quantité d'énergie dissipée. Comme annoncé dans la partie 7.5.2, la quantité de dissipation dans le schéma permet aux instabilités de se développer plus ou moins. Ceci explique les instabilités ainsi que les différences observées en figure 7.14 sur le maillage plus fin, en particulier dans la zone du vortex. On note que le schéma CSTS en formulation ALE semble produire moins de dissipation puisqu'on peut observer des instabilités supplémentaires sur la figure 7.14(a), à l'extérieur de l'enroulement. C'est plus visible avec la position des matériaux affichée

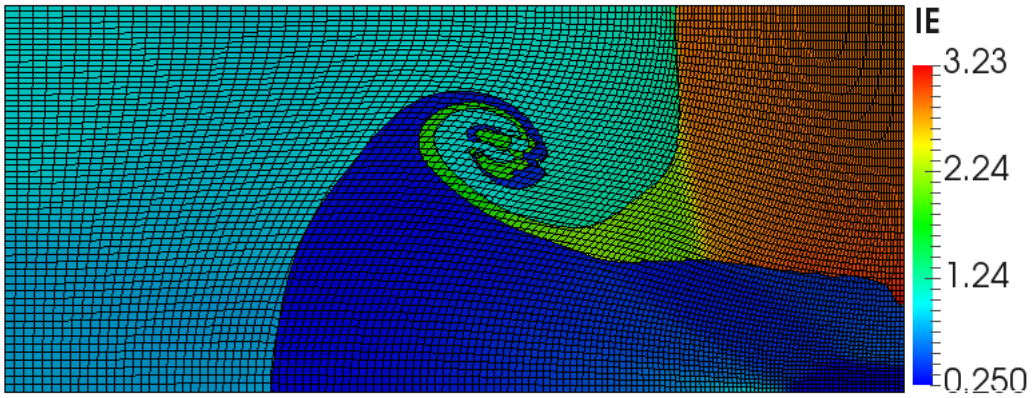
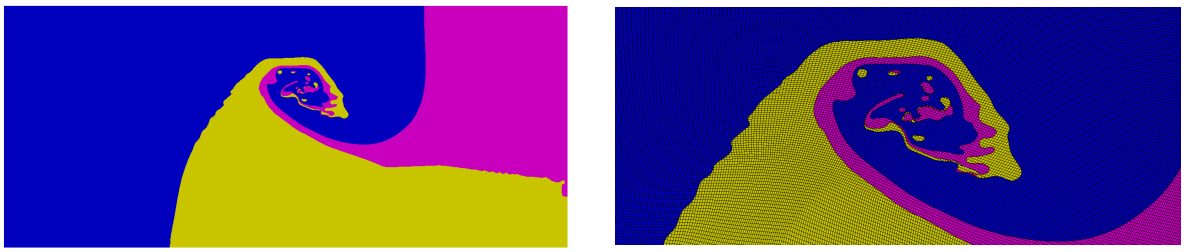


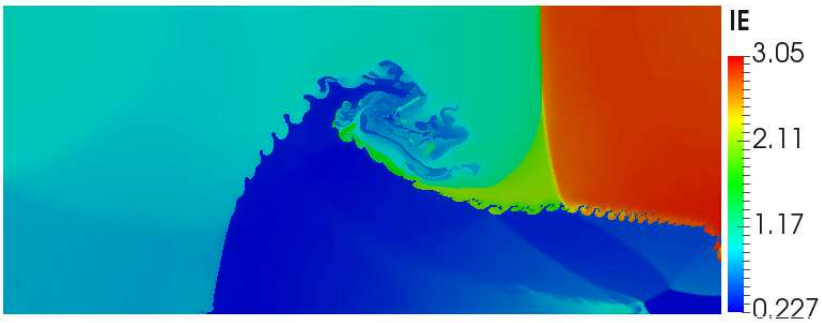
FIGURE 7.15 – Point triple en géométrie axisymétrique. Carte d'énergie interne et maillage 140×60 au temps final pour le schéma CSTS en formulation ALE.



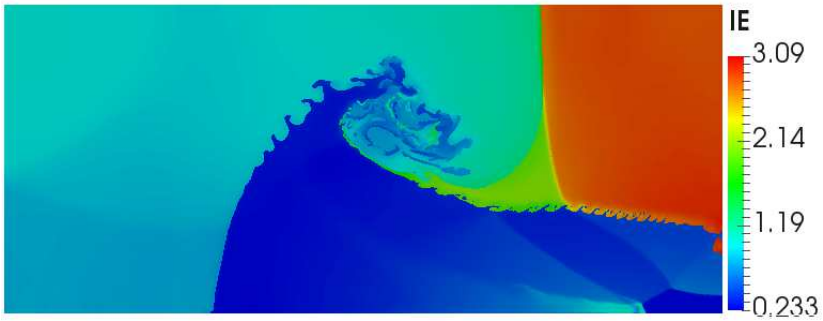
(a) (b)

FIGURE 7.16 – Point triple en géométrie axisymétrique. Carte de présence des matériaux au temps final pour le schéma CSTS en formulation ALE sur le maillage 490×210 : (a) vue globale ; et (b) zoom sur le vortex.

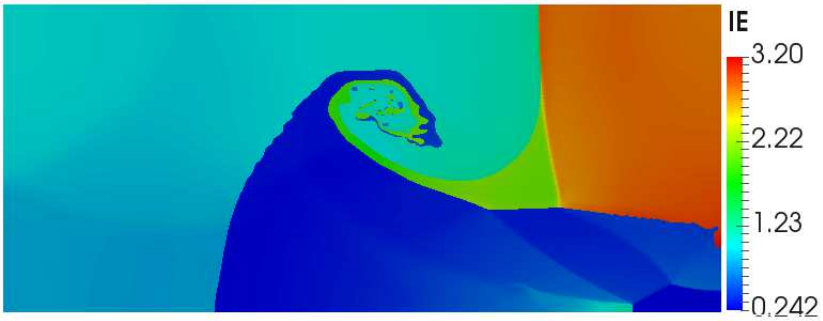
en figure 7.16. Ces instabilités sont saines et montrent que le schéma construit n'est pas trop dissipatif—permettant de capturer les écoulements isentropiques—mais tout de même robuste puisque le calcul se poursuit jusqu'au temps final. En particulier, il est important de préciser que l'absence de correction en vitesse, à savoir la correction « VB », ne permet pas d'atteindre la fin du calcul, même avec un faible coefficient CFL comme indiqué dans le tableau 7.2. Sans surprise, la correction « VE » est sans aucun doute la plus robuste et fournit un coefficient CFL maximum très proche du schéma STS mais supérieur. Ceci peut s'expliquer par le terme supplémentaire δe_c^{New}—correction (6.45)—introduit dans l'énergie interne pour CSTS, nécessairement positif suivant la proposition 6.6, et apportant donc plus de dissipation. Les cartes d'énergie interne pour les trois corrections « VE », « VQ » et « VM » sont affichées en figure 7.17. Malgré le contrôle du transfert de masse montré dans la proposition 6.4 quelle que soit la correction en vitesse, les résultats 7.17(a) et 7.17(b) diffèrent fortement du résultat 7.17(c). Ainsi, la différence dans la quantité d'énergie dissipée—même si elle est contrôlée à l'ordre du schéma—impacte fortement le résultat final et les corrections « VQ » et « VM » rendent un résultat beaucoup plus instable.



(a) Correction « VQ »



(b) Correction « VM »



(c) Correction « VE »

FIGURE 7.17 – Point triple en géométrie axisymétrique. Cartes d'énergie interne au temps final sur le maillage 490×210 : (a) schéma CSTS avec correction « VQ » ; (b) schéma CSTS avec correction « VM » ; et (c) schéma CSTS avec correction « VE ».

	STS	CSTS « VE »	CSTS « VM »	CSTS « VQ »	CSTS « VB »
CFL max	0.62	0.63	0.41	0.21	Crash

TABLE 7.2 – Point triple en géométrie axisymétrique : coefficient CFL maximum obtenu pour les différentes corrections en vitesse avec une formulation ALE et le maillage 490×210.

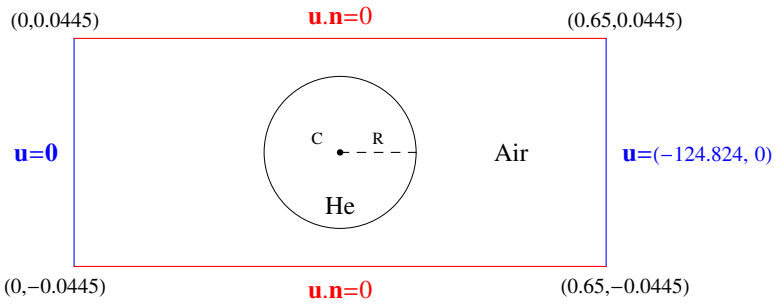


FIGURE 7.18 – Interaction choc-bulle en géométrie plane : conditions initiales et conditions aux limites. La bulle d'Hélium est de centre $C = (0.32\,,0)$ et de rayon $R = 0.025$.

7.6 Interaction choc-bulle

7.6.1 Présentation du cas test

On réalise ici la simulation numérique de l'interaction d'une onde de choc, se propageant dans l'air, avec une bulle d'Hélium. Deux versions de ce cas test sont présentées ici : une version en géométrie plane avec une bulle cylindrique et une version en géométrie axisymétrique avec une bulle sphérique. Ce cas est intéressant car des résultats expérimentaux sont disponibles (voir la sous-section 7.6.2 suivante).

7.6.1.1 Géométrie plane

Le domaine $[0\,,0.65]\times[-0.0445\,,0.0445]$ est rempli d'air à pression ambiante caractérisé par $(\rho_0\,,p_0\,,\gamma) = (0.182\,,10^5\,,7/5)$, excepté dans le disque de centre $C = (0.32\,,0)$ et de rayon $R = 0.025$. L'Hélium contenu dans ce disque est caractérisé par $(\rho_0\,,p_0\,,\gamma) = (1\,,10^5\,,1.648)$. Un piston de vitesse $(u^\star\,,0)$ sur le bord droit permet de générer le choc, se propageant dans l'air à Mach 1.22, avec $u^\star = -124.824$ qui est calculée grâce aux relations de Rankine-Hugoniot. Les conditions initiales et les conditions aux limites sont décrites dans la figure 7.18. Le temps final du cas test est $t_f = t_i + 674\times10^{-6}$, où $t_i = 668.153\times10^{-6}$ correspond au temps d'interaction entre le choc et la bulle. Le domaine est discrétisé avec 180×50 mailles.

7.6.1.2 Géométrie axisymétrique

La version axisymétrique de l'interaction choc-bulle est réalisée sur le domaine $[0\,,0.65]\times[0\,,0.0445]$. La bulle d'Hélium, entourée d'air, est de centre $C = (0.32\,,0)$ mais cette fois-ci de rayon $R = 0.0225$. Le choc généré par le piston de vitesse $(u^\star,0)$ est à Mach 1.25 ce qui donne $u^\star = -140.312$, grâce aux relations de Rankine-Hugoniot. Les données initiales et les conditions aux limites sont affichées dans la figure 7.19. Le temps final de simulation est $t_f = t_i + 600\times10^{-6}$, où $t_i = 657.463\times10^{-6}$ correspond toujours au temps d'interaction

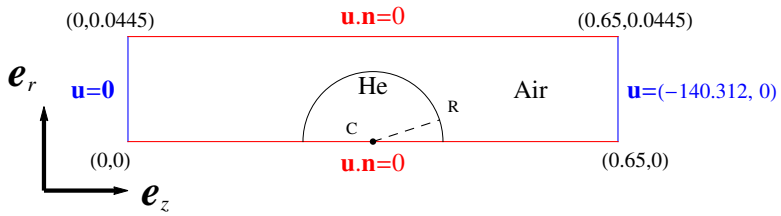


FIGURE 7.19 – Interaction choc-bulle en géométrie axisymétrique : conditions initiales et conditions aux limites. La bulle d'Hélium est de centre $C = (0.32\,, 0)$ et de rayon $R = 0.0225$.

entre le choc et la bulle. Un maillage plus fin, contenant 520×72 mailles, est utilisé ici [135].

7.6.2 Solution de référence

Des résultats d'expérience sont disponibles pour ce cas test à la fois en géométrie axisymétrique et en géométrie plane [137, 138]. La comparaison de la forme de la bulle et de sa position à t_f permettent de juger la capacité du code à reproduire une situation bien réelle. De plus, des simulations numériques sont également présentées dans [5, 79, 133, 136].

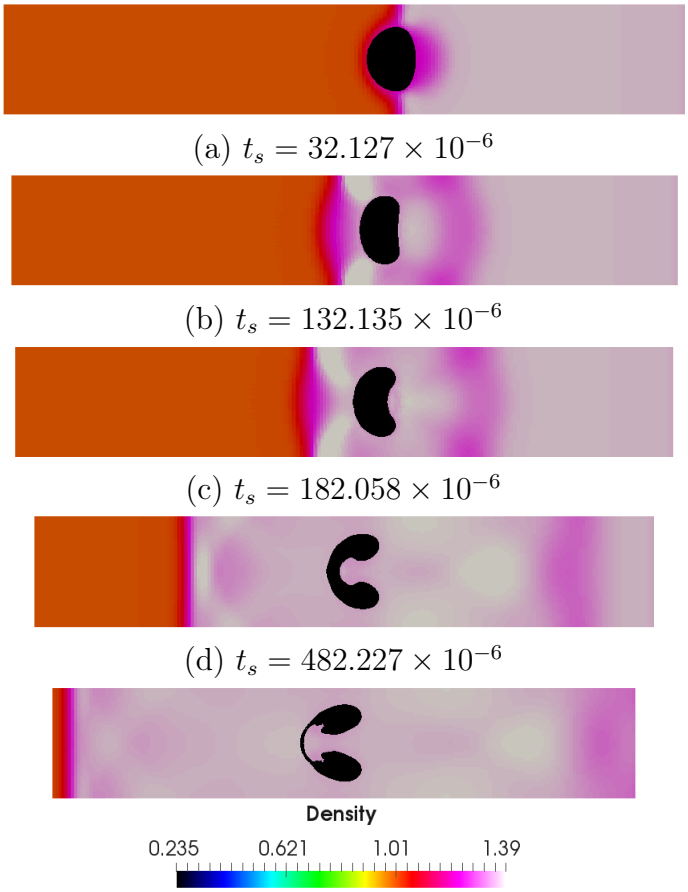
7.6.3 Résultats numériques

7.6.3.1 Géométrie plane

La densité à différents temps t_s est montrée en figure 7.20, où t_s correspond au temps après l'impact entre le choc et la bulle. La forme finale de la bulle obtenue avec le schéma CSTS est comparée avec le résultat du schéma STS et avec l'expérience en figure 7.21. Le résultat pour CSTS est en accord avec l'expérience et la littérature [135] tandis que STS rend un résultat plus proche de [79, 136], obtenu sur un maillage plus fin. Comme mentionné dans [136] et dans le cas du point triple (section 7.5), le manque de dissipation explique la différence entre les résultats numériques et l'expérience. Il manque ici une viscosité physique, venant des équations de Navier-Stokes, et on ne peut pas uniquement s'en remettre à la dissipation numérique. Le choix d'un maillage grossier permet tout de même d'obtenir assez de dissipation numérique pour être comparable à l'expérience. Comme pour le problème du point triple, les instabilités viennent perturber le résultat de manière significative sur un maillage plus fin, à la fois pour CSTS et pour STS.

7.6.3.2 Géométrie axisymétrique

Les résultats sont disponibles en figures 7.22 et 7.23. Comme pour le cas en géométrie plane, l'évolution de la densité est affichée à différents temps t_s après l'interaction entre le



(a) $t_s = 32.127 \times 10^{-6}$

(b) $t_s = 132.135 \times 10^{-6}$

(c) $t_s = 182.058 \times 10^{-6}$

(d) $t_s = 482.227 \times 10^{-6}$

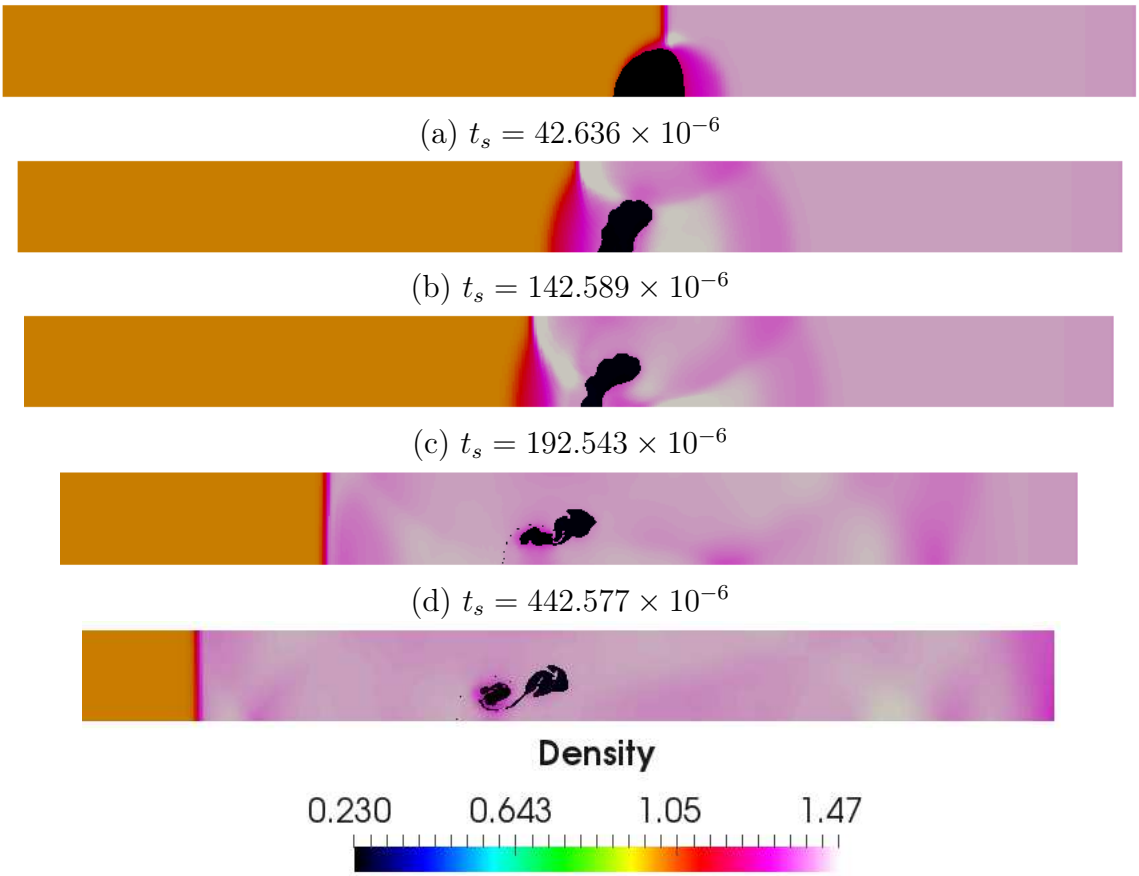
(e) $t_s = 674 \times 10^{-6}$

FIGURE 7.20 – Interaction choc-bulle en géométrie plane. Cartes de densité obtenues avec le schéma CSTS en formulation ALE sur le maillage 180×50 : (a) $t_s = 32.127 \times 10^{-6}$; (b) $t_s = 132.135 \times 10^{-6}$; (c) $t_s = 182.058 \times 10^{-6}$; (d) $t_s = 482.227 \times 10^{-6}$; et (e) $t_s = 674 \times 10^{-6}$. Le temps t_s correspond au temps après l'impact entre le choc et la bulle, noté t_i.



(a) CSTS (b) STS (c) diagramme de Schlieren

FIGURE 7.21 – Interaction choc-bulle en géométrie plane. Zoom autour de la bulle effectué au temps final : (a) schéma CSTS ; (b) schéma STS ; et (c) diagramme de Schlieren issu de [137].



(a) $t_s = 42.636 \times 10^{-6}$

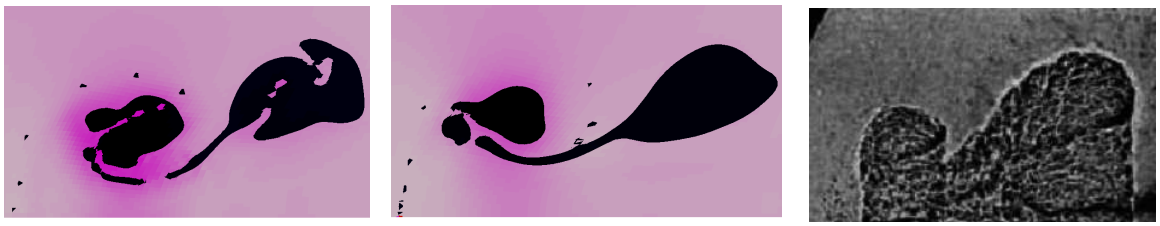
(b) $t_s = 142.589 \times 10^{-6}$

(c) $t_s = 192.543 \times 10^{-6}$

(d) $t_s = 442.577 \times 10^{-6}$

(e) $t_s = 600 \times 10^{-6}$

FIGURE 7.22 – Interaction choc-bulle en géométrie axisymétrique. Cartes de densité obtenues avec le schéma CSTS en formulation ALE sur le maillage 520×72 : (a) $t_s = 42.636 \times 10^{-6}$; (b) $t_s = 142.589 \times 10^{-6}$; (c) $t_s = 192.543 \times 10^{-6}$; (d) $t_s = 442.577 \times 10^{-6}$; et (e) $t_s = 600 \times 10^{-6}$.



(a) CSTS (b) STS (c) diagramme de Schlieren

FIGURE 7.23 – Interaction choc-bulle en géométrie axisymétrique. Zoom autour de la bulle effectué au temps final : (a) schéma CSTS ; (b) schéma STS ; et (c) diagramme de Schlieren issu de [137].

choc et la bulle et la forme finale de la bulle est comparée avec STS et l'expérience. La différence de dissipation entre CSTS et STS et le choix d'un maillage plus fin expliquent l'apparition des instabilités pour le schéma CSTS. Même si elles affectent clairement la solution finale, on obtient une forme de bulle proche de l'expérience, tout comme pour le schéma STS. L'enroulement à l'arrière de la bulle semble même plus correctement capturé pour CSTS. Le développement de ces instabilités peut être enraillé par la dissipation numérique apportée par un maillage grossier mais le manque de mailles ne permet pas de capturer correctement la forme de la bulle, à la fois pour les schémas CSTS et STS.

7.7 Conclusion du chapitre

Les résultats présentés dans ce chapitre sont obtenus à la fois en 2D plan et axisymétrique ainsi qu'en formulation ALE et Eulérienne. Ils confirment les propriétés énoncées dans le chapitre 6 :

- Les solutions de références sont correctement restituées ;
- La précision à l'ordre deux est obtenue, sur l'entropie en particulier (vortex isentropique) ;
- La conservation de l'énergie totale est validée (Sedov) ;
- L'algorithme ALE est robuste (point triple).

On a effectué des comparaisons entre les différentes corrections en vitesse du chapitre 6 sur le cas test du point triple. Ces comparaisons confirment le choix de la correction « VE » et son caractère plus dissipatif.

Chapitre 8

Conclusion & Perspectives

This work aims at solving hydrodynamic equations to compute demanding multi-material, compressible fluid flows. These flows are of great interest for CEA and may involve simultaneously : (i) an arbitrary number of non-miscible materials ; (ii) both strong shocks and isentropic process ; (iii) large deformations ; and (iv) high transfers between kinetic and internal energies. Starting from robust and simple Space- and Time-Staggered (STS) discretizations, this work is based on the Lagrangian conservative extension (CSTS) of Llor *et al.* [53]. The second-order ALE CSTS numerical method, progressively introduced throughout this PhD dissertation, is therefore conservative (at the scheme's order for momentum), thermodynamically consistent and robust. Several classical, but demanding, test cases—both in axisymmetric and plane 2D geometries—are performed to assess these properties. The novelties, introduced in this work to achieve these goals, are :

Lagrangian phase

— Variable node masses ;
— Inertial-based anti-hourglassing filter ;

Remapping phase

— Remapping at half time $t^{n+1/2}$;
— Corrections both on velocity and internal energy ;
— Isentropic reconstruction of the internal energy gradient.

As a first attempt to derive an ALE CSTS scheme, there are, of course, numerous perspectives for this work :

— more complex artificial viscosity formulations [64, 81, 82] ;
— more complex interface reconstruction with MoF methods [37, 38] for example ;
— rezoning and remapping steps performed at integer labeled times t^n ;
— interpolation of velocities between Lagrangian and rezoned meshes ;

— other node mass matrix definitions, especially for preserving the spherical symmetry in axisymmetric geometry ;
— more complex multi-material closures to take into account different material compressibilities ;
— coupling with other physics, such as elasto-plasticity.

Rezoning and remapping steps defined at integer labeled times t^n avoid computation of the time-staggered geometry, hence improving the computational cost. The question of the symmetry preservation during the remapping can be adressed and improved by interpolating velocities instead of performing the usual intersection-based remapping. Note also that the first two points can be included in this work *a priori* without difficulty.

The situation for the node mass matrix definition, for general flows, seems more complex. The "ideal" solution could be a variable finite element mass matrix, thus computed on the actual configuration. But such a choice clearly requires several developments to improve the computational cost. An other good candidate seems to be an "area-weighted" node mass $m_p = r_p \, \rho_p \, A_p$. It appears to be a good compromise between the computational cost and the symmetry preservation. Unfortunately, a specific treatment for on-axis nodes in axisymmetric geometry, where $m_p = 0$, is still needed [5].

A more complex multi-material closure will be necessary when dealing with contrasted equations of state. As in [17, 179], a closure model can be derived, assuming pressure equilibrium.

Space-staggered discretizations are well suited for solids since it allows to accurately compute stresses. First of all, stresses and their work have to be added in momentum and internal energy equations of our Lagrangian CSTS scheme. Then, for isotropic materials in hydrodynamic regimes, the constitutive law characterizing the deviatoric Piola stress tensor τ^φ can be written under a simple differential form [47, 180] for each material φ

$$\frac{d\tau^\varphi}{dt} = f(\tau^\varphi, \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}, \ldots). \tag{8.1}$$

Therefore, following the hypoelasticity framework [47], the deviatoric Piola stress tensor τ^φ can be easely computed at half-integer labeled times $t^{n+1/2}$ to be remapped.

Annexe A

Démonstration des résultats du Chapitre 2

A.1 Démonstration de la consistance du schéma CCNM

Le résultat que l'on doit démontrer ici est

Résultat à démontrer. *Le schéma est consistant en géométrie axisymétrique et en géométrie plane.*

On effectue la démonstration en géométrie axisymétrique. Le résultat en géométrie plane se démontre exactement de la même manière. Soient ρ, $\boldsymbol{u}$ et p les solutions supposées localement régulières du problème continu. La fonction de forme $\psi(z\,,r)$ vaut 1 sur le noeud p, 0 sur les autres noeuds, et s'interpole linéairement sur les arêtes joignant deux noeuds. L'intégration est effectuée avec la mesure $dA = dr\,dz$ et la composante radiale r venant du volume infinitésimal 3D $dV = 2\,\pi\,dr\,dz$ est considérée dans l'intégrande. Par construction de cette fonction de forme, la variation de volume induite par un déplacement élementaire du noeud p vaut

$$\frac{\partial V_c}{\partial x_p^\alpha} = \int_{\partial A_c} r\,\psi_p\,n_\alpha\,dl,$$

où $\alpha = r$ ou z. Par multiplication de l'équation de quantité de mouvement dans la direction $\boldsymbol{e}_\alpha$ par la fonction de forme ψ_p, on obtient

$$\sum_{c\in C(p)} \int_{A_c} \rho \frac{du^\alpha}{dt} \psi_p\, r\, drdz = -\sum_{c\in C(p)} \int_{A_c} \partial_\alpha p\, \psi_p\, r\, drdz,$$

pour tout nœud p. Par intégration par parties et en utilisant la continuité de p et ψ_p aux interfaces, ceci s'écrit

$$\sum_{c\in C(p)} \int_{A_c} \rho \frac{du^\alpha}{dt} \psi_p\, r\, drdz = \sum_{c\in C(p)} \int_{A_c} p\,\partial_\alpha(\psi_p\, r) drdz,$$

pour tout nœud. En introduisant la moyenne p_c de la pression sur A_c, ceci s'écrit encore

$$\begin{aligned}\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\tfrac{du^\alpha}{dt}\psi_p\,r\,drdz &= \sum_{c\in C(p)} p_c\int_{A_c}\partial_\alpha(\psi_p\,r)\,drdz + \sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}(p-p_c)\,\partial_\alpha(\psi_p\,r)\,drdz\\ &= \sum_{c\in C(p)} p_c\int_{\partial A_c} r\,\psi_p\,n_\alpha\,dl + \sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\boldsymbol{\nabla}p\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_c)\,\partial_\alpha(\psi_p\,r)\,drdz\\ &= \sum_{c\in C(p)} p_c\,\tfrac{\partial V_c}{\partial x_p^\alpha}\left(1+\left|\tfrac{\boldsymbol{\nabla}p}{p}\right|\mathcal{O}(\Delta x)\right). \qquad (A.1)\end{aligned}$$

Sur un maillage régulier, par annulation des intégrales des termes linéaires entre éléments voisins A_c centrés en $\boldsymbol{x}_p$, on peut montrer que le dernier terme est en fait en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. Pour traiter le terme d'accélération, on introduit l'interpolée élément fini $I_h\frac{du^\alpha}{dt}=\sum_q\frac{du_q^\alpha}{dt}\psi_q$ du champ d'accélération $\frac{du^\alpha}{dt}$. On obtient alors

$$\begin{aligned}\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\,\tfrac{du^\alpha}{dt}\psi_p\,r\,drdz &= \sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\sum_q\rho\,\tfrac{du_q^\alpha}{dt}\psi_p\,\psi_q\,r\,drdz\\ &\quad+\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\,(I_h\tfrac{du^\alpha}{dt}-\tfrac{du^\alpha}{dt})\,\psi_p\,r\,drdz\\ &= \sum_q\left(\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\,\psi_p\,\psi_q\,r\,drdz\right)\tfrac{du_q^\alpha}{dt}\\ &\quad+\sum_{c\in C(p)} m_c\times\mathcal{O}(\Delta x^2).\end{aligned}$$

Après discrétisation en temps à l'ordre deux de l'accélération $\frac{du_q^\alpha}{dt}$, la solution continue vérifie donc finalement

$$\begin{aligned}&\sum_q\left(\sum_{c\in C(p)}\int_{A_c}\rho\,\psi_p\,\psi_q\,r\,drdz\right)\left(\frac{u_q^{\alpha,n+1/2}-u_q^{\alpha,n-1/2}}{\Delta t^n}\right)\\ &\qquad-\sum_{c\in C(p)} p_c\,\tfrac{\partial V_c}{\partial x_p^\alpha}=\|\psi_p\|_{L^2(\Omega)}\left(\mathcal{O}(\Delta t^2)+\mathcal{O}(\Delta x)\right) \qquad (A.2)\end{aligned}$$

ce qui démontre la consistance du schéma à masse non diagonale dans un cadre axisymétrique.

A.2 Démonstration de la cohérence thermodynamique du schéma VNM

On souhaite démontrer la cohérence thermodynamique du schéma lagrangien VNM. Le résultat est

Résultat à démontrer. *Le schéma est cohérent thermodynamiquement l'ordre 2 en temps pour chaque matériau φ. Les écoulements isentropiques sont capturés à l'ordre deux, c'est-à-dire que l'on a*

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) = 0,$$

en l'absence de termes dissipatifs. En présence de termes dissipatifs, le second principe est également respectée à l'ordre deux, soit

$$s_c^{\varphi,n+1/2} - s_c^{\varphi,n-1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \geq 0.$$

On omet l'indice matériau φ. La démonstration est valide quelque soit la matériau φ considéré. On part de la version semi-discrète de la relation de Gibbs (1.5) qui s'écrit

$$de_c = -p_c\, dv_c + T_c\, ds_c,$$

dans une maille c quelconque compte tenu de l'identité cinématique $(\nabla \cdot \boldsymbol{u})_c = \rho_c\, dv_c$. On multiplie par la masse m_c constante et on utilise le fait que $v_c = 1/\rho_c$ pour obtenir $dV_c = d\left(m_c/\rho_c\right) = m_c\, dv_c$, puis

$$m_c\, de_c = -p_c\, dV_c + m_c T_c\, ds_c. \tag{A.3}$$

On reprend alors l'équation (2.81)—en omettant l'indice matériau—d'évolution de l'énergie interne entre $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$

$$\begin{aligned} m_c\left(e_c^{n+1/2} - e_c^{n-1/2}\right) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ &-\left[\left(p_c^n + q_c^n\right)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot\frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\ &- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4}\left(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2}\right)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\Delta t^{n+1/2} \\ &- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{4}\left(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2}\right)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \cdot \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)\Delta t^{n-1/2} \\ &+ \tfrac{1}{2}\left(m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2}\right)\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\}, \end{aligned}$$

à laquelle on ajoute le travail discret de la pression entre les instants $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$

$$\sum_{p\in P(c)} p_c^n \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}, \tag{A.4}$$

On obtient donc la production d'entropie du schéma VNM :

$$\begin{aligned} m_c T_c^n \left(s_c^{n+1/2}-s_c^{n-1/2}\right) = \sum_{p\in P(c)} \Big\{ &-\left[q_c^n \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right]\cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2} \\ &- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2} \\ &- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2} \\ &+ \tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\}. \end{aligned} \tag{A.5}$$

Le terme à étudier est donc

$$\begin{aligned} \sum_{p\in P(c)} \Big\{ &\underbrace{- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2}}_{\text{Terme A}} \\ &\underbrace{- \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2}}_{\text{Terme B}} \\ &\underbrace{+\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2}-m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}_{\text{Terme C}}\Big\}. \end{aligned}$$

Toute l'analyse de ce terme est basée sur les développements de Taylor des vitesses, du carré des vitesses et des variations de masse. On commence par s'intéresser au terme C pour lequel on réalise le développement de Taylor des vitesses $\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}$ et $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ autour de t^n à l'ordre 2 :

$$\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} = \boldsymbol{u}_p^n + \boldsymbol{\gamma}_p^n \frac{\Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2), \tag{A.6a}$$

$$\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} = \boldsymbol{u}_p^n - \boldsymbol{\gamma}_p^n \frac{\Delta t^{n+1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2), \tag{A.6b}$$

où $\boldsymbol{\gamma}_p^n$ désigne l'accélération au nœud p et au temps t^n. On injecte nos deux développements

de Taylor (A.6a) et (A.6b) dans le terme C

$$\begin{aligned}
(m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} &= (m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2}) \\
&\quad \left(\boldsymbol{u}_p^n + \boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\Delta t^{n-1/2}}{2}\right)\cdot\left(\boldsymbol{u}_p^n - \boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\Delta t^{n+1/2}}{2}\right) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
&= (m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})\Big[\left(\boldsymbol{u}_p^n\right)^2 - \boldsymbol{u}_p^n\cdot\boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\Delta t^{n+1/2}}{2} \\
&\quad + \boldsymbol{\gamma}_p^n\cdot\boldsymbol{u}_p^n\,\frac{\Delta t^{n-1/2}}{2}\Big] + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
&= (m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})\left(\boldsymbol{u}_p^n\right)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3), \qquad \text{(A.7)}
\end{aligned}$$

sous l'hypothèse de croissance régulière du pas de temps $\Delta t^{n+1/2} - \Delta t^{n-1/2} = \mathcal{O}(\Delta t^2)$. À présent, on considère

$$\left(\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)^2 = \left(\boldsymbol{u}_p^n\right)^2 + 2\,\boldsymbol{u}_p^n\cdot\boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2), \qquad \text{(A.8a)}$$

$$\left(\boldsymbol{u}_p^{*n+1/2}\right)^2 = \left(\boldsymbol{u}_p^n\right)^2 - 2\,\boldsymbol{u}_p^n\cdot\boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\Delta t^{n+1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2), \qquad \text{(A.8b)}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}
\mathrm{A}+\mathrm{B} = &-\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2\,\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2} \\
&-\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2\,\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2} \\
&+\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}\boldsymbol{u}_p^n\cdot\boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\left(\Delta t^{n-1/2}\right)^2 \\
&-\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}\boldsymbol{u}_p^n\cdot\boldsymbol{\gamma}_p^n\,\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\left(\Delta t^{n+1/2}\right)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
= &-\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2\,\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2} \\
&-\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2\,\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}\cdot(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3),
\end{aligned}$$

puisque $\left(\Delta t^{n-1/2}\right)^2 = \left(\Delta t^{n+1/2}\right)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3)$ sous l'hypothèse de croissance régulière du pas de temps et $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} = \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t)$. On réitère le raisonnement avec les développements de Taylor à l'ordre 2 autour de t^n des vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2}$

et $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n+1/2}$. On montre de la même manière que les termes A et B vérifient

$$\begin{aligned}
\mathrm{A}+\mathrm{B} = & -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n-1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2} \\
& -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n+1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
= & -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^n)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\left(\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}\right) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
= & -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^n)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n} \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
= & -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^n)^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n} \cdot \boldsymbol{u}_p^n\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3). \qquad \text{(A.9)}
\end{aligned}$$

On somme l'égalité (A.9) sur les nœuds $p \in P(c)$ et on échange les sommes sur p et q pour obtenir

$$\sum_{p\in P(c)} [\mathrm{A}+\mathrm{B}] = -\sum_{p\in P(c)}\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^n)^2 \tfrac{\partial m_{cp}}{\partial \boldsymbol{x}_q}\big|^{n} \cdot \boldsymbol{u}_q^n\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3). \qquad \text{(A.10)}$$

Finalement, on retrouve dans l'équation (A.10) la variation de masse $(m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})$ du terme C à un $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ près

$$\begin{aligned}
\sum_{p\in P(c)} [\mathrm{A}+\mathrm{B}] &= -\sum_{p\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^n)^2 \left[\sum_{q\in P(c)} \tfrac{\partial m_{cp}}{\partial \boldsymbol{x}_q}\big|^{n} \cdot \boldsymbol{u}_q^n\,\frac{\Delta t^{n+1/2}+\Delta t^{n-1/2}}{2}\right] + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
&= -\sum_{p\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_p^n)^2\,(m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2}) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \qquad \text{(A.11)}
\end{aligned}$$

Les équations (A.7) et (A.11) permettent de conclure que

$$\begin{aligned}
\sum_{p\in P(c)} \Big\{ & -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n-1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n-1/2} \\
& -\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\big|^{n+1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}+\boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\,\Delta t^{n+1/2} \\
& + \tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})\,\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\Big\} = \mathcal{O}(\Delta t^3).
\end{aligned}$$

Si on prend en compte la relation précédente, la production d'entropie (A.5) du schéma

VNM se réécrit alors

$$m_c T_c^n \left(s_c^{n+1/2} - s_c^{n-1/2}\right) = \sum_{p \in P(c)} - \left[q_c^n \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad \text{(A.12)}$$

La relation (A.12) permet de conclure sur la précision du schéma pour la capture des écoulements isentropiques en l'absence de termes dissipatifs. Concernant le respect du second principe de la thermodynamique, on fait l'hypothèse de la positivité des termes dissipatifs (démontrée dans le Chapitre 4) :

$$\sum_{p \in P(c)} - \left[q_c^n \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n\right] \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} + \mathcal{O}\left(\Delta t^3\right) \geq 0. \quad \text{(A.13)}$$

L'équation (A.12) additionnée avec l'inégalité (A.13) conclut la preuve.

Annexe B

Application des conditions aux limites

Pour les nœuds au bord, des forces extérieures $\boldsymbol{F}_p^n$ sont ajoutées dans les équations de quantités de mouvement de chaque schéma de la manière suivante [53]

$$m_p^{n+1/2}\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}\boldsymbol{u}_p^{n-1/2} = \Big[\, \boldsymbol{F}_p^n + \sum_{c\in C(p)} \Big((p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n \Big) \Big]\, \Delta t^n$$
$$+ \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n-1/2} \Delta t^{n-1/2} + \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{4}(\boldsymbol{u}_q^{n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2}, \qquad \text{(B.1a)}$$

$$\Big[\tilde{M}\left(\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2} - \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\right)\Big]_p = \Big[\, \boldsymbol{F}_p^n + \sum_{c\in C(p)} \Big((p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n + \boldsymbol{f}_{cp}^n \Big) \Big]\, \Delta t^n \ . \qquad \text{(B.1b)}$$

où $\Delta t^n = \frac{1}{2}\left(\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}\right)$. Les forces extérieures $\boldsymbol{F}_p^n$ peuvent être connues explicitement (pour définir une condition aux limites de type pression imposée par exemple) ou implicitement (pour définir une condition aux limites sur la vitesse). La quantité de mouvement et l'énergie du système ne sont alors plus des constantes et les propriétés de conservation se vérifient sur les quantités totales $\boldsymbol{\mu}_{\text{Tot.}}^n$ et $\mathcal{E}_{\text{Tot.}}^n$.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}_{\text{Tot.}}^n &= \boldsymbol{\mu}_{\text{Tot.}}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}_{\text{Tot.}}^{n-1/2} \\
&= \boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2} - \boldsymbol{\mu}_{\text{Ext}}^n \\
&= \boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2} - \sum_p \boldsymbol{F}_p^n\, \Delta t^n \ ,
\end{aligned} \qquad \text{(B.2)}$$

et

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{\text{Tot.}}^n &= \mathcal{E}_{\text{Tot.}}^{n+1/2} - \mathcal{E}_{\text{Tot.}}^{n-1/2} \\
&= \mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2} - \mathcal{E}_{\text{Ext}}^n \\
&= \mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2} - \sum_p \boldsymbol{F}_p^n \cdot \frac{\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2}}{2}\, \Delta t^n \ ,
\end{aligned} \qquad \text{(B.3)}$$

où $\boldsymbol{\mu}^{n+1/2}$ et $\mathcal{E}^{n+1/2}$ sont définies pour chacun de nos schémas numériques dans le Chapitre 2. En pratique, les conditions aux limites sont appliquées directement sur la vitesse lorsqu'elles sont de type vitesse imposée $\boldsymbol{u}_p = \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{b}}$ ou flux nul $\boldsymbol{u}_p \cdot \boldsymbol{n} = 0$. Les forces extérieures $\boldsymbol{F}_p^n$ correspondant à l'application de ces conditions aux limites sont ensuite déduites afin de vérifier numériquement les propriétés de conservation de quantité de mouvement (B.2) et d'énergie totale (B.3).

Ce qui vient d'être dit est également valide pour le schéma CCNM où chaque nœud p est couplé aux autres nœuds $q \in Q(p)$ par la matrice de masse $\tilde{M}$. L'application directe des conditions aux limites sur la vitesse passe par la modification de cette matrice lors du passage dans les équations de quantité de mouvement (2.27a) et (2.27b). Les forces extérieures $\boldsymbol{F}_p^n$ correspondants aux changements effectués dans la matrice de masse, ainsi que les propriétés de conservation qui en découlent, sont ensuite déduites.

Annexe C

Démonstration des résultats du Chapitre 3

C.1 Vérification des volumes axisymétriques V_c

On souhaite vérifier la formule pour le volume axisymétrique V_c d'une maille quadrangulaire c quelconque obtenue dans l'équation (3.5). Pour cela, on considère une maille quadrangulaire comme l'union de deux mailles triangulaires. On détermine alors le volume axisymétrique, noté V_c^{T}, d'une maille triangulaire toujours désignée par c. On choisit un nœud arbitrairement dans la maille c que l'on nomme 00 puis on affecte respectivement 01 et 11 aux nœuds suivant 00 dans le sens trigonométrique. L'élément de référence, toujours noté $\hat{c}$, est ici le triangle rectangle formé des nœuds (0,0), (1,0) et (0,1) (voir figure C.1). La transformation inversible $F_c^{\mathrm{T}} : \hat{c} \to c$ est maintenant affine.

Définition C.1. *Pour une maille c triangulaire, la transformation inversible $F_c^T : \hat{c} \to c$ est affine et s'écrit*

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} &= F_c^T(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ &= \boldsymbol{J}_c^T \hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{b}^T \\ &= \begin{pmatrix} z_{01} - z_{00} & z_{11} - z_{00} \\ r_{01} - r_{00} & r_{11} - r_{00} \end{pmatrix} \hat{\boldsymbol{x}} + \begin{pmatrix} z_{00} \\ r_{00} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{C.1}$$

Les correspondances entre les nœuds de $\hat{c}$ et de c devient : (0,0) $\to$ 00, (1,0) $\to$ 01 et (0,1) $\to$ 11. En notant $f(\boldsymbol{x}) = r$, $\forall \boldsymbol{x} \in c$, le volume axisymétrique V_c^{T} pour une maille triangulaire s'écrit

$$\begin{aligned} V_c^{\mathrm{T}} &= 2\,\pi \int_{\hat{c}} \left(f \circ F_c^{\mathrm{T}}\right)(\hat{\boldsymbol{x}})\, |\det \nabla F_c^{\mathrm{T}}|\, d\hat{r}\, d\hat{z} \\ &= 4\,\pi\, A_c^{\mathrm{T}} \int_{\hat{c}} \left(f \circ F_c^{\mathrm{T}}\right)(\hat{\boldsymbol{x}})\, d\hat{r}\, d\hat{z} \end{aligned}$$

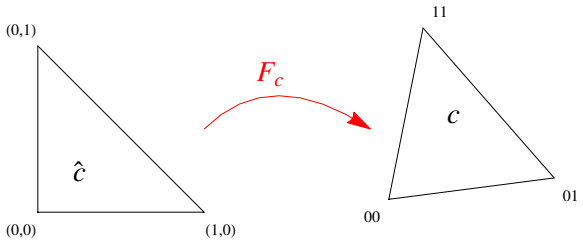


FIGURE C.1 – Transformation inversible F_c faisant passer de la maille triangulaire de référence $\hat{c}$ à une maille triangulaire quelconque c.

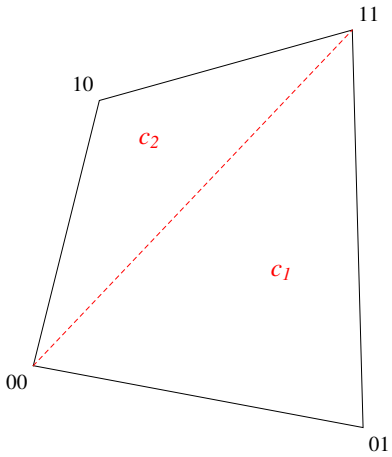


FIGURE C.2 – Vérification du volume axisymétrique V_c pour une maille quadrangulaire c formé des nœuds 00, 01, 11 et 10 : séparation de la maille c en deux triangles nommés c_1, composé des nœuds 00, 01 et 11 ; et c_2 composé des nœuds 00, 11 et 10.

$$
\begin{aligned}
&= 4\,\pi\,A_c^{\mathrm{T}} \int_{\hat{c}} \left[(r_{01}-r_{00})\;\hat{z} + (r_{11}-r_{00})\;\hat{r} + r_{00}\right]\,d\hat{r}\,d\hat{z} \\
&= 4\,\pi\,A_c^{\mathrm{T}} \left[\tfrac{1}{6}\,(r_{00}+r_{01}+r_{11})\right] \\
&= \tfrac{2}{3}\,\pi\,A_c^{\mathrm{T}}\,(r_{00}+r_{01}+r_{11})\,,
\end{aligned}
\tag{C.2}
$$

où

$$
A_c^{\mathrm{T}} = \tfrac{1}{2}\det\left(\boldsymbol{J}_c^{\mathrm{T}}\right) = \tfrac{1}{2}\left[(z_{01}-z_{00})\;(r_{11}-r_{00}) - (z_{11}-z_{00})\;(r_{01}-r_{00})\right], \tag{C.3}
$$

est la surface d'une maille triangulaire quelconque.

On peut à présent vérifier la formule (3.5) en divisant la maille quadrangulaire c en deux triangles : le premier nommé c_1 et formé des nœuds 00, 10 et 11 et le second nommé c_2 et formé des nœuds 00, 11 et 10. Ceci est illustré sur la figure C.2. On obtient ainsi une seconde formule exacte pour le volume V_c d'une maille quadrangulaire qui s'écrit

$$
V_c = V_{c_1}^{\mathrm{T}} + V_{c_2}^{\mathrm{T}} = \underbrace{{}^{2}\!/_{3}\,\pi\,A_{c_1}^{\mathrm{T}}\,(r_{00}+r_{01}+r_{11})}_{\text{volume de } c_1} + \underbrace{{}^{2}\!/_{3}\,\pi\,A_{c_2}^{\mathrm{T}}\,(r_{00}+r_{11}+r_{10})}_{\text{volume de } c_2}, \tag{C.4}
$$

	Formule (3.5)	Triangle c_1	Triangle c_2	Formule (C.4)	Différences
Volume	4.53×10^{-6}	2.57×10^{-6}	1.95×10^{-6}	4.53×10^{-6}	4.23×10^{-21}

TABLE C.1 – Valeurs numériques obtenues, sur le cas test de Noh [154] plan sur maillage initial perturbé [181] à $t = 0.4$, pour la vérification des volumes V_c dans la maille c numérotée 441.

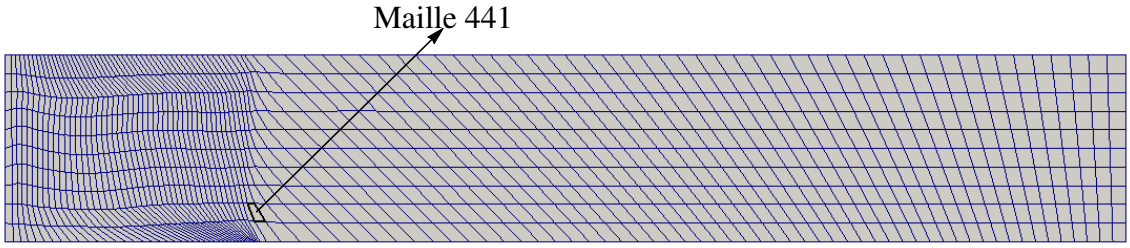


FIGURE C.3 – Maillage correspondant au cas test de Noh [154] plan sur maillage initial perturbé [181] à $t = 0.4$. La position de la maille numérotée 441 sur laquelle on effectue la vérification du volume axisymétrique V_c est indiquée.

et que l'on compare au volume obtenu à partir de la relation (3.5). On effectue cette vérification sur le cas test de Noh [154] plan, présenté dans le Chapitre 5, effectué sur un maillage initial perturbé tiré du cas test de Saltzmann [181]. On laisse tourné le cas jusqu'à $t = 0.4$ afin d'obtenir des mailles déformées dans les deux directions $\boldsymbol{e}_z$ et $\boldsymbol{e}_r$. Dans le tableau C.1, on donne à titre d'exemple les valeurs numériques obtenues sur la maille c numérotée 441 (figure C.3). Les notations dans cette maille corresponde à la figure C.2. La formule (C.4) fournit effectivement des résultats identiques par rapport à l'équation (3.5) en double précision.

C.2 Verification des vecteurs de volume de coin $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$

La première étape consiste à vérifier numériquement les Propositions 3.2 et 3.3. On peut également utiliser une approximation à l'ordre 1 des dérivées par différences finies pour valider la dérivation des volumes V_c. Pour cela, on définit les quantités suivantes

$$\epsilon_{cp}^{\mathrm{V},z} = \frac{\partial V_c}{\partial z_p} - \frac{V_{cp}^{z,\varepsilon} - V_c}{\varepsilon} \text{ et } \epsilon_{cp}^{\mathrm{V},r} = \frac{\partial V_c}{\partial r_p} - \frac{V_{cp}^{r,\varepsilon} - V_c}{\varepsilon}, \tag{C.5}$$

$$\boldsymbol{\iota}_c^{\mathrm{V}} = \sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \text{ et } \boldsymbol{\eta}_p^{\mathrm{V}} = \sum_{c \in C(p)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}, \tag{C.6}$$

où $V_{cp}^{z,\varepsilon}$ (resp. $V_{cp}^{r,\varepsilon}$) est le volume de la maille c après variation de ε de la composante z_p (resp. r_p). Les vecteurs $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ sont déterminés avec les formules (3.15) de la Section 3.2. Les calculs des volumes $V_{cp}^{z,\varepsilon}$ après variation de la composante z_p de la position du nœud $p \in P(c)$ se font avec Mathematica grâce à la substitution $z_p \to z_p + \varepsilon$ dans les formules (3.5) et (3.6). Il faut faire attention à ce que le nœud p corresponde à la bonne numérotation

00, 01, 11 ou 10 dans les expressions (3.16). Les quantités $V_{cp}^{r,\varepsilon}$ sont déterminées avec la substitution $r_p \to r_p + \varepsilon$ de la même manière. À titre d'exemple, les valeurs numériques des quantités définies dans les équations (C.5) et (C.6) sont affichées dans les deux tableaux C.2 (a) et (b) pour la maille c numérotée 441 sur le maillage présenté en figure C.3. Le nœud p choisi est le nœud supérieur droit de c correspondant au nœud noté 11 sur la figure C.2. On rappelle que le maillage de la figure C.3 est obtenu au temps $t = 0.4$ sur le cas test de Noh [154] plan sur maillage initial perturbé [181] : voir le Chapitre 5 pour la présentation du cas test. Le volume V_c a une dépendance linéaire en z mais quadratique en r. Ceci explique pourquoi les approximations d'ordre 1 par différences finies sont exactes pour les dérivées $\frac{\partial V_c}{\partial z_p}$. Dans le tableau C.2(a), les valeurs numériques de la quantité $\epsilon_{cp}^{\mathrm{V},z}$ sont alors nulles à la précision machine, quelle que soit la valeur de ε. En ce qui concerne la dérivée $\frac{\partial V_c}{\partial z_p}$, l'approximation n'est plus exacte et on observe donc une convergence vers 0 en $\mathcal{O}(\varepsilon)$ pour la quantité $\epsilon_{cp}^{\mathrm{V},r}$. On termine par remarquer que les valeurs obtenues dans le tableau C.2(b) valident numériquement les Propositions 3.2 et 3.3.

Une formule plus agréable que celles présentées ici (3.15)-(3.16) peut être dérivée. Elle utilise le fait que la variation de volume d'une maille c due à la variation de position d'un nœud p est égale à la variation de volume du triangle formé des nœuds p, p_+ et p_- où p_+ est le nœud suivant p et p_- le nœud précédent. Cette formule est donc valide pour toute maille polygonale. En géométrie axisymétrique, elle s'écrit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V_c}{\partial z_p} &= \frac{\pi}{3}\left(r_p + r_{p_+} + r_{p_-}\right)\left(r_{p_+} - r_{p_-}\right), \\
\frac{\partial V_c}{\partial r_p} &= \frac{\pi}{3}\left(2\, r_p\left(z_{p_-} - z_{p_+}\right) + r_{p_+}\left(z_p - z_{p_+}\right) + r_{p_-}\left(z_{p_-} - z_p\right)\right).
\end{aligned}$$

Les expressions (3.15)-(3.16) ainsi que les deux relations précédentes étant des formules exactes, elles donnent des résultats identiques à la précision machine dans tous les cas. En particulier, la vérification a été effectuée sur le cas test de Noh plan et la maille c numérotée 441 sur le maillage présenté en figure C.3.

C.3 Vérification des vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$

La première vérification des vecteurs $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ se base sur les Propositions 3.4 et 3.5. Enfin, les approximations d'ordre 1 des dérivées obtenues par différences finies sont une nouvelle fois utilisées pour valider la dérivation des masses de coin m_{cp}. On définit les quantités suivantes

$$\epsilon_{cpq}^{z} = \frac{\partial m_{cq}}{\partial z_p} - \frac{m_{cpq}^{z,\varepsilon} - m_{cq}}{\varepsilon} \text{ et } \epsilon_{cpq}^{r} = \frac{\partial m_{cq}}{\partial r_p} - \frac{m_{cpq}^{r,\varepsilon} - m_{cq}}{\varepsilon}, \tag{C.7}$$

$$\boldsymbol{\iota}_{cp} = \sum_{q \in P(c)} \frac{\partial m_{cp}}{\partial \boldsymbol{x}_q} \text{ et } \boldsymbol{\eta}_{cp} = \sum_{q \in P(c)} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}. \tag{C.8}$$

	$\varepsilon = 0.001$	$\varepsilon = 0.0001$	$\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$
$\epsilon_{cp}^{\mathrm{V},z}$	0	0	5.52×10^{-4}
$\epsilon_{cp}^{\mathrm{V},r}$	1.03×10^{-5}	1.03×10^{-6}	5.76×10^{-4}

(a)

	$\boldsymbol{e}_z$	$\boldsymbol{e}_r$
$\boldsymbol{\iota}_c^{\mathrm{V}}$	1.08×10^{-19}	2.92×10^{-4}
$\boldsymbol{\eta}_p^{\mathrm{V}}$	0	-5.42×10^{-20}

(b)

TABLE C.2 – Valeurs numériques obtenues pour les quantités définies en (C.5) et (C.6) sur le maillage de la figure C.3, où c est la maille numérotée 441 et p est son nœud supérieur droit : (a) valeurs numériques pour la vérification par différences finies pour deux valeurs de ε et valeurs de la variation de volume $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$; et (b) valeurs numériques pour la vérification des Propositions 3.2 et 3.3.

	$\varepsilon = 0.001$	$\varepsilon = 0.0001$	$\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$
ϵ_{cpq}^{z}	7.94×10^{-1}	7.22×10^{-2}	7.15
ϵ_{cpq}^{r}	8.65×10^{-1}	7.86×10^{-2}	5.13

(a)

	$\boldsymbol{e}_z$	$\boldsymbol{e}_r$
$\boldsymbol{\iota}_{cp}$	0	-1.61×10^{-5}
$\boldsymbol{\eta}_{cp}$	0	2.71×10^{-20}

(b)

TABLE C.3 – Valeurs numériques obtenues pour les quantités définies en (C.7) et (C.8) sur le maillage de la figure C.3, où c est la maille numérotée 441, p est son nœud supérieur droit et q est le nœud opposé à p dans la maille : (a) valeurs numériques pour la vérification par différences finies pour deux valeurs de ε et valeur de la variation de masse $\frac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$; et (b) valeurs numériques pour la vérification des Propositions 3.4 et 3.5.

Dans les définitions de ϵ_{cpq}^{z} et ϵ_{cpq}^{r}, les vecteurs $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ sont calculés à partir des formules (3.21) et (3.22). La masse $m_{cpq}^{z,\varepsilon}$ (resp. $m_{cpq}^{r,\varepsilon}$) désigne la masse de coin m_{cq} après variation de ε de la position z_p (resp. de la position r_p) du nœud $p \in P(c)$. Les calculs se font avec Mathematica *via* les substitutions $z_p \to z_p + \varepsilon$ et $r_p \to r_p + \varepsilon$ dans les formules (3.21) et (3.22). Un exemple pour la maille c numérotée 441 (voir figure C.3) et où les nœuds p et q désignent respectivement le nœud supérieur droit de c et le nœud opposé à p est donné dans les tableaux C.3(a) et C.3(b). Dans la figure C.2, p est le nœud 11 et q est le nœud 00. La position de la maille considérée et le maillage sont représentés dans la figure C.3. Dans le tableau C.3(a), on observe effectivement une convergence des erreurs vers 0 en $\mathcal{O}(\varepsilon)$. De plus, les valeurs numériques observées dans le tableau C.3(b) confirment les résultats des Propositions 3.4 et 3.5.

C.4 Vérification des hypothèses de consistance pour le schéma VNM

C.4.1 Approximation du volume de coin V_{cp}^{M} au premier ordre

On démontre un résultat intermédiaire avant de s'attaquer à la Proposition 3.6.

Résultat intermédiaire. *Sur maillage régulier, on a*

$$V_{cp}^{M} - \tfrac{1}{4} V_c = A_{cp}^{M} \times \mathcal{O}(\Delta r) = V_{cp}^{M} \times \mathcal{O}(\Delta r/r). \tag{C.9}$$

On commence par préciser l'hypothèse de maillage régulier. Le centre de masse 2D plan des volumes V_p^{M} et $\cup_{c\in P(c)} V_c$ sont confondus et correspondent à $\boldsymbol{x}_p$ sur un maillage parfaitement régulier. De plus, sur un maillage quadrangulaire parfaitement cartésien, on a également que $A_{cp}^{\mathrm{M}} = \frac{1}{4} A_c$ où A est la surface obtenu par intégration avec la mesure $dA = dr\, dz$. Le changement de variable affine suivant

$$\begin{aligned} f_{cp} : A_{cp}^{\mathrm{M}} &\to A_c \\ \boldsymbol{x} &\to \hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}_p + 2\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p\right), \end{aligned}$$

de determinant $J = \det(\nabla f_{cp}) = 4$, permet d'envoyer A_{cp}^{M} sur A_c. L'hypothèse d'une régularité suffisante du maillage s'écrit sous la forme $|A_c - f_{cp}(A_{cp}^{\mathrm{M}})| = A_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2)$. La relation (C.9) se déduit directement de l'hypothèse de régularité du maillage en géométrie plane. Concernant la géométrie axisymétrique, on obtient

$$\begin{aligned} V_{cp}^{\mathrm{M}} &= \int_{A_{cp}^{\mathrm{M}}} r\, dr\, dz \\ &= \int_{A_c} \left[\tfrac{1}{2}\left(r_p - \hat{r}\right) + \hat{r}\right] J^{-1}\, d\hat{r}\, d\hat{z} + A_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ &= \tfrac{1}{4} V_c + \tfrac{1}{4} \int_{A_c} \tfrac{1}{2}\left(r_p - \hat{r}\right) d\hat{r}\, d\hat{z} + A_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ &= \tfrac{1}{4} V_c + A_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta r) \\ &= \tfrac{1}{4} V_c + V_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta r/r). \end{aligned}$$

L'intégration est effectuée avec la mesure $dA = dr\, dz$ et la composante radiale r venant du volume infinitésimal 3D $dV = 2\,\pi\, r\, dr\, dz$ est incluse dans l'intégrande.

C.4.2 Vérification des hypothèses de consistance

On rappelle le résultat que l'on souhaite démontrer ici

Résultat à démontrer. *Sous des conditions de régularités du maillage, les hypothèses de consistance* (2.75a)-(2.75b)-(2.75c) *sont vérifiées pour la masse nodale* m_p *construite en Sous-Section 3.3.1 en géométrie axisymétrique et en géométrie plane.*

On considère uniquement la géométrie axisymétrique. Le résultat en géométrie plane se démontre de la même manière. En particulier, le terme en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ dans l'hypothèse (2.75c) est absent en géométrie plane. La densité et la vitesse sont supposées suffisamment régulières.

Vérification de l'hypothèse (2.75a) D'après la sous-section précédente et l'équation (C.9), nous avons au premier ordre $\frac{V_{cp}}{V_c} = \frac{1}{4}$ ce qui donne en première approximation $m_p \approx \sum_{c\in C(p)} \frac{m_c}{4}$. L'hypothèse (2.75a) est alors une conséquence directe de l'égalité (2.45) de consistance du schéma de type « Wilkins ».

Vérification de l'hypothèse (2.75b) Par construction, la masse nodale s'écrit $m_{cp} = \frac{2}{3}\frac{V_{cp}}{V_c}m_c + \frac{1}{3}\frac{m_c}{4}$: Remarque 3.1. Sa variation en temps est donc gouvernée par la variation en temps du rapport $\frac{V_{cp}}{V_c}$ qui se calcule explicitement par

$$\begin{aligned}
\tfrac{d}{dt}\tfrac{V_{cp}}{V_c} &= \tfrac{V_{cp}}{V_c}\left(\tfrac{1}{V_{cp}}\tfrac{d}{dt}V_{cp} - \tfrac{1}{V_c}\tfrac{d}{dt}V_c\right)\\
&= \tfrac{V_{cp}}{V_c}\left(\tfrac{1}{V_{cp}}\int_{V_{cp}} \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}\, dV - \tfrac{1}{V_c}\int_{V_c} \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}\, dV\right)\\
&= \tfrac{V_{cp}}{V_c}\left((\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_{cp} - (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_c\right)
\end{aligned}$$

où $(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_{cp}$ (respectivement $(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_c$) dénote la moyenne de $(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})$ sur A_{cp} (respectivement A_c) pour la mesure $r\,drdz$. L'écart entre ces valeurs moyennes est donné au premier ordre par le produit du gradient de $(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})$ par l'écart entre les barycentres des domaines ce qui donne $[(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_{cp} - (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_c] = \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})\cdot\mathcal{O}(\Delta x)$. Après report on en déduit

$$\tfrac{d}{dt}m_{pc} = \tfrac{2}{3}\tfrac{V_{cp}}{V_c}\, m_c\,[(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_{cp} - (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})_c] = m_c \times \mathcal{O}(\Delta x)$$

puis par intégration en temps $m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n} = m_c \times \mathcal{O}(\Delta t) \times \mathcal{O}(\Delta x)$, ce qui démontre l'hypothèse (2.75b) par sommation en c.

Vérification de l'hypothèse (2.75c) On regarde séparément les dérivées en z et les dérivées en r sous la définition $m_{cp} = \frac{1}{3}\frac{m_c}{4} + \frac{2}{3}\frac{V_{cp}}{V_c}\, m_c$ de la Sous-Section 3.3.1. On considère un nœud p entouré des quatre mailles quadrangulaires c_i, $i = 1,...,4$: voir la figure C.4. Bien que cette figure présente des mailles carrées par simplicité, le maillage est ici supposé structuré avec : (i) les lignes axiales près de l'axe $r = 0$ parallèles à l'axe $r = 0$, soit la coordonnée r_q est indépendante de la coordonnée z_q si $r_q = \mathcal{O}(\Delta r)$; (ii) les lignes axiales

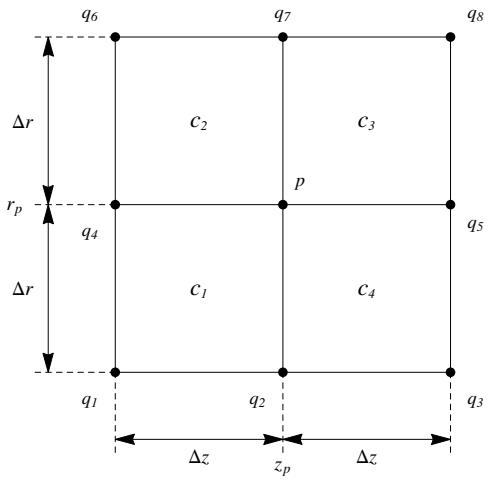


FIGURE C.4 – Notations utilisées sur un maillage cartésien pour la démonstration de l'hypothèse (2.75c)

localement parallèles de pas Δz ; et (iii) les lignes radiales localement parallèles de pas Δr. En s'aidant des calculs effectués dans l'Annexe C.4.3, on a

$$\sum_{q\in P(c_3)} \frac{\partial}{\partial z_p}\left(\frac{2V_{cq}}{3V_c}m_c\right)\boldsymbol{u}_q^2 = \rho_{c_3}\frac{\Delta r}{3}\left(\frac{r_{c_3}}{8}-\frac{\Delta r^2}{96\,r_{c_3}}\right)\left(\boldsymbol{u}_{q_8}^2-\boldsymbol{u}_{q_5}^2+\boldsymbol{u}_{q_7}^2-\boldsymbol{u}_p^2\right)$$
$$= 2\,\rho_{c_3}\frac{\Delta r}{3}\Delta\eta\left(\frac{r_{c_3}}{8}-\frac{\Delta r^2}{96\,r_c}\right)\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial\eta}+\mathcal{O}(\Delta\eta\,\frac{\partial^2\boldsymbol{u}^2}{\partial\eta^2})\right).$$

Ici η correspond à la direction des lignes de maillage à z constant. En sommant avec la cellule c_2, de même composante radiale $r_{c_3} = r_{c_2}$, les termes au premier ordre vont s'annuler du fait du changement de signe des dérivées $\frac{\partial}{\partial z_p}$ entre ces deux mailles, ce qui donne

$$\sum_{q\in P(c_3)\cup P(c_2)} \frac{\partial}{\partial z_p}\left(\frac{2V_{cq}}{3V_c}m_c\right)\boldsymbol{u}_q^2 = 2\,\frac{\Delta r}{3}\,\Delta\eta\,\Delta z\left(\frac{r_{c_2}}{8}-\frac{\Delta r^2}{96\,r_{c_2}}\right)\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho\,\frac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial\eta}\right)$$
$$+\,2\,\rho_{c_2}\frac{\Delta r}{2}\Delta\eta\left(\frac{r_{c_2}}{8}-\frac{\Delta r^2}{96\,r_{c_2}}\right)\times\mathcal{O}(\Delta\eta\,\frac{\partial^2\boldsymbol{u}^2}{\partial\eta^2}).$$

On trouverait un résultat similaire sur les sommations sur les cellules $c_1\cup c_4$ ce qui démontre l'hypothèse (2.75c) en z sachant que $m_p = \mathcal{O}(\rho\, r\,\Delta z\,\Delta r)$. Il n'y a pas d'erreur en $\frac{\Delta r}{r}$ sur ce terme. Pour les dérivées en r un calcul similaire donne

$$\sum_{q\in P(c_3)} \frac{\partial}{\partial r_p}\left(\frac{2V_{cq}}{3V_c}m_c\right)\boldsymbol{u}_q^2 = \rho_{c_3}\frac{\Delta z}{3}\frac{r_{c_3}}{8}\left(\boldsymbol{u}_{q_8}^2-\boldsymbol{u}_{q_7}^2+\boldsymbol{u}_{q_5}^2-\boldsymbol{u}_p^2\right)$$
$$+\,\rho_{c_3}\frac{\Delta z}{3}\frac{\Delta r}{16}\left(3\,\boldsymbol{u}_p^2-\boldsymbol{u}_{q_5}^2-\boldsymbol{u}_{q_7}^2-\boldsymbol{u}_{q_8}^2\right)$$
$$-\,\rho_{c_3}\frac{\Delta z}{3}\frac{\Delta r^2}{32\,r_{c_3}}\left(\boldsymbol{u}_{q_8}^2-\boldsymbol{u}_{q_5}^2+\boldsymbol{u}_{q_7}^2-\boldsymbol{u}_p^2\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= 2\,\rho_{c_3}\tfrac{\Delta z}{3}\Delta z\tfrac{r_{c_3}}{8}\left(\tfrac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial z}+\mathcal{O}(\Delta z\,\tfrac{\partial^2 \boldsymbol{u}^2}{\partial z^2})\right)\\
&\quad-\rho_{c_3}\tfrac{\Delta z}{3}\tfrac{\Delta r}{16}(2\,\Delta z\,\tfrac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial z}+2\,\Delta\eta\,\tfrac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial \eta}+\mathcal{O}(\Delta x^2\,\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{u}^2))\\
&\quad-2\rho_{c_3}\tfrac{\Delta z}{3}\,\Delta\eta\,\tfrac{\Delta r^2}{32\,r_{c_3}}(\tfrac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial \eta}+\mathcal{O}(\Delta\eta\,\tfrac{\partial^2 \boldsymbol{u}^2}{\partial \eta^2})).
\end{aligned}
$$

Les termes du premier ordre en $\Delta z\frac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial z}$ vont s'annuler par sommation avec la cellule c_2 car ils s'inversent par changement de cellule ne laissant que des termes en $V_c\,\frac{\Delta z}{\Delta r}\,\Delta z\times\mathcal{O}\left(\frac{\partial}{\partial z}(\rho\frac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial z})+\frac{\partial^2 \boldsymbol{u}^2}{\partial z^2}\right)$. Les termes du premier ordre en $\Delta\eta\frac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial \eta}$ ont un terme dominant en $m_c\frac{\partial \boldsymbol{u}^2}{\partial \eta}\frac{\Delta r}{r_c}$. Ceci finit de démontrer l'hypothèse (2.75c) en r.

C.4.3 Calcul explicite des variations de masse sur maillage régulier

On reprend les notations utilisées dans l'annexe précédente et on rappelle que la maillage est 2D structuré avec : (i) les lignes axiales près de l'axe $r=0$ parallèles à l'axe $r=0$, soit la coordonnée r_q est indépendante de la coordonnée z_q si $r_q=\mathcal{O}(\Delta r)$; (ii) les lignes axiales localement parallèles de pas Δz ; et (iii) les lignes radiales localement parallèles de pas Δr. On considère la cellule c_3 avec $r_{c_3}=r_p+\frac{\Delta r}{2}$. Un calcul explicite nous donne alors

$$
\begin{aligned}
&V_{c_3}=2\,\pi\,r_{c_3}\,\Delta r\,\Delta z,\\
&\tfrac{\partial V_{c_3}}{\partial z_p}=-\tfrac{\Delta r}{2}(r_{c_3}-\tfrac{\Delta r}{6}),\\
&\tfrac{\partial V_{c_3}}{\partial r_p}=-\tfrac{\Delta z}{2}(r_{c_3}-\tfrac{\Delta r}{2}),\\
&\tfrac{V_{c_3p}}{V_{c_3}}=\tfrac{V_{c_3q_5}}{V_{c_3}}=\tfrac{1}{4}(1-\tfrac{\Delta r}{4\,r_{c_3}}),\\
&\tfrac{V_{c_3q_7}}{V_{c_3}}=\tfrac{V_{c_3q_8}}{V_{c_3}}=\tfrac{1}{4}(1+\tfrac{\Delta r}{4\,r_{c_3}}),\\
&V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_3p}}{V_{c_3}}\right)=V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_3q_5}}{V_{c_3}}\right)=\tfrac{\Delta r}{2}(-\tfrac{r_{c_3}}{8}+\tfrac{\Delta r^2}{96\,r_{c_3}}),\\
&V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_3q_7}}{V_{c_3}}\right)=V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_3q_8}}{V_{c_3}}\right)=\tfrac{\Delta r}{2}(\tfrac{r_{c_3}}{8}-\tfrac{\Delta r^2}{96\,r_{c_3}}),\\
&V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_3p}}{V_{c_3}}\right)=\tfrac{\Delta z}{2}(-\tfrac{r_{c_3}}{8}+\tfrac{3\Delta r}{16}+\tfrac{\Delta r^2}{32\,r_{c_3}}),\\
&V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_3q_5}}{V_{c_3}}\right)=\tfrac{\Delta z}{2}(\tfrac{r_{c_3}}{8}-\tfrac{\Delta r}{16}+\tfrac{\Delta r^2}{32\,r_{c_3}}),\\
&V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_3q_7}}{V_{c_3}}\right)=\tfrac{\Delta z}{2}(-\tfrac{r_{c_3}}{8}-\tfrac{\Delta r}{16}-\tfrac{\Delta r^2}{32\,r_{c_3}}),\\
&V_{c_3}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_3q_8}}{V_{c_3}}\right)=\tfrac{\Delta z}{2}(\tfrac{r_{c_3}}{8}-\tfrac{\Delta r}{16}-\tfrac{\Delta r^2}{32\,r_{c_3}}).
\end{aligned}
$$

Pour la cellule c_4, on a de manière similaire avec $r_{c_4}=r_p-\frac{\Delta r}{2}$

$$
V_{c_4}=2\,\pi\,r_{c_4}\,\Delta r\,\Delta z,
$$

$$
\begin{aligned}
&\tfrac{\partial V_{c_4}}{\partial z_p} = -\tfrac{\Delta r}{2}(r_{c_4} + \tfrac{\Delta r}{6}),\\
&\tfrac{\partial V_{c_4}}{\partial r_p} = -\tfrac{\Delta z}{2}(r_{c_4} + \tfrac{\Delta r}{2}),\\
&\tfrac{V_{c_4 p}}{V_{c_4}} = \tfrac{V_{c_4 q_5}}{V_{c_4}} = \tfrac{1}{4}(1 + \tfrac{\Delta r}{4\, r_{c_4}}),\\
&\tfrac{V_{c_4 q_2}}{V_{c_4}} = \tfrac{V_{c_4 q_3}}{V_{c_4}} = \tfrac{1}{4}(1 - \tfrac{\Delta r}{4\, r_{c_4}}),\\
&V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_4 p}}{V_{c_4}}\right) = V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_4 q_5}}{V_{c_4}}\right) = \tfrac{\Delta r}{2}(-\tfrac{r_{c_4}}{8} + \tfrac{\Delta r^2}{96\, r_{c_4}}),\\
&V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_4 q_2}}{V_{c_4}}\right) = V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial z_p}\left(\tfrac{V_{c_4 q_3}}{V_{c_4}}\right) = \tfrac{\Delta r}{2}(\tfrac{r_{c_4}}{8} - \tfrac{\Delta r^2}{96\, r_{c_4}}),\\
&V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_4 p}}{V_{c_4}}\right) = \tfrac{\Delta z}{2}(-\tfrac{r_{c_4}}{8} - \tfrac{3\Delta r}{16} + \tfrac{\Delta r^2}{32\, r_{c_4}}),\\
&V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_4 q_5}}{V_{c_4}}\right) = \tfrac{\Delta z}{2}(\tfrac{r_{c_4}}{8} + \tfrac{\Delta r}{16} + \tfrac{\Delta r^2}{32\, r_{c_4}}),\\
&V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_4 q_2}}{V_{c_4}}\right) = \tfrac{\Delta z}{2}(-\tfrac{r_{c_4}}{8} + \tfrac{\Delta r}{16} - \tfrac{\Delta r^2}{32\, r_{c_4}}),\\
&V_{c_4}\tfrac{\partial}{\partial r_p}\left(\tfrac{V_{c_4 q_3}}{V_{c_4}}\right) = \tfrac{\Delta z}{2}(\tfrac{r_{c_4}}{8} + \tfrac{\Delta r}{16} - \tfrac{\Delta r^2}{32\, r_{c_4}}).
\end{aligned}
$$

Pour les cellules c_2 ou c_1, par rapport aux calculs ci-dessus, il faut juste changer le signe des dérivées en z. Bien sûr, les nœuds q_5, q_3 et q_8 sont remplacés par leurs symétriques suivant la verticale, autrement dit $q_5 \to q_4$, $q_3 \to q_1$ et $q_8 \to q_6$.

C.5 Expressions des forces pour un mouvement purement axial

On souhaite démontrer le résultat de la Proposition 3.7 de la Sous-Section 3.7.2 que l'on rappelle

Résultat à démontrer. *Sous les hypothèses* (3.26)*, les forces de pression et de pseudo-viscosité s'expriment*

$$
\begin{aligned}
&\sum_{c\in C(p)} (p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{e}_r = 0,\\
&\sum_{c\in C(p)} (p_c^n + q_c^n)\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^n \cdot \boldsymbol{e}_z = 2\,\pi\,\Delta r\,(p_1^n + q_1^n - p_2^n - q_2^n)\; r_p,
\end{aligned}
$$

pour tout nœud p intérieur au domaine.

Les notations sont définies dans la figure C.5. Pour simplifier, les indices en temps sont volontairement omis dans cette démonstration. On souhaite d'abord montrer que la composante suivant $\boldsymbol{e}_r$ est nulle. Pour cela, on fait varier la position du nœud p de $\delta_r\,\boldsymbol{e}_r$: voir figure C.6. La quantité δ_r est prise positive. Le volume dû à la variation de position du nœud p est en fait le même pour les mailles c_1 et c_2 : il correspond à la quantité notée

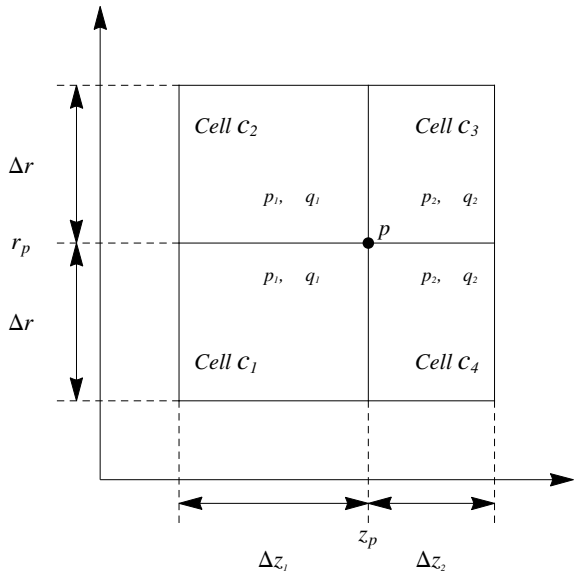


FIGURE C.5 – Notations utilisées pour la démonstration effectuée dans la Section C.5.

$\delta V_1^{\text{radiale}}$ dans la figure C.6. Il faut le retirer au volume V_{c_1} pour la maille c_1 tandis qu'il faut l'ajouter au volume déjà existant V_{c_2} pour la maille c_2 et le volume $V_{c_1} + V_{c_2}$ est donc indépendant de la position radiale du nœud p. Il en est de même pour les mailles c_3 et c_4 : volume $\delta V_2^{\text{radiale}}$ dans la figure C.6. Le volume $V_{c_3} + V_{c_4}$ est également indépendant de la coordonnée r_p. On a donc

$$\begin{aligned}\sum_{c\in C(p)} (p_c + q_c)\, \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_r &= (p_1 + q_1)\, \tfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} (V_{c_1} + V_{c_2}) \cdot \boldsymbol{e}_r + (p_2 + q_2)\, \tfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} (V_{c_3} + V_{c_4}) \cdot \boldsymbol{e}_r \\ &= 0.\end{aligned}$$

A présent, on calcule analytiquement les forces de pression et de pseudo-viscosité s'exerçant sur le nœud p, sous les hypothèses (3.26), s'écrivant

$$\sum_{c\in C(p)} (p_c + q_c)\, \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p},$$

pour tout nœud p intérieur au domaine. On considère alors une variation axiale de position de nœud p que l'on note $\delta_z\, \boldsymbol{e}_z$: voir figure C.7. On commence par exprimer les deux volumes $\delta V_1^{\text{axiale}}$ et $\delta V_2^{\text{axiale}}$ intervenant dans la figure C.7 :

$$\delta V_1^{\text{axiale}} = 2\,\pi \int_{r_p-\Delta r}^{r_p} \int_{z_p}^{\frac{\delta z}{\Delta r}\, r + z_p + \delta z - \frac{r_p\, \delta z}{\Delta r}} r\, dz\, dr = \tfrac{1}{3}\,\pi\, \delta z\, \Delta r\, (3\, r_p - \Delta r) \qquad \text{(C.10a)}$$

$$\delta V_2^{\text{axiale}} = 2\,\pi \int_{r_p}^{r_p+\Delta r} \int_{z_p}^{-\frac{\delta z}{\Delta r}\, r + z_p + \delta z + \frac{r_p\, \delta z}{\Delta r}} r\, dz\, dr = \tfrac{1}{3}\,\pi\, \delta z\, \Delta r\, (3\, r_p + \Delta r) \qquad \text{(C.10b)}$$

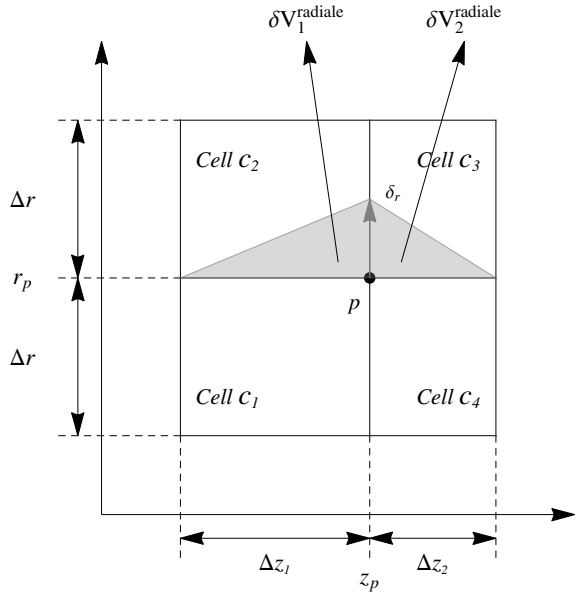


FIGURE C.6 – Mailles cartésiennes partageant un nœud p et volumes $\delta V_i^{\text{radiale}}$ engendrés par une variation radiale de δr du nœud p. Les volumes $V_{c_1} + V_{c_2}$ ainsi que $V_{c_3} + V_{c_4}$ sont indépendants de la position radiale du nœud p.

ce qui nous permet d'obtenir, pour un nœud p intérieur au domaine, l'expression de la composante axiale des forces de pression et de pseudo-viscosité

$$\begin{aligned}
\sum_{c\in C(p)} (p_c+q_c)\,\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot\boldsymbol{e}_z = {} & (p_1+q_1)\,\frac{\partial V_{c_1}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot\boldsymbol{e}_z + (p_1+q_1)\,\frac{\partial V_{c_2}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot\boldsymbol{e}_z \\
& + (p_2+q_2)\,\frac{\partial V_{c_3}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot\boldsymbol{e}_z + (p_2+q_2)\,\frac{\partial V_{c_4}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot\boldsymbol{e}_z \\
= {} & \underbrace{(p_1+q_1)\,\lim_{\delta z\to 0}\frac{\delta V_1^{\text{axiale}}}{\delta z}}_{\text{maille } c_1} + \underbrace{(p_1+q_1)\,\lim_{\delta z\to 0}\frac{\delta V_2^{\text{axiale}}}{\delta z}}_{\text{maille } c_2} \\
& - \underbrace{(p_2+q_2)\,\lim_{\delta z\to 0}\frac{\delta V_2^{\text{axiale}}}{\delta z}}_{\text{maille } c_3} - \underbrace{(p_2+q_2)\,\lim_{\delta z\to 0}\frac{\delta V_1^{\text{axiale}}}{\delta z}}_{\text{maille } c_4} \\
= {} & 2\,\pi\,\Delta r\,(p_1+q_1-p_2-q_2)\,r_p.
\end{aligned}$$

C.6 Expressions des masses nodales pour un mouvement purement axial

Le résultat de la Proposition 3.8 à démontrer dans cette Section est le suivant

Résultat à démontrer. *Sous les hypothèses (3.26), les deux masses nodales associées aux volumes de contrôle V_p^M et V_p de la Définition 3.4 s'écrivent*

$$m_p^{M,n+1/2} = m_p^{n+1/2} = \pi\,\Delta r\left(\rho_1^{n+1/2}\,\Delta z_1^{n+1/2} + \rho_2^{n+1/2}\,\Delta z_2^{n+1/2}\right) r_p,$$

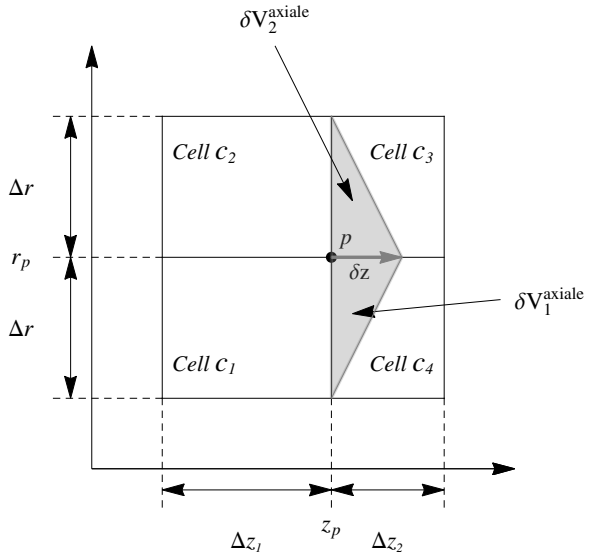


FIGURE C.7 – Mailles cartésiennes partageant un nœud p. La variation de position axiale de δz du nœud p engendre des variations de volume notées $\delta V_1^{\text{axiale}}$ et $\delta V_2^{\text{axiale}}$ correspondants aux deux zones colorées en gris.

pour tout nœud p intérieur au domaine.

Ici, on souhaite donc calculer analytiquement les masses nodales que l'on exprime en fonction des notations de la figure C.8(a). Les indices en temps sont omis pour faciliter la lisibilité. On commence par le calcul des volumes V_{cp}^{M} (voir figure C.8(b))

$$V_{c_1p}^{\text{M}} = 2\,\pi \int_{z_p-\frac{\Delta z_1}{2}}^{z_p} \int_{r_p-\frac{\Delta r}{2}}^{r_p} r\,dr\,dz = \tfrac{1}{8}\,\Delta z_1\,\pi\,(4\,r_p - \Delta r)\,\Delta r, \tag{C.11a}$$

$$V_{c_2p}^{\text{M}} = 2\,\pi \int_{z_p-\frac{\Delta z_1}{2}}^{z_p} \int_{r_p}^{r_p+\frac{\Delta r}{2}} r\,dr\,dz = \tfrac{1}{8}\,\Delta z_1\,\pi\,(4\,r_p + \Delta r)\,\Delta r, \tag{C.11b}$$

$$V_{c_3p}^{\text{M}} = 2\,\pi \int_{z_p}^{z_p+\frac{\Delta z_2}{2}} \int_{r_p}^{r_p+\frac{\Delta r}{2}} r\,dr\,dz = \tfrac{1}{8}\,\Delta z_2\,\pi\,(4\,r_p + \Delta r)\,\Delta r, \tag{C.11c}$$

$$V_{c_4p}^{\text{M}} = 2\,\pi \int_{z_p}^{z_p+\frac{\Delta z_2}{2}} \int_{r_p-\frac{\Delta r}{2}}^{r_p} r\,dr\,dz = \tfrac{1}{8}\,\Delta z_2\,\pi\,(4\,r_p - \Delta r)\,\Delta r. \tag{C.11d}$$

On obtient la masse nodale m_p^{M} sous nos hypothèses :

$$\begin{aligned} m_p^{\text{M}} &= \sum_{c\in C(p)} \frac{V_{cp}^{\text{M}}}{V_c} m_c \\ &= \sum_{c\in C(p)} \rho_c V_{cp}^{\text{M}} \\ &= \rho_1 V_{c_1p}^{\text{M}} + \rho_1 V_{c_2p}^{\text{M}} + \rho_2 V_{c_3p}^{\text{M}} + \rho_2 V_{c_4p}^{\text{M}} \end{aligned}$$

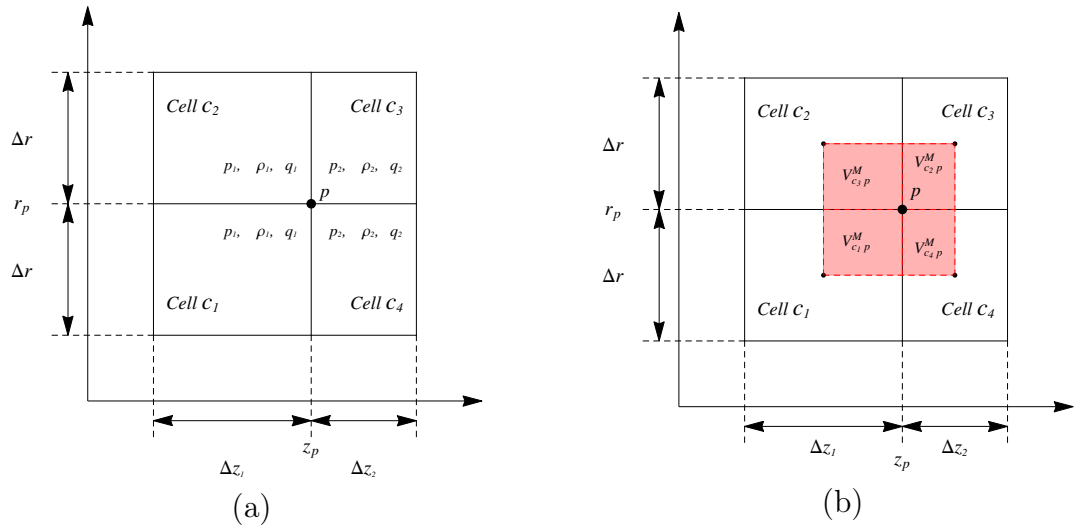


FIGURE C.8 – Nœud p intérieur au domaine et mailles communes à ce nœud sur un maillage cartésien : (a) Notations utilisées pour la démonstration de la Section C.6 ; et (b) volumes de contrôle V^{M}_{cp}, définis par les médianes, associés au nœud p pour chaque maille commune (zone colorée en rouge).

$$
\begin{aligned}
&= \underbrace{\Delta z_1\, \pi\, \Delta r\, \rho_1\, r_p}_{\rho_1\left(V^{\mathrm{M}}_{c_1 p}+V^{\mathrm{M}}_{c_2 p}\right)} + \underbrace{\Delta z_2\, \pi\, \Delta r\, \rho_2\, r_p}_{\rho_2\left(V^{\mathrm{M}}_{c_3 p}+V^{\mathrm{M}}_{c_4 p}\right)} \\
&= \pi\, \Delta r\, (\rho_1\, \Delta z_1 + \rho_2\, \Delta z_2)\; r_p.
\end{aligned}
$$

On termine par le calcul de la masse nodale m_p. On a besoin des volumes des mailles c_1, c_2, c_3 et c_4 qui s'écrivent de la manière suivante :

$$V_{c_1} = 2\,\pi \int_{z_p-\Delta z_1}^{z_p} \int_{r_p-\Delta r}^{r_p} r\, dr\, dz = \pi\, \Delta z_1\, (2\, r_p - \Delta r)\, \Delta r, \tag{C.12a}$$

$$V_{c_2} = 2\,\pi \int_{z_p-\Delta z_1}^{z_p} \int_{r_p}^{r_p+\Delta r} r\, dr\, dz = \pi\, \Delta z_1\, (2\, r_p + \Delta r)\, \Delta r, \tag{C.12b}$$

$$V_{c_3} = 2\,\pi \int_{z_p}^{z_p+\Delta z_2} \int_{r_p}^{r_p+\Delta r} r\, dr\, dz = \pi\, \Delta z_2\, (2\, r_p + \Delta r)\, \Delta r, \tag{C.12c}$$

$$V_{c_4} = 2\,\pi \int_{z_p}^{z_p+\Delta z_2} \int_{r_p-\Delta r}^{r_p} r\, dr\, dz = \pi\, \Delta z_2\, (2\, r_p - \Delta r)\, \Delta r. \tag{C.12d}$$

On a alors

$$
\begin{aligned}
m_p &= \sum_{c \in C(p)} \frac{V_{cp}}{V_c} m_c \\
&= \sum_{c \in C(p)} \frac{2}{3} \frac{V^{\mathrm{M}}_{cp}}{V_c} m_c + \sum_{c \in C(p)} \frac{1}{12} m_c
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \tfrac{2}{3}\, m_p^{\mathrm{M}} + \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{12} m_c \\
&= \tfrac{2}{3}\,\pi\,\Delta r\,(\rho_1\,\Delta z_1 + \rho_2\,\Delta z_2)\; r_p + \tfrac{1}{12}\,(\rho_1\,V_{c_1} + \rho_1\,V_{c_2} + \rho_2\,V_{c_3} + \rho_2\,V_{c_4}) \\
&= \tfrac{2}{3}\,\pi\,\Delta r\,(\rho_1\,\Delta z_1 + \rho_2\,\Delta z_2)\; r_p + \tfrac{1}{12}\left(\underbrace{4\rho_1\,\pi\,\Delta z_1\,\Delta r\,r_p}_{\rho_1\left(V_{c_1}+V_{c_2}\right)} + \underbrace{4\rho_2\,\pi\,\Delta z_2\,\Delta r\,r_p}_{\rho_2\left(V_{c_3}+V_{c_4}\right)}\right) \\
&= \tfrac{2}{3}\,\pi\,\Delta r\,(\rho_1\,\Delta z_1 + \rho_2\,\Delta z_2)\; r_p + \tfrac{1}{3}\pi\,\Delta r\,(\rho_1\,\Delta z_1 + \rho_2\,\Delta z_2)\; r_p \\
&= \pi\,\Delta r\,(\rho_1\,\Delta z_1 + \rho_2\,\Delta z_2)\; r_p.
\end{aligned}
$$

Cette dernière égalité conclut la démonstration.

C.7 Expression des flux de quantité de mouvement pour un mouvement purement axial

La résultat que l'on souhaite démontré ici est le suivant

Résultat à démontrer. *Sous les hypothèses* (3.26)*, le terme de flux de quantité de mouvement pour les deux masses nodales m_p^M et m_p s'exprime*

$$
\sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q^M}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} = \sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} = \mathbf{0},
$$

pour tout nœud p intérieur au domaine.

On réécrit tout d'abord ce terme de flux de quantité de mouvement sous la forme

$$
\sum_{q\in Q(p)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_q^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} = \sum_{c\in C(p)} \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2}. \tag{C.13}
$$

Les notations sont introduites dans la figure C.9. Les composantes axiales de la vitesse prédite $\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2}$, $\forall q \in Q(p)$, sont notées respectivement u_1 pour les nœuds q en $z_p - \Delta z_1$, u_2 pour les nœuds q en z_p et u_3 pour les nœuds q en $z_p + \Delta z_2$. Le processus de prédiction respecte l'absence de mouvement radial et l'uniformité donc cette vitesse prédite est bien également uniforme. Comme dans les démonstrations précédentes, les indices en temps sont supprimés pour plus de lisibilité.

On commence par la composante axiale du terme (C.13). On suppose que l'on considère la maille c_1 où le nœud p est le nœud supérieur droit dans la maille. Les autres nœuds de c_1 sont notés p_-, p_{o} et p_+ dans l'ordre trigonométrique suivant p. Dans le schéma VNM,

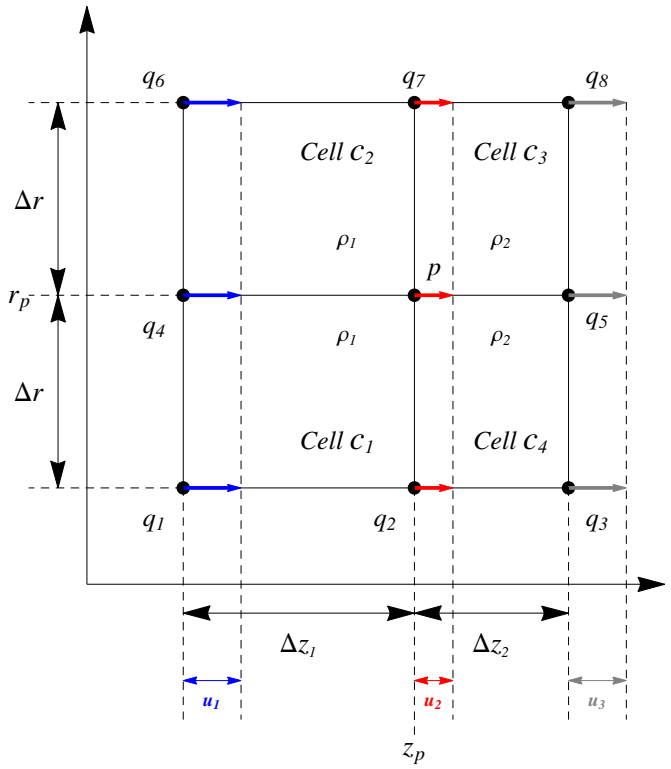


FIGURE C.9 – Notations utilisées pour la démonstration effectuée dans la Section C.7. On affiche la densité (indépendante de r), la numérotation des mailles $c \in C(p)$ et les composantes axiales de la vitesse prédite $\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2}$, $\forall q \in Q(p)$, notées respectivement u_1 pour les nœuds q en $z_p - \Delta z_1$, u_2 pour les nœuds q en z_p et u_3 pour les nœuds q en $z_p + \Delta z_2$.

les masses nodales sont définies grâce à un rapport de volume (cf Définition 2.10)

$$m_p = \sum_{c \in C(p)} m_{cp} \text{ où } m_{cp} = \frac{V_{cp}}{V_c}\, m_c.$$

On fait alors varier de $\delta z\, \boldsymbol{e}_z$ où $\delta z > 0$ la position du nœud p et on regarde comment le rapport des volumes $\frac{V_{cq}^{\mathrm{M}}}{V_c}$ varient en conséquence pour tout $q \in P(c_1)$. En utilisant le fait que la vitesse prédite est uniforme dans la direction radiale, la partie du terme (C.13) correspondant à la maille c_1 devient

$$\sum_{q \in P(c_1)} \tfrac{1}{2} (\boldsymbol{u}_q)^2 \frac{\partial m_{c_1 q}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z = \underbrace{\tfrac{1}{2}\, u_1^2\, m_{c_1}\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_{c_1 p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}} + V_{c_1 p_-}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_z}_{q = p_- \text{ et } q = p_{\mathrm{o}}}$$
$$+ \underbrace{\tfrac{1}{2}\, u_2^2\, m_{c_1}\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_{c_1 p_+}^{\mathrm{M}} + V_{c_1 p}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_z}_{q = p \text{ et } q = p_+}. \quad \text{(C.14)}$$

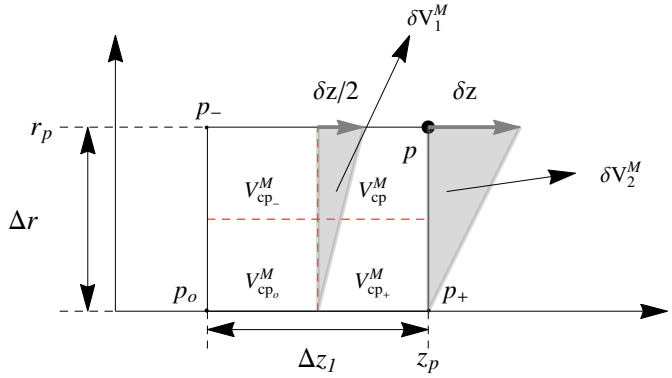


FIGURE C.10 – Variations de volumes (zones grisées), notées δV_i^{M}, causées par la variation axiale de position du nœud p dans la maille c_1. Les pointillés rouges permettent de distinguer les quatre volumes de contrôle V_{c1q}^{M} avant variation de la position du nœud p.

En pratique, on étudie donc seulement la variation des deux rapports $\frac{V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}}$ et $\frac{V_{c1p_+}^{\mathrm{M}}+V_{c1p}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}}$. Les volumes δV_1^{M} et δV_2^{M} que l'on introduit dans la figure C.10 permettent d'exprimer simplement ces deux rapports après variation axiale de la position du nœud p :

$$\frac{V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}}+\delta V_1^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}+\delta V_2^{\mathrm{M}}} \text{ est la valeur de } \frac{V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}} \text{ et,}$$
$$\frac{V_{c1p}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_+}^{\mathrm{M}}+\delta V_2^{\mathrm{M}}-\delta V_1^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}+\delta V_2^{\mathrm{M}}} \text{ est la valeur de } \frac{V_{c1p_+}^{\mathrm{M}}+V_{c1p}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}},$$

après variation axiale de la position du nœud p. Les quatre volumes de contrôle définis par les médianes définissent une partition du volume de la maille c_1 et $V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}} = V_{c1p}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_+}^{\mathrm{M}}$ d'où

$$\frac{V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}} = \frac{V_{c1p_+}^{\mathrm{M}}+V_{c1p}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}} = \tfrac{1}{2}. \tag{C.15}$$

De plus, le calcul des variations de volume δV_1^{M} et δV_2^{M} donne

$$\delta V_1^{\mathrm{M}} = 2\,\pi \int_{r_p-\Delta r}^{r_p} \int_{z_p-\frac{\Delta z_1}{2}}^{\frac{\delta z}{2\,\Delta r}\,r+\frac{1}{2}\left(2\,z_p+\delta z-\Delta z_1-\frac{r_p\,\delta z}{\Delta r}\right)} r\,dz\,dr = \tfrac{1}{6}\pi\,(3r_p-\Delta r)\,\Delta r\,\delta z,$$
$$\delta V_2^{\mathrm{M}} = 2\,\pi \int_{r_p-\Delta r}^{r_p} \int_{z_p}^{\frac{\delta z}{\Delta r}\,r+z_p+\delta z-\frac{r_p\,\delta z}{\Delta r}} r\,dz\,dr = \tfrac{1}{3}\pi\,(3r_p-\Delta r)\,\Delta r\,\delta z,$$

soit

$$\delta V_2^{\mathrm{M}} = 2\,\delta V_1^{\mathrm{M}}. \tag{C.16}$$

En mettant en commun les équations (C.15) et (C.16), on peut écrire

$$\frac{V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}}+\delta V_1^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}+\delta V_2^{\mathrm{M}}} = \frac{\frac{1}{2}\,V_{c_1}+\frac{1}{2}\delta V_2^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}+\delta V_2^{\mathrm{M}}} = \frac{1}{2} = \frac{V_{c1p_{\mathrm{o}}}^{\mathrm{M}}+V_{c1p_-}^{\mathrm{M}}}{V_{c_1}},$$

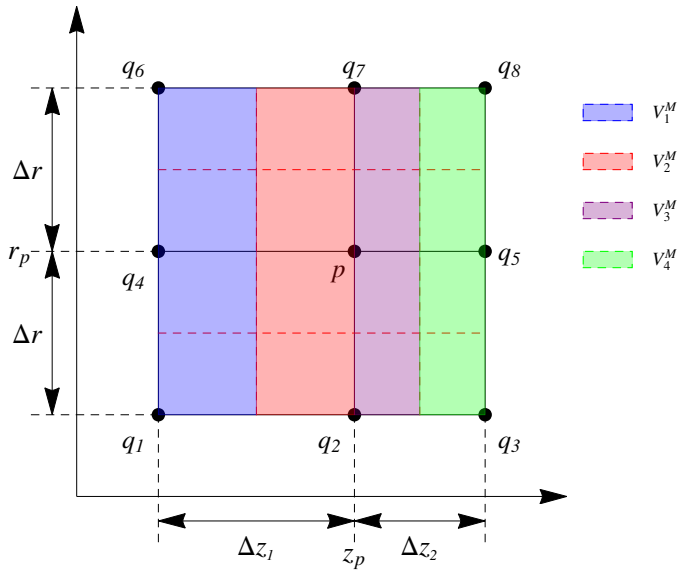


FIGURE C.11 – Définitions des volumes de chaque tranche radiale lorsque les volumes de contrôle sont définis par les médianes.

$$\frac{V^{\mathrm{M}}_{c_1 p}+V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_+}+\delta V^{\mathrm{M}}_2-\delta V^{\mathrm{M}}_1}{V_{c_1}+\delta V^{\mathrm{M}}_2} = \frac{\frac{1}{2}V_{c_1}+\delta V^{\mathrm{M}}_2-\frac{1}{2}\delta V^{\mathrm{M}}_2}{V_{c_1}+\delta V^{\mathrm{M}}_2} = \frac{1}{2} = \frac{V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_+}+V^{\mathrm{M}}_{c_1 p}}{V_{c_1}}.$$

Ces deux dernières égalités montrent que les deux rapports $\frac{V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_{\mathrm{o}}}+V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_-}}{V_{c_1}}$ et $\frac{V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_+}+V^{\mathrm{M}}_{c_1 p}}{V_{c_1}}$ sont insensibles à une variation axiale de position du nœud p. On obtient alors

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p}\left(\frac{V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_{\mathrm{o}}}+V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_-}}{V_{c_1}}\right)\cdot \boldsymbol{e}_z = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p}\left(\frac{V^{\mathrm{M}}_{c_1 p_+}+V^{\mathrm{M}}_{c_1 p}}{V_{c_1}}\right)\cdot \boldsymbol{e}_z = 0,$$

ce qui permet de conclure que

$$\sum_{q\in P(c_1)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q)^2 \frac{\partial m^{\mathrm{M}}_{c_1 q}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \tag{C.17}$$

lorsqu'on réécrit ce dernier terme suivant l'équation (C.14). Ce raisonnement peut être utilisé afin d'arriver à la même conclusion pour les autres mailles c_2, c_3 et c_4 : il suffit de changer la position du nœud p dans la maille et de refaire ces calculs. Dans le terme de flux de quantité de mouvement (C.13), c'est donc la somme $\sum_{q\in P(c)} \frac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q)^2 \frac{\partial m^{\mathrm{M}}_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot \boldsymbol{e}_z$ qui s'annule pour toutes les mailles autour de p lorsque les masses de coin sont définies grâce aux médianes

On considère à présent la composante radiale du terme de flux de quantité de mouvement (C.13). Pour montrer que cette composante radiale est effectivement nulle, il ne suffit pas d'étudier seulement le terme $\sum_{q\in P(c)} \frac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q)^2 \frac{\partial m^{\mathrm{M}}_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot \boldsymbol{e}_r$ pour chacune des mailles $c \in C(p)$ comme on a pu le faire pour la composante axiale. Toujours en utilisant l'indépendance radiale de la vitesse prédite, on procède alors à un autre réarrangement que celui proposé

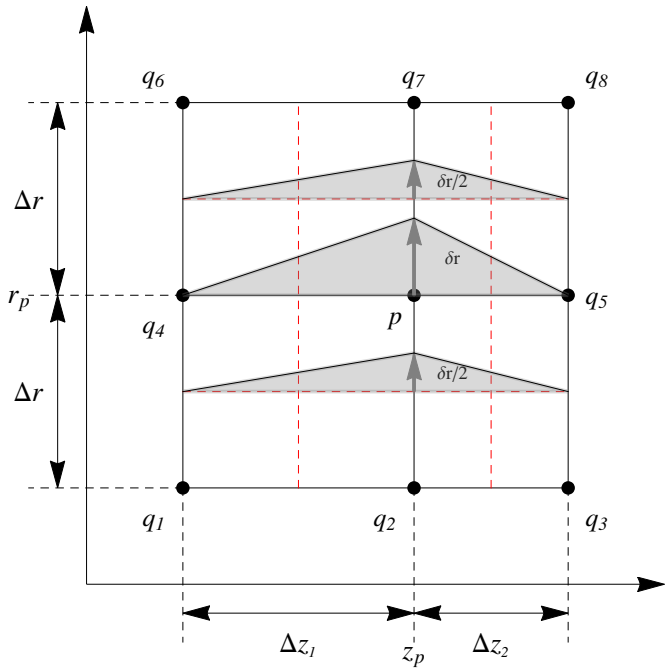


FIGURE C.12 – Zones grisées désignant les variations des volumes de contrôle définis par les médianes causées par la variation de la position du nœud p de $\delta r\, \boldsymbol{e}_r$. Les pointillés rouges délimitent ces volumes de contrôle avant modification de la position du nœud p. Les volumes V_1^{M}, V_2^{M}, V_3^{M} et V_4^{M} sont insensibles à la position radiale du nœud p.

dans l'équation (C.13). On introduit dans ce but les quatre volumes V_1^{M}, V_2^{M}, V_3^{M} et V_4^{M} représentés dans la figure C.11. Ces volumes s'expriment très simplement en fonction des volumes de contrôle

$$
\begin{aligned}
V_1^{\mathrm{M}} &= V_{c_1 q_1}^{\mathrm{M}} + V_{c_1 q_4}^{\mathrm{M}} + V_{c_2 q_4}^{\mathrm{M}} + V_{c_2 q_6}^{\mathrm{M}},\\
V_2^{\mathrm{M}} &= V_{c_1 q_2}^{\mathrm{M}} + V_{c_1 p}^{\mathrm{M}} + V_{c_2 p}^{\mathrm{M}} + V_{c_2 q_7}^{\mathrm{M}},\\
V_3^{\mathrm{M}} &= V_{c_4 q_2}^{\mathrm{M}} + V_{c_4 p}^{\mathrm{M}} + V_{c_3 p}^{\mathrm{M}} + V_{c_4 q_7}^{\mathrm{M}},\\
V_4^{\mathrm{M}} &= V_{c_4 q_3}^{\mathrm{M}} + V_{c_4 q_5}^{\mathrm{M}} + V_{c_3 q_5}^{\mathrm{M}} + V_{c_3 q_8}^{\mathrm{M}}.
\end{aligned}
$$

Dans le terme de flux de quantité de mouvement, on regroupe à présent les nœuds de $Q(p)$ ayant la même composante axiale ce qui donne

$$
\begin{aligned}
\sum_{c\in C(p)} \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q)^2 \tfrac{\partial m_{c_1 q}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\cdot \boldsymbol{e}_r = {} & \underbrace{\tfrac{1}{2}\, u_1^2\, \tfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p}\left(\rho_1\, V_1^{\mathrm{M}}\right)\cdot \boldsymbol{e}_r}_{q=q_1,\, q=q_4 \text{ et } q=q_6} + \underbrace{\tfrac{1}{2}\, u_2^2\, \tfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p}\left(\rho_1\, V_2^{\mathrm{M}}\right)\cdot \boldsymbol{e}_r}_{q=q_2,\, q=p \text{ et } q=q_7 \text{ (mailles } c_1 \text{ et } c_2)} \\
& + \underbrace{\tfrac{1}{2}\, u_2^2\, \tfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p}\left(\rho_2\, V_3^{\mathrm{M}}\right)\cdot \boldsymbol{e}_r}_{q=q_2,\, q=p \text{ et } q=q_7 \text{ (mailles } c_3 \text{ et } c_4)} + \underbrace{\tfrac{1}{2}\, u_3^2\, \tfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p}\left(\rho_2\, V_4^{\mathrm{M}}\right)\cdot \boldsymbol{e}_r}_{q=q_3,\, q=q_5 \text{ et } q=q_8}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
= \tfrac{1}{2}\, u_1^2\, (m_{c_1} + m_{c_2})\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_1^{\mathrm{M}}}{V_1^{\mathrm{M}}+V_2^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r \\
+ \tfrac{1}{2}\, u_2^2\, (m_{c_1} + m_{c_2})\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_2^{\mathrm{M}}}{V_1^{\mathrm{M}}+V_2^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r \\
+ \tfrac{1}{2}\, u_2^2\, (m_{c_3} + m_{c_4})\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_3^{\mathrm{M}}}{V_3^{\mathrm{M}}+V_4^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r \\
+ \tfrac{1}{2}\, u_3^2\, (m_{c_3} + m_{c_4})\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_4^{\mathrm{M}}}{V_3^{\mathrm{M}}+V_4^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r,
\end{aligned}
$$

après avoir exprimé les deux densités uniformes ρ_1 et ρ_2 par

$$
\rho_1 = \frac{m_{c_1}+m_{c_2}}{V_1^{\mathrm{M}}+V_2^{\mathrm{M}}} \text{ et } \rho_2 = \frac{m_{c_3}+m_{c_4}}{V_3^{\mathrm{M}}+V_4^{\mathrm{M}}}.
$$

Si on fait varier la position du nœud p de $\delta r\, \boldsymbol{e}_r$ comme indiqué sur la figure C.12, on voit que les quatre volumes V_1^{M}, V_2^{M}, V_3^{M} et V_4^{M} restent inchangés. On peut donc en conclure que

$$
\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_1^{\mathrm{M}}}{V_1^{\mathrm{M}}+V_2^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_2^{\mathrm{M}}}{V_1^{\mathrm{M}}+V_2^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_3^{\mathrm{M}}}{V_3^{\mathrm{M}}+V_4^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_p} \left(\frac{V_4^{\mathrm{M}}}{V_3^{\mathrm{M}}+V_4^{\mathrm{M}}} \right) \cdot \boldsymbol{e}_r = 0,
$$

ce qui prouve

$$
\sum_{c \in C(p)} \sum_{q \in P(c)} \tfrac{1}{2} (\boldsymbol{u}_q)^2 \frac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_r = 0.
$$

Enfin, on a $\frac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \frac{2}{3} \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ ce qui permet de conclure directement que

$$
\sum_{c \in C(p)} \sum_{q \in P(c)} \tfrac{1}{2} (\boldsymbol{u}_q)^2 \frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p} = \boldsymbol{0}.
$$

C.8 Expression de la divergence discrète de la vitesse pour un mouvement purement axial

Les notations utilisées dans cette démonstration sont rappelées dans la figure C.13. De façon arbitraire, on choisit que le nœud p est le nœud supérieur droit dans la maille c. Les indices en temps sont omis dans la démonstration. Le résultat que l'on souhaite démontrer ici est le suivant

Résultat à démontrer. *Sous les hypothèses* (3.26)*, la divergence discrète d'une vitesse quelconque* $\boldsymbol{u}_p$*, de composante radiale nulle et de composante axiale indépendante de* r*, s'écrit*

$$
\frac{1}{V_c} \sum_{p \in P(c)} \frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{u}_p = \frac{1}{\Delta z} \left(u_{z_2} - u_{z_1} \right).
$$

La relation (3.36) *est valide quelque soit le temps où le volume* V_c*, les vecteurs* $\frac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ *et la vitesse* $\boldsymbol{u}_p$ *sont définis.*

Le volume a déjà été exprimé de nombreuses fois dans les démonstrations, on a

$$V_c = 2\,\pi \int_{z_p-\Delta z}^{z_p} \int_{r_p-\Delta r}^{r_p} r\,dr\,dz = \pi\,(2\,r_p - \Delta r)\,\Delta r \Delta z.$$

Il reste à expliciter les variations de volume pour tous les nœuds de la maille c. Des calculs similaires ont également déjà été effectués dans l'Annexe C.5 : expressions des variations de volume $\delta V_i^{\text{axiale}}$ introduit dans la figure C.7. On a

$$\begin{aligned}
\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z &= \tfrac{1}{3}\pi\,(3r_p - \Delta r)\,\Delta r,\\
\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_{p_+}} \cdot \boldsymbol{e}_z &= \tfrac{1}{3}\pi\,(3r_p - 2\,\Delta r)\,\Delta r,\\
\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_{p_-}} \cdot \boldsymbol{e}_z &= -\tfrac{1}{3}\pi\,(3r_p - \Delta r)\,\Delta r\\
\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_{p_\mathrm{o}}} \cdot \boldsymbol{e}_z &= -\tfrac{1}{3}\pi\,(3r_p - 2\,\Delta r)\,\Delta r.
\end{aligned}$$

On peut écrire à présent

$$\begin{aligned}
\sum_{p\in P(c)} \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{u}_p &= u_{z_1}\left(\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_{p_-}} \cdot \boldsymbol{e}_z + \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_{p_\mathrm{o}}} \cdot \boldsymbol{e}_z\right) + u_{z_2}\left(\tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_{p_+}} \cdot \boldsymbol{e}_z + \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{e}_z\right)\\
&= -u_{z_1}\,\pi\,(2\,r_p - \Delta r)\,\Delta r + u_{z_2}\,\pi\,(2\,r_p - \Delta r)\,\Delta r\\
&= \pi\,(2\,r_p - \Delta r)\,\Delta r\,(u_{z_2} - u_{z_1}),
\end{aligned}$$

On obtient finalement l'égalité voulue

$$\tfrac{1}{V_c} \sum_{p\in P(c)} \tfrac{\partial V_c}{\partial \boldsymbol{x}_p} \cdot \boldsymbol{u}_p = \tfrac{1}{\Delta z}\,(u_{z_2} - u_{z_1}),$$

concluant la preuve.

C.9 Expression des termes masses variables de l'énergie interne pour un mouvement purement axial

On souhaite démontrer le résultat suivant

Résultat à démontrer. *Sous les hypothèses (3.26), les termes venants des masses*

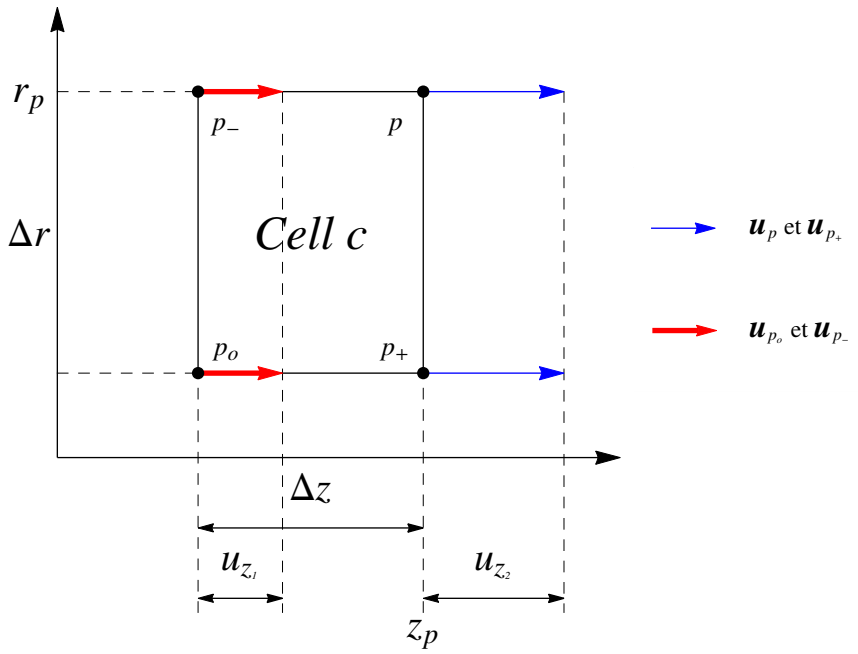


FIGURE C.13 – Notations utilisées dans la démonstration de la Section C.8. Le nœud p est le nœud supérieur droit dans la maille c.

variables dans l'équation d'énergie interne du schéma VNM sont nuls soit

$$\sum_{p\in P(c)} \Big\{ - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{n-1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n-1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n-1/2} - \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{8}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{\varphi,n+1/2} \cdot (\boldsymbol{u}_p^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_p^{n-1/2})\, \Delta t^{n+1/2} + \tfrac{1}{2}(m_{cp}^{\varphi,n+1/2} - m_{cp}^{\varphi,n-1/2})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} \Big\} = 0,$$

quelque soit la définition des masses nodales considérée.

On omet ici l'indice matériau φ et la démonstration est valide quelque soit le matériau considéré. On rappelle que l'on suppose que les composantes radiales des vitesses sont nulles et donc seules les composantes des vecteurs de masse de coin $\frac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}$ interviennent ici. Dans les démonstrations de la Proposition 3.9 on a montré que

$$\sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}^{\mathrm{M}}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{e}_z = \sum_{q\in P(c)} \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}_q^{*n+1/2})^2 \tfrac{\partial m_{cq}}{\partial \boldsymbol{x}_p}\Big|^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0, \forall c \in C(p),$$

Il suffit maintenant de prouver que

$$\tfrac{1}{2}(m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2})\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2} \cdot \boldsymbol{u}_p^{n-1/2} = 0, \forall p \in P(c),$$

où les masses nodales sont données dans la Définition 2.10 par

$$m_p = \sum_{c \in C(p)} m_{cp} \text{ où } m_{cp} = \frac{V_{cp}}{V_c} m_c.$$

Sous les hypothèses (3.26), les rapports de volume $V_{cp}^{\mathrm{M}} / V_c$ et V_{cp} / V_c sont inchangés puisqu'ils ne dépendent que de r_p et Δr : voir Section C.6. On obtient

$$m_{cp}^{n+1/2} - m_{cp}^{n-1/2} = 0, \forall p \in P(c), \forall c,$$

et le preuve est terminée.

Annexe D

Démonstration des résultats du Chapitre 6

D.1 Analyse de l'erreur due au transfert de masse

On souhaite ici démontrer des résultats intermédiaires pour la Proposition 6.4. Les notations de la Section 6.3 correspondante sont reprises et on ne considère donc que des quantités définies au demi-instant $t^{n+1/2}$. C'est pourquoi l'exposant temporel est omis. En géométrie axisymétrique, l'intégration est parfois effectuée avec la mesure $dA = dr\,dz$ et la composante radiale r venant du volume infinitésimal 3D $dV = 2\,\pi\,r\,dr\,dz$ est incluse dans l'intégrande.

D.1.1 Approximation du volume V_p^{M} au premier ordre

Résultat intermédiaire. *Sur un maillage suffisamment régulier, on a*

$$V_p^M - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4}\,V_c = V_p^M \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \tag{D.1}$$

en géométrie axisymétrique. En géométrie plane, l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$.

On reprend l'hypothèse de régularité du maillage expliquée en Section C.4 Annexe C. Elle implique que

$$\frac{1}{A_p^{\mathrm{M}}}\int_{A_p^{\mathrm{M}}} \boldsymbol{x}\,dr\,dz = \frac{1}{\sum_{c\in P(c)}\,\frac{1}{4}\,A_c}\sum_{c\in P(c)}\,\frac{1}{4}\int_{A_c}\boldsymbol{x}\,dr\,dz + \mathcal{O}(\Delta x^2) = \boldsymbol{x}_p + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

$$A_{cp}^{\mathrm{M}} - \tfrac{1}{4}A_c = A_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2).$$

La première hypothèse signifie que $\boldsymbol{x}_p$ est le centre de masse de A_p^{M} et $\sum_{c\in P(c)}\,\frac{1}{4}\,A_c$ à

l'ordre 2. Le résultat découle donc directement de l'hypothèse d'un maillage suffisamment régulier en géométrie plane. Concernant la géométrie axisymétrique, on écrit

$$\begin{aligned} V_p^{\mathrm{M}} - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} V_c &= \int_{V_p^{\mathrm{M}}} r\, dr\, dz - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} \int_{V_c} r\, dr\, dz \\ &= \int_{A_p^{\mathrm{M}}} \left[(r-r_p)+r_p\right] dr\, dz - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} \int_{A_c} \left[(r-r_p)+r_p\right] dr\, dz \\ &= \int_{A_p^{\mathrm{M}}} (r-r_p)\, dr\, dz - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} \int_{A_c} (r-r_p)\, dr\, dz + r_p \left(A_p^{\mathrm{M}} - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} A_c \right) \\ &= A_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2) + r_p\, A_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2), \end{aligned}$$

car $\boldsymbol{x}_p$ est le centre de masse de A_p^{M} et $\sum_{c\in C(p)} \frac{1}{4} A_c$ à l'ordre 2 et $\sum_{c\in C(p)} \frac{1}{4} A_c = A_p^{\mathrm{M}} + A_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2)$ par hypothèse de régularité. Finalement, on a

$$V_p^{\mathrm{M}} - \sum_{c\in C(p)} \tfrac{1}{4} V_c = V_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).$$

On rappelle ici la relation (C.9), démontrée en Section C.4, qui sera utile à plusieurs reprise pour conclure sur l'erreur due au transfert de masse. On a

$$V_{cp}^{\mathrm{M}} - \tfrac{1}{4}\, V_c = V_{cp}^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta r/r),$$

en géométrie axisymétrique et l'erreur est à l'ordre 2 en géométrie plane.

D.1.2 Écart entre les volumes $V_p^{\mathbf{D}}$ et $V_p^{\mathbf{M}}$

Résultat intermédiaire. *Sur un maillage suffisamment régulier, on a*

$$V_p^D - V_p^M = V_p^D \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \tag{D.2}$$

en géométrie axisymétrique. En géométrie plane, l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$.

On commence par dire quelques mots sur l'hypothèse de régularité du maillage. Il suffit de reprendre le raisonnement de l'Annexe D.1.1 précédente mais avec les volumes V_p^{D} et V_p^{M}. Tout d'abord, on remarque que le centre de masse 2D plan (définissant le volume V_p^{D}) et le point d'intersection des médianes (définissant le volume V_p^{M}) d'une maille sont confondus sur un maillage régulier. On suppose alors que le maillage est suffisamment régulier pour que ces deux points soient proches et correspondent à la position $\boldsymbol{x}_p$ du nœud

p. On a ainsi par hypothèse

$$\frac{1}{A_p^{\mathrm{D}}}\int_{A_p^{\mathrm{D}}} \boldsymbol{x}\, dr\, dz = \frac{1}{A_p^{\mathrm{M}}}\int_{A_p^{\mathrm{M}}} \boldsymbol{x}\, dr\, dz + \mathcal{O}(\Delta x^2) = \boldsymbol{x}_p + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
$$A_p^{\mathrm{D}} - A_p^{\mathrm{M}} = A_p^{\mathrm{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2),$$

où A est la surface obtenue par intégration avec la mesure $dA = dr\, dz$. Le résultat en géométrie plane est donc obtenu avec l'hypothèse d'un maillage suffisamment régulier. Concernant la géométrie axisymétrique, on écrit

$$\begin{aligned}
V_p^{\mathrm{D}} - V_p^{\mathrm{M}} &= \int_{V_p^{\mathrm{D}}} r\, dr\, dz - \int_{V_p^{\mathrm{M}}} r\, dr\, dz \\
&= \int_{A_p^{\mathrm{D}}} \left[(r - r_p) + r_p\right]\, dr\, dz - \int_{A_p^{\mathrm{M}}} \left[(r - r_p) + r_p\right]\, dr\, dz \\
&= \int_{A_p^{\mathrm{D}}} (r - r_p)\, dr\, dz - \int_{A_p^{\mathrm{M}}} (r - r_p)\, dr\, dz + r_p \left(A_p^{\mathrm{D}} - A_p^{\mathrm{D}}\right) \\
&= A_p^{\mathrm{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2) + r_p\, A_p^{\mathrm{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2), \text{ par hypothèse de régulatité,} \\
&= V_p^{\mathrm{D}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).
\end{aligned}$$

D.1.3 Consistance de la densité nodale ρ_p

Toutes les quantités intervenants dans cette Section D.1.3 sont définies sur le maillage lagrangien, l'exposant Old est donc omis afin d'alléger les équations.

Résultat intermédiaire. *Sur un maillage suffisamment régulier, en notant ρ le champ de densité continu, on a*

$$\tilde{\rho}_p(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x}) + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r), \quad \forall \boldsymbol{x} \in V_p^D, \tag{D.3}$$

en géométrie axisymétrique. En géométrie plane, l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$.

On rappelle tout d'abord que

$$\tilde{\rho}_p(\boldsymbol{x}) = \rho_p + (\nabla\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{x}}_p)\,,$$

où $\hat{\boldsymbol{x}}_p$ est le centre de masse de V_p^{D}. Sachant que le gradient de densité $(\nabla\rho)_p$ est une approximation à l'ordre un du gradient du champ de densité continu en $\boldsymbol{x}_p$, il suffit de montrer que

$$\rho_p = \frac{m_p}{V_p^{\mathrm{D}}} = \rho(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),$$

en géométrie axisymétrique. Pour cela, on réécrit la densité nodale sous la forme

$$\rho_p = \tfrac{2}{3}\tfrac{1}{V_p^{\mathrm{D}}} \sum_{c\in C(p)} \rho_c\, V_{cp}^{\mathrm{M}} + \tfrac{1}{3}\tfrac{1}{V_p^{\mathrm{D}}} \sum_{c\in C(p)} \rho_c\, \tfrac{V_c}{4}.$$

On réalise le développement limité

$$\rho_c = \rho(\boldsymbol{x}_c) + \mathcal{O}(\Delta x^2) = \rho(\boldsymbol{x}_p) + (\nabla\rho)_p \cdot (\boldsymbol{x}_c - \boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

puis on l'injecte dans l'expression de ρ_p

$$\begin{aligned}\rho_p = \tfrac{1}{V_p^{\mathrm{D}}} \sum_{c\in C(p)} \left(\tfrac{2}{3}\, V_{cp}^{\mathrm{M}} + \tfrac{1}{3}\,\tfrac{V_c}{4}\right) \rho(\boldsymbol{x}_p) \\ + \tfrac{2}{3}\tfrac{1}{V_p^{\mathrm{D}}}\, (\nabla\rho)_p \cdot \sum_{c\in C(p)} (\boldsymbol{x}_c - \boldsymbol{x}_p)\, V_{cp}^{\mathrm{M}} \\ + \tfrac{1}{3}\tfrac{1}{V_p^{\mathrm{D}}}\, (\nabla\rho)_p \cdot \sum_{c\in C(p)} (\boldsymbol{x}_c - \boldsymbol{x}_p)\, \tfrac{V_c}{4} + \mathcal{O}(\Delta x^2).\end{aligned}$$

En géométrie axisymétrique, sous l'hypothèse d'un maillage suffisamment régulier autour du nœud p, autrement dit

$$\begin{aligned}\sum_{c\in C(p)} (\boldsymbol{x}_c - \boldsymbol{x}_p)\, V_{cp}^{\mathrm{M}} &= V_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r) \\ \sum_{c\in C(p)} (\boldsymbol{x}_c - \boldsymbol{x}_p)\, \tfrac{V_c}{4} &= V_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),\end{aligned}$$

on obtient

$$\rho_p = \tfrac{1}{V_p^{\mathrm{D}}} \sum_{c\in C(p)} \left(\tfrac{2}{3}\, V_{cp}^{\mathrm{M}} + \tfrac{1}{3}\,\tfrac{V_c}{4}\right) \rho(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).$$

Finalement, les relations (C.9) et (D.2) permettent d'écrire

$$\begin{aligned}\sum_{c\in C(p)} \left(\tfrac{2}{3}\, V_{cp}^{\mathrm{M}} + \tfrac{1}{3}\,\tfrac{V_c}{4}\right) &= V_p^{\mathrm{M}} + V_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r) \\ &= V_p^{\mathrm{D}} + V_p^{\mathrm{M}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).\end{aligned}$$

Donc, on a

$$\rho_p = \rho(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),$$

ce qui conclut le preuve de ce troisième résultat intermédiaire pour la géométrie axisymétrique.

En géométrie plane, l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ est remplacée par un terme en $\mathcal{O}(\Delta x)$ dans

chacune des relations de cette preuve. Donc l'équation précédente devient

$$\rho_p = \rho(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x^2).$$

D.2 Cohérence thermodynamique de la correction en énergie interne

On rappelle le résultat à démontrer

Résultat à démontrer. *Sur maillage régulier, dans le cas de la correction « VE » de la Définition 6.9, la correction en énergie interne $\delta e_c^{\varphi,New}$ vérifie*

$$\begin{aligned}
&\delta e_c^{\varphi,New} \geq 0 \text{ partout : second principe,}\\
&\delta e_c^{\varphi,New} = \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r) \text{ dans les zones isentropiques,}
\end{aligned}$$

en géométrie axisymétrique, quelque soit le matériau φ. En géométrie plane, le résultat reste vrai mais le terme d'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ dans la relation (6.47b) est remplacé par $\mathcal{O}(\Delta x)$.

Grâce à la définition de λ_p pour la correction « VE », équation (6.41), on écrit

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 &= \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\mathrm{New}}\, \lambda_p^2 \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2\\
&= \min\left(V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} , \tfrac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2\right).
\end{aligned}$$

On obtient donc que

$$V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \geq 0,$$

ce qui montre (6.47a) sachant que

$$\begin{aligned}
\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}} &= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \tfrac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\, m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\}\\
&= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \tfrac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} \left\{ V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Concernant (6.47b), le cas où $\frac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 = V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\frac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}}$ est évident puisque $\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}} = 0$. Il reste à traiter le cas où $\frac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 = \frac{1}{2}\, m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2$ ce qui revient à

étudier la différence $V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\frac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \frac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2$ vu que

$$\begin{aligned}
\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}} &= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\} \\
&= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} \left\{ V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\} \\
&= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p\in P(c)} \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} \left\{ V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Sous forme intégrale, on écrit

$$V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 = \sum_{p'} \int_{p^{\mathrm{New}}\cap(p')^{\mathrm{Old}}} \left[\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\tilde{\boldsymbol{u}}^2\right)_{p'}^{\mathrm{Old}} - \tfrac{1}{2}\,\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right] dV.$$

En notant ρ, $\left(\frac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)$ et $\boldsymbol{u}^2$ les champs continus de densité, d'énergie cinétique et du carré de vitesse, on a, par définition des développements et de la projection,

$$\begin{aligned}
&\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\tilde{\boldsymbol{u}}^2\right)_{p'}^{\mathrm{Old}}(\boldsymbol{x}) = \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)(\boldsymbol{x}) + \mathcal{O}(\Delta x^2),\ \forall \boldsymbol{x} \in p^{\mathrm{New}} \cap (p')^{\mathrm{Old}}, \\
&\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}}(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x}) + \mathcal{O}(\Delta x^2),\ \forall \boldsymbol{x} \in p^{\mathrm{New}} \cap (p')^{\mathrm{Old}}, \\
&\left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 = \boldsymbol{u}^2(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x^2).
\end{aligned}$$

On obtient donc

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 &= \tfrac{1}{2}\,\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}}\,\boldsymbol{u}^2(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\
&= \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)(\boldsymbol{x}) \\
&\quad + \tfrac{1}{2}\,\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}} \left(\nabla \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x^2),\ \forall \boldsymbol{x} \in p^{\mathrm{New}} \cap (p')^{\mathrm{Old}}.
\end{aligned}$$

Sur maillage régulier, le nœud p est proche du centre de masse de la maille duale p^{New} en géométrie plane (voir le raisonnement des Sections D.1.1 et D.1.2). On remarque également que $\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}} = \rho(\boldsymbol{x}_p) + \mathcal{O}(\Delta x),\ \forall \boldsymbol{x} \in p^{\mathrm{New}} \cap (p')^{\mathrm{Old}}$. L'intégrale du terme d'ordre 1 dans la relation précédente est alors à l'ordre du schéma sur un maillage suffisamment régulier, soit

$$\sum_{p'} \int_{p^{\mathrm{New}}\cap(p')^{\mathrm{Old}}} \tfrac{1}{2}\,\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}} \left(\nabla \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p)\, dV = V_p^{\mathrm{D,New}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),$$

en géométrie axisymétrique. Finalement, on peut écrire

$$V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 = \sum_{p'} \int_{p^{\mathrm{New}}\cap(p')^{\mathrm{Old}}} \left[\left(\tfrac{1}{2}\rho\,\tilde{\boldsymbol{u}}^2\right)_{p'}^{\mathrm{Old}} - \tfrac{1}{2}\,\tilde{\rho}_{p'}^{\mathrm{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right] dV$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{p'} \int_{p^{\mathrm{New}} \cap (p')^{\mathrm{Old}}} \left[\left(\tfrac{1}{2} \rho \, \tilde{\boldsymbol{u}}^2 \right)_{p'}^{\mathrm{Old}} - \left(\tfrac{1}{2} \rho \, \boldsymbol{u}^2 \right) (\boldsymbol{x}) \right] dV \\
&\qquad + V_p^{\mathrm{D,New}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r / r) \\
&= V_p^{\mathrm{D,New}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r / r),
\end{aligned}
$$

en géométrie axisymétrique. En géométrie plane, l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta r / r)$ est remplacée par un terme de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$.

D.3 Continuité de la correction en énergie interne

Résultat à démontrer. *En l'absence de projection à l'instant $t^{n+1/2}$, la correction d'énergie interne $\delta e_c^{\varphi,New}$ est nulle soit*

$$\delta e_c^{\varphi,New} = 0.$$

On rappelle la décomposition de la correction $\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ faite dans la Remarque 6.9

$$\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}} = \hat{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}} + \breve{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}}.$$

On commence par la contribution $\hat{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ du transfert de masse. En l'absence de projection en $t^{n+1/2}$, la Proposition 6.3 permet de dire que $m_{cp}^{\mathrm{New}} = m_{cp}^{\mathrm{Proj}}$. Ceci implique également que $\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}} = \boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}$ quelque soit la correction de la Définition 6.9. On en déduit que $\hat{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}} = 0$. Il suffit maintenant de montrer que $\breve{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}} = 0$. On rappelle sa définition puis on reprend la simplification effectuée au début de la démonstration de la Proposition 6.6 tout en notant que $m_p^{\mathrm{New}} = m_p^{\mathrm{Proj}}$

$$
\begin{aligned}
\breve{\delta e}_c^{\varphi,\mathrm{New}} &= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p \in P(c)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2} \rho \, \boldsymbol{u}^2 \right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2} \, m_{cp}^{\varphi,\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} \right)^2 \right\} \\
&= \frac{1}{m_c^{\varphi,\mathrm{New}}} \sum_{p \in P(c)} \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} \left\{ V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2} \rho \, \boldsymbol{u}^2 \right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2} \, m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}} \right)^2 \right\}.
\end{aligned}
$$

Dans le cas où la position des nœuds n'a pas changé lors du lissage, l'égalité des mailles lagrangiennes et des mailles régularisées $c^{\mathrm{Old}} = c^{\mathrm{New}}$, et donc des volumes $V_c^{\mathrm{Old}} = V_c^{\mathrm{New}}$, implique

$$
\begin{aligned}
V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2} \rho \, \boldsymbol{u}^2 \right)_p^{\mathrm{New}} &= V_p^{\mathrm{D,Old}} \left(\tfrac{1}{2} \rho \, \boldsymbol{u}^2 \right)_p^{\mathrm{Old}} \\
&= \tfrac{1}{2} \, \rho_p^{\mathrm{Old}} \, V_p^{\mathrm{D,Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Old}} \right)^2 \\
&= \tfrac{1}{2} \, m_p^{\mathrm{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Old}} \right)^2.
\end{aligned}
$$

Enfin, le résultat de la Proposition 6.3 exprime que $m_p^{\text{Proj}} = m_p^{\text{Old}}$ ce qui donne

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{Proj}} \, \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2 &= \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{Old}} \, \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2 \\ &= \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{Old}} \, \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Old}}\right)^2, \end{aligned}$$

car $\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} = \boldsymbol{u}_p^{\text{Old}}$. On obtient finalement

$$V_p^{\text{D,New}} \, \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} = \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{Proj}} \, \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2,$$

soit $\breve{\delta e}_c^{\,\varphi,\text{New}} = 0$ en l'absence de projection.

D.4 Conservation de la quantité de mouvement du schéma ALE

Résultat à démontrer. *Pour la correction « VE », le schéma ALE conserve la quantité de mouvement à l'ordre du schéma dans la direction axiale en géométrie axisymétrique, autrement dit*

$$\left(\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2}\right) \cdot \boldsymbol{e}_z = \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),$$

où $\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} = \sum_p \boldsymbol{\mu}_p^{n+1/2} = \sum_p m_p^{n+1/2}\, \boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$. *Le terme en* $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ *est remplacée par un terme en* $\mathcal{O}(\Delta x)$ *et le résultat précédent est valide dans les deux directions en géométrie plane.*

On se place dans le cadre d'une projection à l'instant $t^{n+1/2}$. Dans le cas contraire, la quantité de mouvement axiale est strictement conservée d'après le Théorème 2.6. On reprend la Notation 6.1 utilisée dans les Sections 6.2 et 6.3 : les masses et vitesses nodales $m_p^{n+1/2}$ et $\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}$ sont respectivement notées m_p^{New} et $\boldsymbol{u}_p^{\text{New}}$. On rappelle enfin que la vitesse corrigée $\boldsymbol{u}_p^{\text{New}}$ prend en compte le transfert de masse et que la masse nodale post-projection m_p^{Proj} sont respectivement introduits dans les Définitions 6.9 et 6.7. On somme la relation 6.37 formulée en force sur tous les nœuds du domaine pour faire apparaître la quantité de mouvement qui nous intéresse

$$\sum_p m_p^{\text{New}}\, \boldsymbol{u}_p^{\text{New}} - \sum_p m_p^{\text{Proj}}\, \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} = \sum_p \boldsymbol{F}_p\, \Delta t.$$

Dans le cas de la correction « VE », $\sum_p \boldsymbol{F}_p\, \Delta t$ n'est pas strictement nulle et la quantité de mouvement n'est donc pas strictement conservée. On rappelle la définition de cette

correction formulée sous forme de force

$$\boldsymbol{F}_p\,\Delta t = \left(\sqrt{\frac{\kappa_p^{\text{New}}}{\frac{1}{2}\,m_p^{\text{New}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2}}\, m_p^{\text{New}} - m_p^{\text{Proj}} \right) \boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}},$$

où $\kappa_p^{\text{New}} = \min\left(V_p^{\text{D,New}}\,\left(\frac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}}, \frac{1}{2}\,m_p^{\text{Proj}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2\right)$: équation (6.41). On réutilise une égalité prouvée pour la Proposition 6.6 : sur maillage régulier, on a

$$V_p^{\text{D,New}}\,\left(\frac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} - \frac{1}{2}\,m_p^{\text{Proj}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2 = V_p^{\text{D,New}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),$$

en géométrie axisymétrique. On obtient

$$\begin{aligned}
\sqrt{\frac{\kappa_p^{\text{New}}}{\frac{1}{2}\,m_p^{\text{New}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2}} &= \sqrt{\frac{\frac{1}{2}\,m_p^{\text{Proj}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2}{\frac{1}{2}\,m_p^{\text{New}}\left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}}\right)^2} + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)} \\
&= \sqrt{\frac{m_p^{\text{Proj}}}{m_p^{\text{New}}} + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)} \\
&= \sqrt{1 + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)}, \text{ grâce à la Proposition 6.4,} \\
&= 1 + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).
\end{aligned}$$

Toujours grâce à la Proposition 6.4, la correction « VE » est donc à l'ordre du schéma

$$\lambda_p = 1 + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r) \iff \boldsymbol{F}_p\,\Delta t = V_p^{\text{D,New}} \times \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r).$$

Ceci prouve que $\sum_p m_p^{\text{New}}\,\boldsymbol{u}_p^{\text{New}} = \sum_p m_p^{\text{Proj}}\,\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)$. Il suffit ensuite d'appliquer les différents résultats mis en place :

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} &= \sum_p m_p^{\text{Proj}}\,\boldsymbol{u}_p^{\text{Proj}} + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r) \\
&= \sum_p m_p^{\text{Old}}\,\boldsymbol{u}_p^{\text{Old}} + \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r),
\end{aligned}$$

par application du Théorème 6.1. Sous la Notation 6.1, le Théorème 2.6 exprime que

$$\sum_p \left[m_p^{\text{Old}}\,\boldsymbol{u}_p^{\text{Old}} - m_p^{n-1/2}\,\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right] \cdot \boldsymbol{e}_z = 0,$$

en géométrie axisymétrique. On retrouve alors $\left(\boldsymbol{\mu}^{n+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{n-1/2}\right) \cdot \boldsymbol{e}_z = \mathcal{O}(\Delta x) \times \mathcal{O}(\Delta r/r)$. En géométrie plane, tous les termes de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta r/r)$ sont remplacées par des termes

de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta x)$: on a en effet l'égalité

$$V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{Proj}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{Proj}}\right)^2 = V_p^{\mathrm{D,New}} \times \mathcal{O}(\Delta x^2).$$

D.5 Conservation de l'énergie totale du schéma ALE

Résultat à démontrer. *Le schéma ALE conserve strictement l'énergie totale hors conditions aux limites, autrement dit*

$$\mathcal{E}^{n+1/2} - \mathcal{E}^{n-1/2} = 0,$$

où $\mathcal{E}^{n+1/2} = \displaystyle\sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{n+1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n+1/2}\right)^2 + \sum_c m_c^{n+1}\, e_c^{n+1/2}$.

On suppose qu'une projection a été effectuée à l'instant $t^{n+1/2}$. Sinon, le lecteur peut se reporter au Théorème 2.7 pour la conservation de l'énergie totale du schéma lagrangien VNM. On utilise les Notations 6.1 et 6.2 : les quantités définies en $t^{n+1/2}$ sont donc indiquées par New et on a $m_c^{n+1} = m_c^{\mathrm{New}}$. On rappelle que la vitesse et l'énergie interne intervenant dans le théorème sont respectivement corrigées suivant les Définitions 6.9 et 6.10. On a

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^{n+1/2} &= \sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 + \sum_c m_c^{\mathrm{New}}\, e_c^{\mathrm{New}} \\
&= \sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\, e_c^{\varphi,\mathrm{New}} \\
&= \sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\, e_c^{\varphi,\mathrm{Proj}} + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\, \delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}},
\end{aligned}$$

avec la correction de la Définition 6.10. On remplace ensuite cette correction $\delta e_c^{\varphi,\mathrm{New}}$ par son expression

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^{n+1/2} = &\sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\, e_c^{\varphi,\mathrm{Proj}} \\
&+ \sum_{c,\varphi} \sum_{p\in P(c)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\} \\
= &\sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\, e_c^{\varphi,\mathrm{Proj}} \\
&+ \sum_p \sum_{c\in C(p)} \sum_{\varphi} \left\{ \frac{m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_{cp}^{\varphi,\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\} \\
= &\sum_p \tfrac{1}{2}\,m_p^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\mathrm{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\mathrm{New}}\, e_c^{\varphi,\mathrm{Proj}} \\
&+ \sum_p \sum_{c\in C(p)} \left\{ \frac{m_{cp}^{\mathrm{New}}}{m_p^{\mathrm{New}}} V_p^{\mathrm{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\,\boldsymbol{u}^2\right)_p^{\mathrm{New}} - \tfrac{1}{2}\,m_{cp}^{\mathrm{New}} \left(\boldsymbol{u}_{cp}^{\mathrm{New}}\right)^2 \right\}
\end{aligned}$$

$$= \sum_p \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\text{New}}\, e_c^{\varphi,\text{Proj}} + \sum_p \left\{ V_p^{\text{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} - \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{New}}\right)^2 \right\},$$

Finalement, on conclut la preuve avec la conservation de l'énergie totale dans la phase de projection (Théorème 6.2) et dans la phase lagrangienne (Théorème 2.7) :

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^{n+1/2} &= \sum_p \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{New}}\right)^2 + \sum_{c,\varphi} m_c^{\text{New},\varphi}\, e_c^{\text{Proj},\varphi} \\
&\quad + \sum_p \left\{ V_p^{\text{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} - \tfrac{1}{2}\, m_p^{\text{New}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{New}}\right)^2 \right\}, \\
&= \sum_p V_p^{\text{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} + \sum_{c,\varphi} m_c^{\varphi,\text{New}}\, e_c^{\varphi,\text{Proj}} \\
&= \sum_p V_p^{\text{D,New}} \left(\tfrac{1}{2}\rho\, \boldsymbol{u}^2\right)_p^{\text{New}} + \sum_c m_c^{\text{New}}\, e_c^{\text{Proj}}, \text{ par définition de l'énergie interne globale 2.2,} \\
&= \sum_p \tfrac{1}{2} m_p^{\text{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Old}}\right)^2 + \sum_c m_c^{\text{Old}}\, e_c^{\text{Old}},
\end{aligned}$$

par application du Théorème 6.2. Sous la Notation 6.1 introduites pour la projection, la conservation de l'énergie totale lors de la phase lagrangienne s'écrit

$$\sum_p \tfrac{1}{2} m_p^{\text{Old}} \left(\boldsymbol{u}_p^{\text{Old}}\right)^2 + \sum_c m_c^{\text{Old}}\, e_c^{\text{Old}} = \sum_p \tfrac{1}{2} m_p^{n-1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)^2 + \sum_c m_c^n\, e_c^{n-1/2}$$

On rappelle que $m_c^{\text{Old}} = m_c^n$: c'est la masse lagrangienne, constante, entre les instants $t^{n-1/2}$ et $t^{n+1/2}$. On retrouve le résultat attendu

$$\mathcal{E}^{n+1/2} = \sum_p \tfrac{1}{2} m_p^{n-1/2} \left(\boldsymbol{u}_p^{n-1/2}\right)^2 + \sum_c m_c^n\, e_c^{n-1/2} = \mathcal{E}^{n-1/2}.$$

Bibliographie

[1] J. VonNeumann et R. Richtmyer. « A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks ». *Journal of applied physics* 21.3 (1950), p. 232–237.

[2] M.E. Gurtin, E. Fried et L. Anand. *The mechanics and thermodynamics of continua*. Cambridge University Press, 2010.

[3] A.J. Barlow, P.-H. Maire, W.J. Rider, R.N. Rieben et M.J. Shashkov. « Arbitrary Lagrangian–Eulerian methods for modeling high-speed compressible multimaterial flows ». *Journal of Computational Physics* 322.Supplement C (2016), p. 603 –665.

[4] E.H. Lieb et J. Yngvason. « The physics and mathematics of the second law of thermodynamics ». *Physics Reports* 310.1 (1999), p. 1–96.

[5] M. Kenamond, M. Bement et M. Shashkov. « Compatible, total energy conserving and symmetry preserving arbitrary Lagrangian–Eulerian hydrodynamics in 2D rz – Cylindrical coordinates ». *Journal of Computational Physics* 268.Supplement C (2014), p. 154 –185.

[6] F. Coquel et P. Le Floch. « Convergence of finite difference schemes for conservation laws in several space dimensions: a general theory ». *SIAM Journal on numerical Analysis* 30.3 (1993), p. 675–700.

[7] L.D. Landau et E.M. Lifshitz. « Fluid mechanics ». *Course of Theoritical Physics, Volume 6, Pergamon Press* (1959).

[8] O.M. Belotserkovskii, V.V. Demchenko, V.I. Kosarev et A.S. Kholodov. « Numerical simulation of some problems of the laser compression of shells ». *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* 18.2 (1978), p. 117–137.

[9] R.G. Evans, A.J. Bennett et G.J. Pert. « Rayleigh-Taylor instabilities in laser-accelerated targets ». *Physical Review Letters* 49.22 (1982), p. 1639.

[10] J.R. Freeman, M.J. Clauser et S.L. Thompson. « Rayleigh-Taylor instabilities in inertial-confinement fusion targets ». *Nuclear Fusion* 17.2 (1977), p. 223.

[11] V.A. Dobrev, T.E. Ellis, T.V. Kolev et R.N. Rieben. « High-order curvilinear finite elements for axisymmetric Lagrangian hydrodynamics ». *Computers & Fluids* 83.Supplement C (2013). Numerical methods for highly compressible multi-material flow problems, p. 58 –69.

[12] P.P. Whalen. « Algebraic Limitations on Two-Dimensional Hydrodynamics Simulations ». *Journal of Computational Physics* 124.1 (1996), p. 46 –54.

[13] C.W. Hirt, A.A. Amsden et J.L. Cook. « An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds ». *Journal of Computational Physics* 14.3 (1974), p. 227 –253.

[14] C.W. Hirt, A.A. Amsden et J.L. Cook. « An Arbitrary Lagrangian–Eulerian Computing Method for All Flow Speeds ». *Journal of Computational Physics* 135.2 (1997), p. 203 –216.

[15] L.G. Margolin. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) methods: a personal perspective*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-UR-13-24124, 2013.

[16] W. Boscheri et M. Dumbser. « A direct Arbitrary-Lagrangian–Eulerian ADER-WENO finite volume scheme on unstructured tetrahedral meshes for conservative and non-conservative hyperbolic systems in 3D ». *Journal of Computational Physics* 275.Supplement C (2014), p. 484 –523.

[17] T. Vazquez-Gonzalez. « Schémas numériques mimétiques et conservatifs pour la simulation d'écoulements multiphasiques compressibles ». Thèse de doct. CEA, Centrale Supélec, Université Paris-Saclay, 2016.

[18] T. Vazquez-Gonzalez, A. Llor et C. Fochesato. « A novel GEEC (Geometry, Energy, and Entropy Compatible) procedure applied to a staggered direct-ALE scheme for hydrodynamics ». *European Journal of Mechanics / B Fluids* 65 (2017).

[19] B. VanLeer. « Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method ». *Journal of Computational Physics* 32.1 (1979), p. 101 –136.

[20] B. VanLeer. « Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme ». *Journal of Computational Physics* 135.2 (1997), p. 229 –248.

[21] L.G. Margolin et M. Shashkov. « Remapping, recovery and repair on a staggered grid ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193.39 (2004). The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Formulation, p. 4139 –4155.

[22] R. Loubère, M. Staley et B. Wendroff. « The repair paradigm: New algorithms and applications to compressible flow ». *Journal of Computational Physics* 211.2 (2006), p. 385 –404.

[23] M. Shashkov et B. Wendroff. « The repair paradigm and application to conservation laws ». *Journal of Computational Physics* 198.1 (2004), p. 265 –277.

[24] J.P. Boris et D.L. Book. « Flux-corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works ». *Journal of Computational Physics* 11.1 (1973), p. 38 –69.

[25] D. Kuzmin, R. Löhner et S. Turek. *Flux-Corrected Transport: Principles, Algorithms, and Applications. Scientific Computation*. Springer, 2005.

[26] S.T. Zalesak. « Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids ». *Journal of Computational Physics* 31.3 (1979), p. 335 –362.

[27] R. Tipton. *Grid optimization by equipotential relaxation*. Rapp. tech. LLNL, 1992.

[28] J.U. Brackbill et J.S. Saltzman. « Adaptive zoning for singular problems in two dimensions ». *Journal of Computational Physics* 46.3 (1982), p. 342 –368.

[29] B.-I. Jun. *A modified equipotential method for grid relaxation*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-JC-138277, 2000.

[30] P. Knupp, L.G. Margolin et M. Shashkov. « Reference Jacobian Optimization-Based Rezone Strategies for Arbitrary Lagrangian Eulerian Methods ». *Journal of Computational Physics* 176.1 (2002), p. 93 –128.

[31] R. Loubère, P.-H. Maire, M. Shashkov, J. Breil et S. Galera. « ReALE: A reconnection-based arbitrary-Lagrangian–Eulerian method ». *Journal of Computational Physics* 229.12 (2010), p. 4724 –4761.

[32] J.D. Ramshaw. « Simplified second-order rezoning algorithm for generalized two-dimensional meshes ». *Journal of Computational Physics* 67.1 (1986), p. 214 – 222.

[33] J.K. Dukowicz et J.W. Kodis. « Accurate conservative remapping (rezoning) for arbitrary Lagrangian-Eulerian computations ». *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 8.3 (1987), p. 305–321.

[34] W.F. Noh et P. Woodward. « SLIC (simple line interface calculation) ». *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28–July 2, 1976 Twente University, Enschede*. Springer. 1976, p. 330–340.

[35] C.W. Hirt et B.D. Nichols. « Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries ». *Journal of Computational Physics* 39.1 (1981), p. 201 –225.

[36] D.L. Youngs. « Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion ». *Numerical methods for fluid dynamics* (1982).

[37] H.T. Ahn et M. Shashkov. « Multi-material interface reconstruction on generalized polyhedral meshes ». *Journal of Computational Physics* 226.2 (2007), p. 2096 –2132.

[38] V. Dyadechko et M. Shashkov. « Reconstruction of multi-material interfaces from moment data ». *Journal of Computational Physics* 227.11 (2008), p. 5361 –5384.

[39] B. Després, F. Lagoutiere, E. Labourasse et I. Marmajou. « An antidissipative transport scheme on unstructured meshes for multicomponent flows ». *International Journal on Finite Volumes* 7 (2010), p. 30–65.

[40] R. Loubère. Rapp. tech. CEA, Rapport interne, 2017.

[41] J. VonNeumann. *Proposal and analysis of a new numerical method for the treatment of hydrodynamical shock problems*. Rapp. tech. Institute of Advanced Study, Princeton, Rapport AMP 108.1R, 1944.

[42] R. Richtmyer. *Proposed numerical method for calculation of shocks*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-671, 1948.

[43] R. Richtmyer. *Proposed numerical method for calculation of shocks II*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-699, 1948.

[44] J.B.J. Delambre. *De l'usage du calcul différentiel dans la construction des tables astronomiques*. 1790.

[45] L. Verlet. « Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules ». *Physical review* 159.1 (1967), p. 98.

[46] W.B. Goad. *WAT: a numerical method for two-dimensional unsteady fluid flow*. Rapp. tech. LANL, Rapport LAMS-2365, 1960.

[47] M.L. Wilkins. *Calculation of elastic-plastic flow*. Rapp. tech. California Univ Livermore Radiation Lab, Rapport UCRL-7322, 1963.

[48] W.E. Pracht. « Calculating three-dimensional fluid flows at all speeds with an Eulerian-Lagrangian computing mesh ». *Journal of Computational Physics* 17.2 (1975), p. 132 –159.

[49] B.J. Alder, S. Fernbach et M. Rotenberg. *Methods in Computational Physics: Advances in Research and Applications*. Academic Press., 1963.

[50] R.B. DeBar. *Fundamentals of the Kraken code*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCID-17366, 1974.

[51] J.G. Trulio et K.R. Trigger. *Numerical solution of the one-dimensional Lagrangian hydrodynamic equations*. Rapp. tech. California. Univ., Livermore, CA (United States). Lawrence Radiation Lab., Rapport UCRL-6267, 1961.

[52] D.E. Burton. « Exact conservation of energy and momentum in staggered-grid hydrodynamics with arbitrary connectivity ». *Advances in the Free-Lagrange Method Including Contributions on Adaptive Gridding and the Smooth Particle Hydrodynamics Method*. Springer, 1991, p. 7–19.

[53] A. Llor, A. Claisse et C. Fochesato. « Energy preservation and entropy in Lagrangian space- and time-staggered hydrodynamic schemes ». *Journal of Computational Physics* 309.Supplement C (2016), p. 324 –349.

[54] A.E. Mattsson et W.J. Rider. « Artificial viscosity: back to the basics ». *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 77.7 (2015), p. 400–417.

[55] R. Landshoff. *A numerical method for treating fluid flow in the presence of shocks*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-1930, 1955.

[56] R.D. Richtmyer et K.W. Morton. *Different methods for initial value problems*. Interscience, 1967.

[57] V.F. Kurapatenko. « Difference Methods for Solutions of Problems of Mathematical Physics, chapter-. Janenko, NN ». *American Mathematical Society, Providence, RI* (1967), p. 17.

[58] W.D. Schulz. *Two-dimensional Lagrangian hydrodynamic difference equations*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-677, 1963.

[59] G. Maenchen et S. Sack. *The tensor code*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-7316, 1963.

[60] W.F. Noh. *CEL: A time-dependent, two-space-dimensional, coupled Eulerian-Lagrange code*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-7463, 1963.

[61] H.G. Kolsky. *A method for the numerical solution of transient hydrodynamic shock problems in two space dimensions*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-1867, 1955.

[62] E.J. Caramana, D.E. Burton, M.J. Shashkov et P.P. Whalen. « The Construction of Compatible Hydrodynamics Algorithms Utilizing Conservation of Total Energy ». *Journal of Computational Physics* 146.1 (1998), p. 227 –262.

[63] E.J. Caramana et M.J. Shashkov. « Elimination of Artificial Grid Distortion and Hourglass-Type Motions by Means of Lagrangian Subzonal Masses and Pressures ». *Journal of Computational Physics* 142.2 (1998), p. 521 –561.

[64] E.J. Caramana, M.J. Shashkov et P.P. Whalen. « Formulations of Artificial Viscosity for Multi-dimensional Shock Wave Computations ». *Journal of Computational Physics* 144.1 (1998), p. 70 –97.

[65] E.J. Caramana et P.P. Whalen. « Numerical Preservation of Symmetry Properties of Continuum Problems ». *Journal of Computational Physics* 141.2 (1998), p. 174 –198.

[66] L. Margolin et M. Shashkov. « Using a curvilinear grid to construct symmetry-preserving discretizations for Lagrangian gas dynamics ». *Journal of Computational Physics* 149.2 (1999), p. 389 –417.

[67] P.-H. Maire, R. Loubère et P. Váchal. « Staggered Lagrangian discretization based on cell-centered Riemann solver and associated hydrodynamics scheme ». *Communications in Computational Physics* 10.4 (2011), p. 940–978.

[68] V.A. Dobrev, T.V. Kolev et R.N. Rieben. « High-order curvilinear finite element methods for Lagrangian hydrodynamics ». *SIAM Journal on Scientific Computing* 34.5 (2012), B606–B641.

[69] T. Belytschko. « A survey of numerical methods and computer programs for dynamic structural analysis ». *Nuclear Engineering and Design* 37.1 (1976), p. 23–34.

[70] J.O. Hallquist. *User's manual for DYNA3D and DYNAP: nonlinear dynamic analysis of solids in three dimension*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCID-19156, 1981.

[71] J.O. Hallquist. *User's manual for DYNA2D: an explicit two-dimensional hydrodynamic finite-element code with interactive rezoning*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCID-18756, 1982.

[72] G.L. Goudreau et J.O. Hallquist. « Recent developments in large-scale finite element Lagrangian hydrocode technology ». *Computer methods in applied mechanics and engineering* 33 (1982), p. 725–757.

[73] R. Hartmann et P. Houston. « Adaptive Discontinuous Galerkin Finite Element Methods for the Compressible Euler Equations ». *Journal of Computational Physics* 183.2 (2002), p. 508 –532.

[74] M. Tavelli et M. Dumbser. « A pressure-based semi-implicit space–time discontinuous Galerkin method on staggered unstructured meshes for the solution of the compressible Navier–Stokes equations at all Mach numbers ». *Journal of Computational Physics* 341 (2017), p. 341 –376.

[75] L.G. Margolin, M. Shashkov et P.K. Smolarkiewicz. « A discrete operator calculus for finite difference approximations ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 187.3 (2000), p. 365 –383.

[76] K. Lipnikov, G. Manzini et M. Shashkov. « Mimetic finite difference method ». *Journal of Computational Physics* 257.Part B (2014). Physics-compatible numerical methods, p. 1163 –1227.

[77] D.E. Burton. *Multidimensional discretization of conservation laws for unstructured polyhedral grids*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-JC-118306, 1994.

[78] J.M. Owen et M. Shashkov. « Arbitrary Lagrangian Eulerian remap treatments consistent with staggered compatible total energy conserving Lagrangian methods ». *Journal of Computational Physics* 273.Supplement C (2014), p. 520 –547.

[79] M. Kucharik et M. Shashkov. « Conservative multi-material remap for staggered multi-material Arbitrary Lagrangian–Eulerian methods ». *Journal of Computational Physics* 258.Supplement C (2014), p. 268 –304.

[80] D.P. Starinshak et J.M. Owen. « A subzone reconstruction algorithm for efficient staggered compatible remapping ». *Journal of Computational Physics* 296.Supplement C (2015), p. 263 –292.

[81] J.C. Campbell et M.J. Shashkov. « A Tensor Artificial Viscosity Using a Mimetic Finite Difference Algorithm ». *Journal of Computational Physics* 172.2 (2001), p. 739 –765.

[82] K. Lipnikov et M. Shashkov. « A framework for developing a mimetic tensor artificial viscosity for Lagrangian hydrocodes on arbitrary polygonal meshes ». *Journal of Computational Physics* 229.20 (2010), p. 7911 –7941.

[83] R.K.C. Chan. « A generalized arbitrary Lagrangian-Eulerian method for incompressible flows with sharp interfaces ». *Journal of Computational Physics* 17.3 (1975), p. 311 –331.

[84] D.P. Flanagan et T. Belytschko. « A uniform strain hexahedron and quadrilateral with orthogonal hourglass control ». *International journal for numerical methods in engineering* 17.5 (1981), p. 679–706.

[85] P. Matejovič et V. Adamík. « A one-point integration quadrilateral with hourglass control in axisymmetric geometry ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 70.3 (1988), p. 301 –320.

[86] A.L. Bauer, D.E. Burton, E.J. Caramana, R. Loubère, M.J. Shashkov et P.P. Whalen. « The internal consistency, stability, and accuracy of the discrete, compatible formulation of Lagrangian hydrodynamics ». *Journal of Computational Physics* 218.2 (2006), p. 572 –593.

[87] R. Loubère, M. Shashkov et B. Wendroff. « Volume consistency in a staggered grid Lagrangian hydrodynamics scheme ». *Journal of Computational Physics* 227.8 (2008), p. 3731 –3737.

[88] D.E. Burton, N.R. Morgan, M.R.J. Charest, M.A. Kenamond et J. Fung. « Compatible, energy conserving, bounds preserving remap of hydrodynamic fields for an extended ALE scheme ». *Journal of Computational Physics* 355.Supplement C (2018), p. 492 –533.

[89] D. Bailey, M. Berndt, M. Kucharik et M. Shashkov. « Reduced-dissipation remapping of velocity in staggered arbitrary Lagrangian–Eulerian methods ». *Journal of Computational and Applied Mathematics* 233.12 (2010). Finite Element Methods in Engineering and Science (FEMTEC 2009), p. 3148 –3156.

[90] D.S. Bailey. *Second-order monotonic advection in LASNEX*. Rapp. tech. Laser Program Annual Report'84, Rapport UCRL-50021-84, 1984, 3–57–3–61.

[91] B. Després et C. Mazeran. « Symmetrization of Lagrangian gas dynamic in dimension two and multidimensional solvers ». *Comptes Rendus Mécanique* 331.7 (2003), p. 475–480.

[92] C. Mazeran. « Sur la structure mathématique et l'approximation numérique de l'hydrodynamique lagrangienne bidimensionnelle ». Thèse de doct. Bordeaux 1, 2007.

[93] G. Carré, S. Del Pino, B. Després et E. Labourasse. « A cell-centered Lagrangian hydrodynamics scheme on general unstructured meshes in arbitrary dimension ». *Journal of Computational Physics* 228.14 (2009), p. 5160 –5183.

[94] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil et J. Ovadia. « A cell-centered Lagrangian scheme for two-dimensional compressible flow problems ». *SIAM Journal on Scientific Computing* 29.4 (2007), p. 1781–1824.

[95] R. Abgrall, J. Breil, P.-H. Maire et J. Ovadia. *Un schéma centré pour l'hydrodynamique Lagrange bidimensionnelle*. Rapp. tech. Laboratoire de Recherche Correspondant LRC CEA-MAB, Université de Bordeaux, 2004.

[96] D.E. Burton, T.C. Carney, N.R. Morgan, S.K. Sambasivan et M.J. Shashkov. « A cell-centered Lagrangian Godunov-like method for solid dynamics ». *Computers & Fluids* 83.Supplement C (2013). Numerical methods for highly compressible multi-material flow problems, p. 33 –47.

[97] N.R. Morgan, J.I. Waltz, D.E. Burton, M.R. Charest, T.R. Canfield et J.G. Wohlbier. « A point-centered arbitrary Lagrangian Eulerian hydrodynamic approach for tetrahedral meshes ». *Journal of Computational Physics* 290.Supplement C (2015), p. 239 –273.

[98] D.E. Burton, N.R. Morgan, T.C. Carney et M.A. Kenamond. « Reduction of dissipation in Lagrange cell-centered hydrodynamics (CCH) through corner gradient reconstruction (CGR) ». *Journal of Computational Physics* 299.Supplement C (2015), p. 229 –280.

[99] A.J. Barlow. « A high order cell centred dual grid Lagrangian Godunov scheme ». *Computers & Fluids* 83.Supplement C (2013). Numerical methods for highly compressible multi-material flow problems, p. 15 –24.

[100] J. Cheng et C.-W. Shu. « A high order ENO conservative Lagrangian type scheme for the compressible Euler equations ». *Journal of Computational Physics* 227.2 (2007), p. 1567 –1596.

[101] P.D. Lax. « Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation ». *Communications on Pure and Applied Mathematics* 7.1 (1954), p. 159–193.

[102] P.D. Lax et B. Wendroff. *Systems of conservation laws*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-2285, 1960.

[103] P.D. Lax et B. Wendroff. « Systems of conservation laws ». *Communications on Pure and Applied mathematics* 13.2 (1960), p. 217–237.

[104] S.K. Godunov. « A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics ». *Matematicheskii Sbornik* 89.3 (1959), p. 271–306.

[105] E. Godlewski et P.-A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*. T. 118. Springer Science & Business Media, 2013.

[106] F.L. Addessio, D.E. Caroll, J.K. Dukowicz, J.N. Johnson, B.A. Kashiwa, M.E. Maltrud et H.M. Ruppel. *CAVEAT: A computer code for fluid dynamics with large distortions and internal slip*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-10613-MS, 1986.

[107] J.-P. Braeunig. « Reducing the entropy production in a collocated Lagrange–Remap scheme ». *Journal of Computational Physics* 314.Supplement C (2016), p. 127 –144.

[108] P.-H. Maire, R. Loubère et P. Váchal. « Staggered Lagrangian discretization based on cell-centered Riemann solver and associated hydrodynamics scheme ». *Communications in Computational Physics* 10.4 (2011), p. 940–978.

[109] B. Després et E. Labourasse. « Stabilization of cell-centered compressible Lagrangian methods using subzonal entropy ». *Journal of Computational Physics* 231.20 (2012), p. 6559 –6595.

[110] R.B. Christensen. « Godunov methods on a staggered mesh-an improved artificial viscosity ». *Proceedings of the Nuclear Explosives Code Development Conference, Monterey, CA, Nov.* 1990, p. 6–9.

[111] J.K. Dukowicz. « A general, non-iterative Riemann solver for Godunov's method ». *Journal of Computational Physics* 61.1 (1985), p. 119 –137.

[112] G. Luttwak et J. Falcovitz. « Slope limiting for vectors: A novel vector limiting algorithm ». *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 65.11-12 (2011), p. 1365–1375.

[113] P. Hoch et E. Labourasse. « A frame invariant and maximum principle enforcing second-order extension for cell-centered ALE schemes based on local convex hull preservation ». *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 76.12 (2014), p. 1043–1063.

[114] J. José et E. Saletan. *Classical dynamics: a contemporary approach*. 1998.

[115] P.J. Morrison. « Hamiltonian description of the ideal fluid ». *Reviews of modern physics* 70.2 (1998), p. 467.

[116] H. Goldstein, C. Poole et J. Safko. *Classical mechanics*. 2002.

[117] A.P. Veselov. « Integrable discrete-time systems and difference operators ». *Functional Analysis and its Applications* 22.2 (1988), p. 83–93.

[118] E.P. Fahrenthold et J.C. Koo. « Discrete Hamilton's equations for viscous compressible fluid dynamics ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 178.1 (1999), p. 1 –22.

[119] J.C. Koo et E.P. Fahrenthold. « Discrete Hamilton's equations for arbitrary Lagrangian–Eulerian dynamics of viscous compressible flow ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 189.3 (2000), p. 875 –900.

[120] A. Claisse, A. Llor, P. Le Tallec et A. Marboeuf. « Reducing mesh distortions and asymmetries in space-staggered Lagrangian hydro-schemes : variable node masses and momentum filtering ». *À soumettre* (2017).

[121] Z. Ge et J.E. Marsden. « Lie-poisson hamilton-jacobi theory and lie-poisson integrators ». *Physics Letters A* 133.3 (1988), p. 134–139.

[122] J.M. Wendlandt et J.E. Marsden. « Mechanical integrators derived from a discrete variational principle ». *Physica D: Nonlinear Phenomena* 106.3-4 (1997), p. 223–246.

[123] *Journal of Computational Physics* 257 Part B (2014).

[124] E. Van Renterghem et A. Llor. Rapp. tech. CEA, Rapport interne, 2013.

[125] C.P. Pesce et L. Casetta. « Systems with mass explicitly dependent on position ». *Dynamics of mechanical systems with variable mass*. Springer, 2014, p. 51–106.

[126] A. Claisse, P. Le Tallec et A. Marboeuf. « Conservative and entropy controlled remap for ALE simulations in very large deformations ». *À soumettre* (2017).

[127] V.A. Andronov, S.M. Bakhrakh, E.E. Meshkov, V.N. Mokhov, V.V. Nikiforov, A.V. Pevnitskii et A.I. Tolshmyakov. « Turbulent mixing at contact surface accelerated by shock waves ». *Soviet Physics JETP* 44.2 (1976), p. 424–427.

[128] E. Van Renterghem. Rapp. tech. CEA, Rapport interne, 1999.

[129] A.V. Wilchinsky et K. Hutter. « On Thermodynamic Consistency of Turbulent Closures ». *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 15.1 (2001), p. 23–33.

[130] A.W. Cook. « Enthalpy diffusion in multicomponent flows ». *Physics of Fluids* 21.5 (2009), p. 055109.

[131] T. Vazquez-Gonzalez, A. Llor, M. Peybernes et C. Fochesato. Rapp. tech. CEA, Rapport interne, 2013.

[132] P.L. Roe, T.B. Lung et J. Maeng. « New approaches to Limiting ». *22nd AIAA Comput. Fluid Dynamics Conference* (2015).

[133] S. Galera, P.-H. Maire et J. Breil. « A two-dimensional unstructured cell-centered multi-material ALE scheme using VOF interface reconstruction ». *Journal of Computational Physics* 229.16 (2010), p. 5755 –5787.

[134] M. Kucharik, R.V. Garimella, S.P. Schofield et M.J. Shashkov. « A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations ». *Journal of Computational Physics* 229.7 (2010), p. 2432 –2452.

[135] J. Breil. « Numerical methods for Lagrangian and Arbitrary-Lagrangian-Eulerian Hydrodynamic Contribution to the simulation of High-Energy-Density-Physics Problems ». Thèse de doct. Univresité de Bordeaux, HDR, 2016.

[136] S. Del Pino. « Metric-based mesh adaptation for 2D Lagrangian compressible flows ». *Journal of Computational Physics* 230.5 (2011), p. 1793 –1821.

[137] J.-F. Haas et B. Sturtevant. « Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities ». *Journal of Fluid Mechanics* 181 (1987), p. 41–76.

[138] J.J. Quirk et S. Karni. « On the dynamics of a shock–bubble interaction ». *Journal of Fluid Mechanics* 318 (1996), p. 129–163.

[139] S.M. Bakhrakh, V.F. Spiridonov et A.A. Shanin. « Method for calculating gasdynamic flows of an inhomogeneous medium in Lagrange-Euler variables ». *Akademiia Nauk SSSR Doklady*. T. 276. 1984, p. 829–833.

[140] D.J. Benson. « Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 99.2 (1992), p. 235 –394.

[141] A. Llor. « De A1 à A3 : peut-on améliorer le schéma lagrangien « saute-mouton » ». *École thématique de simulation numérique (ETSN)* (Porquerolles, 2013).

[142] Wolfram Research, Inc. *Mathematica, Version 11.2*. Champaign, IL, 2017.

[143] J.U. Brackbill. « On modelling angular momentum and vorticity in compressible fluid flow ». *Computer Physics Communications* 47.1 (1987), p. 1–16.

[144] B. Després. « Weak consistency of the cell-centered Lagrangian GLACE scheme on general meshes in any dimension ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.41 (2010), p. 2669 –2679.

[145] E.F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction. 1999*.

[146] M.L. Wilkins. « Use of artificial viscosity in multidimensional fluid dynamic calculations ». *Journal of Computational Physics* 36.3 (1980), p. 281 –303.

[147] R. Menikoff. *Equations of state and fluid dynamics (lecture notes)*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-UR-07-3989, 2007.

[148] T. Belytschko, J.S.-J. Ong, W.K. Liu et J.M. Kennedy. « Hourglass control in linear and nonlinear problems ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 43.3 (1984), p. 251–276.

[149] R.E. Kidder. « Theory of homogeneous isentropic compression and its application to laser fusion ». *Nuclear Fusion* 14.1 (1974), p. 53.

[150] Lord Rayleigh. *The theory of sound*. T. 2. Macmillan, 1896.

[151] K. Lipnikov et M. Shashkov. « A mimetic tensor artificial viscosity method for arbitrary polyhedral meshes ». *Procedia Computer Science* 1.1 (2010). ICCS 2010, p. 1921 –1929.

[152] A.W. Cook et W.H. Cabot. « Hyperviscosity for shock-turbulence interactions ». *Journal of Computational Physics* 203.2 (2005), p. 379 –385.

[153] A.W. Cook, M.S. Ulitsky et D.S. Miller. « Hyperviscosity for unstructured ALE meshes ». *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 27.1 (2013), p. 32–50.

[154] W.F. Noh. *Artificial viscosity (Q) and artificial heat flux (H) errors for spherically divergent shocks*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-89623, 1983.

[155] R. Loubère, P.-H. Maire et P. Váchal. « A second-order compatible staggered Lagrangian hydrodynamics scheme using a cell-centered multidimensional approximate Riemann solver ». *Procedia Computer Science* 1.1 (2010). ICCS 2010, p. 1931 –1939.

[156] R. Loubère, P.-H. Maire et P. Váchal. « 3D staggered Lagrangian hydrodynamics scheme with cell-centered Riemann solver-based artificial viscosity ». *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 72.1 (2013), p. 22–42.

[157] R. Courant, K. Friedrichs et H. Lewy. « Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik ». *Mathematische Annalen* 100.1 (1928), p. 32–74.

[158] L.I. Sedov. *Similarity and dimensional methods in mechanics (similarity and dimensional methods in mechanics, New York*. 1959.

[159] J.R. Kamm. *Evaluation of the Sedov-von Neumann-Taylor blast wave solution*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-UR-00-6055, 2000.

[160] J.R. Kamm et F.X. Timmes. *On efficient generation of numerically robust Sedov solutions*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-UR-07-2849, 2007.

[161] W.F. Noh. « Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux ». *Journal of Computational Physics* 72.1 (1987), p. 78 –120.

[162] W.J. Rider. « Revisiting Wall Heating ». *Journal of Computational Physics* 162.2 (2000), p. 395 –410.

[163] A.M. Winslow. *Equipotential zoning of two dimensional meshes*. Rapp. tech. LLNL, Rapport UCRL-7312, 1963.

[164] A.M. Winslow. « Numerical solution of the quasilinear Poisson equation in a nonuniform triangle mesh ». *Journal of Computational Physics* 135.2 (1997), p. 128 –138.

[165] J.K. Dukowicz. « Conservative rezoning (remapping) for general quadrilateral meshes ». *Journal of Computational Physics* 54.3 (1984), p. 411 –424.

[166] J.D. Ramshaw. « Conservative rezoning algorithm for generalized two-dimensional meshes ». *Journal of Computational Physics* 59.2 (1985), p. 193 –199.

[167] R. Scardovelli et S. Zaleski. « Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian–Lagrangian advection ». *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 41.3 (2003), p. 251–274.

[168] S. Diot, M.M. François et E.D. Dendy. « An interface reconstruction method based on analytical formulae for 2D planar and axisymmetric arbitrary convex cells ». *Journal of Computational Physics* 275.Supplement C (2014), p. 53 –64.

[169] P. Vigneaux. « Méthodes Level-Set pour des problèmes d'interface en microfluidique ». Thèse de doct. Université Bordeaux I, 2007.

[170] S. Osher et J.A. Sethian. « Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations ». *Journal of Computational Physics* 79.1 (1988), p. 12 –49.

[171] M. Sussman, P. Smereka et S. Osher. « A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow ». *Journal of Computational Physics* 114.1 (1994), p. 146 –159.

[172] P. Starinshak. « Level-Set Methods for Multimaterial Radiative Shock Hydrodynamics ». Thèse de doct. University of Michigan, 2012.

[173] M. Kucharik, R.V. Garimella, S.P. Schofield et M.J. Shashkov. « A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations ». *Journal of Computational Physics* 229.7 (2010), p. 2432 –2452.

[174] R. Loubère et M.J. Shashkov. « A subcell remapping method on staggered polygonal grids for arbitrary-Lagrangian–Eulerian methods ». *Journal of Computational Physics* 209.1 (2005), p. 105 –138.

[175] C.-W. Shu. « Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws ». *Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations*. Springer, 1998, p. 325–432.

[176] C. Hu et C.-W. Shu. « Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes on Triangular Meshes ». *Journal of Computational Physics* 150.1 (1999), p. 97 –127.

[177] H.C. Yee, N.D. Sandham et M.J. Djomehri. « Low-Dissipative High-Order Shock-Capturing Methods Using Characteristic-Based Filters ». *Journal of Computational Physics* 150.1 (1999), p. 199 –238.

[178] W. Boscheri et M. Dumbser. « A direct Arbitrary-Lagrangian–Eulerian ADER-WENO finite volume scheme on unstructured tetrahedral meshes for conservative and non-conservative hyperbolic systems in 3D ». *Journal of Computational Physics* 275.Supplement C (2014), p. 484 –523.

[179] T. Vazquez-Gonzalez, A. Llor et C. Fochesato. « Ransom test results from various two-fluid schemes: Is enforcing hyperbolicity a thermodynamically consistent option? » *International Journal of Multiphase Flow* 81 (2016), p. 104 –112.

[180] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, R. Loubère et B. Rebourcet. « A nominally second-order cell-centered Lagrangian scheme for simulating elastic–plastic flows on two-dimensional unstructured grids ». *Journal of Computational Physics* 235.Supplement C (2013), p. 626 –665.

[181] J.S. Saltzmann et P. Colella. *Second order corner coupled upwind transport methods for Lagrangian hydrodynamics*. Rapp. tech. LANL, Rapport LA-UR-85-678, 1985.

université PARIS-SACLAY

ÉCOLE DOCTORALE
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

Titre : Schémas ALE multi-matériaux totalement conservatifs pour l'hydrodynamique

Mots clés : hydrodynamique compressible, Arbitrary-Lagrangian-Eulerian, conservation énergie, onde de choc, cohérence thermodynamique, géométrie axisymétrique

Résumé : Ce sujet de thèse s'inscrit dans le cadre des études actuellement menées au CEA/DAM concernant des schémas numériques ALE (Arbitrary-Lagrangian-Eulerian) de type « Lagrange + Projection », dans le contexte des simulations hydrodynamiques mutli-matériaux en grandes déformations.
Les schémas décalés en temps et en espace sont très utilisés dans les codes industriels. Ils sont robustes et permettent une bonne approximation des comportements complexes. Ils sont cependant connus pour ne pas conserver exactement l'énergie totale. Cela pose un problème dans le traitement des chocs, sur maillages raffinés ou dans la simulation des milieux réactifs.
En 2016, des travaux originaux on été proposés par A. Llor et coll. pour rendre conservatif ce type de schéma dans un contexte purement lagrangien, notamment en proposant une correction pour retrouver la conservation de l'énergie totale.
Dans cette thèse, on propose d'étendre ce schéma lagrangien dans un contexte ALE multi-matériaux (avec interface), en garantissant la conservation de l'énergie totale, le respect du second principe de la thermodynamique et la robustesse. De nombreux cas tests ont été menés (en 2D plan et en 2D axisymétrique) et comparés aux méthodes existantes afin de montrer la pertinence de cette approche.

Title : Conservative multi-material ALE schemes for Hydrodynamics

Keywords : compressible Hydrodynamics, Arbitrary-Lagrangian-Eulerian, energy conservation, shock wave, thermodynamic consistency, axisymmetric geometry

Abstract : This PhD subject comes within actual studies managed by CEA/DAM about ALE (Arbitrary-Lagrangian-Eulerian) schemes (with a splitting of Lagrangian and Remapping steps) in the context of hydrodynamic simulations.
Space- and Time-Staggered schemes are widely used in industrial codes for their simplicity and robustness despite their known lack of exact energy conservation. This is a major drawback in presence of strong shocks. Among all existing schemes, none of them meet the expectations of robustness, conservation, thermodynamic consistency (both shocks and relaxations capture), accuracy and adaptibility to complex behaviors. Recently, some novel works have been proposed by A. Llor *et al.* in order to make conservative this type of scheme in a Lagrangian context. Current remap methods, necessary in large deformations, do not guarantee simultaneously total energy conservation and thermodynamic consistency. This work aims at extending this conservative Lagrangian Space- and Time-Staggered scheme to a multi-material ALE methodology, keeping its good properties (conservation, accuracy, thermodynamic consistency, robustness) intact. Classical, but demanding, test cases have been performed (both in plane and axisymmetric 2D geometries) and have been compared to existing numerical methods in order to assess the relevance of our approach.

Université Paris-Saclay
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin, France