INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

n° . . . .

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 27 septembre 2004 par

Jocelyn ÉTIENNE

pour obtenir le grade de **Docteur de l'INPG**
dans la spéciatité Mathématiques Appliquées,
préparée au **Laboratoire de Modélisation et Calcul**
et au **Laboratoire des Écoulement Géophysiques et Industriels**
dans le cadre de l'École Doctorale de Mathématiques,
de Sciences et technologies de l'information, Informatique.

Simulation numérique d'écoulements gravitaires à fortes différences de densité
Application aux avalanches

Sous la direction de **Pierre SARAMITO**
et **Emil HOPFINGER**

Jury proposé :

- Mme Valérie PERRIER, présidente proposée ;
- M. Olivier PIRONNEAU, rapporteur ;
- M. Jean-Paul VILA, rapporteur ;
- M. Pierre SARAMITO, directeur de thèse ;
- M. Emil HOPFINGER, co-encadrant ;
- M. Stéphane ZALESKI, examinateur.

Que dirons nous de la Neige qui tombe
En un monceau, tout le long de la combe ?
Quand par les Vens arrachee elle part
Ou quand le chaud par dessous la depart :
Ainsi s'en vient la masse à la renverse,
Qui son lourd fais tout aval bouleverse :
Non qu'au partir ell'ait si grand' dureté,
Mais en roulant, de son pois aheurté,
Amasse en rond tousjours Neige recente,
Si tost, si fort, de si longue descente,
Que du fracaz qu'ell'va par l'air donnant,
De loin cuidez ouir le Ciel tonnant,
Ou ce qui semble à la celeste foudre,
L'horrible son de la machine à poudre :
Cete lavanche au choir se vient ouvrir
Au heurt des rocz, & tout le val couvrir.

Jacques Peletier du Mans, *La Savoye*, 1572.

Remerciements

Pierre Saramito et Emil Hopfinger m'ont accompagné tout au long de mon travail de thèse, et je souhaite les en remercier chaleureusement. Depuis l'élaboration du sujet jusqu'à la rédaction, Pierre m'a proposé des objectifs et m'a aidé à les atteindre, tout en me laissant la liberté d'explorer les différentes possibilités. Emil a toujours trouvé le temps de discuter en profondeur de tous les aspects de ce travail et m'a énormément guidé dans la compréhension des phénomènes en jeu. De la même façon, les discussions avec Didier Bresch ont amené une ouverture supplémentaire à mon travail. Je souhaite donc vivement que cette thèse ne marque pas la conclusion de notre travail ensemble, mais soit un jalon qui nous permette de le poursuivre dans les années à venir.

Olivier Pironneau et Jean-Paul Vila ont bien voulu être les rapporteurs de ce travail, et je les en remercie vivement. Mes sincères remerciements vont également à Stéphane Zaleski et à Valérie Perrier qui ont accepté de faire partie du jury.

Ce travail de thèse restera pour moi indissociable de l'environnement dans lequel je l'ai mené. Je profite donc de cette occasion pour exprimer la joie avec laquelle j'ai participé à la vie du laboratoire. L'équipe des Équations aux dérivées partielles a été un cadre stimulant, et les discussions autour d'un café, qu'elles aient été ou non scientifiques, et qu'elles aient eu lieu à Grenoble ou face à la Meije, ont été très bénéfiques. Ma pensée va par ailleurs plus particulièrement à Jean-Claude Paumier, pour sa gentillesse et sa disponibilité.

L'ambiance chaleureuse entre les doctorants a fortement participé à l'agrément de ces trois années, et je salue chacun d'entre eux et leur souhaite un bon vent pour la suite. Je les remercie aussi tous pour leur ouverture d'esprit sur tous les aspects des mathématiques, car il y en a bien peu que je n'aie pas embêté avec des questions touchant à leur spécialité. J'ai été particulièrement heureux de lancer avec eux des projets tels que notre association et les journées des thésards, et je remercie tous ceux qui ont pris part et continuent de s'investir dans ces aventures. Une mention toute particulière pour François et Guillaume, car, outre le fait qu'ils sont des amis chers avec lesquels débattre est passionnant, ils ont été pour tout le laboratoire des collègues secourables et toujours disponibles.

Je suis enfin très heureux d'avoir ici l'occasion de remercier tous mes proches et ma famille de leur soutien et de leur aide. Pour son sourire, pour sa bonne humeur, sa rigueur, son secours et son enthousiasme, je remercie sans fin Sophie, et je dédie avec bonheur cette thèse à celle ou celui qui bientôt l'appelera maman.

Table des matières

Introduction **11**
1 Avalanches de neige poudreuse 12
2 Les équations de Navier–Stokes pour des fluides miscibles de densités différentes 13
3 Approche numérique 14
4 Application aux écoulements d'échange et aux avalanches 16

I Équations de Navier–Stokes non-homogène en présence de diffusion de masse **17**
1 Dérivation des équations 18
1.1 Conservation de la masse 18
1.2 Conservation des constituants 19
1.3 Équation de la quantité de mouvement 22
1.4 Le système obtenu 23
2 Approximation de Boussinesq dans le cas-limite des faibles différences de densité 24
3 Lien avec les systèmes de type Kazhikhov–Smagulov 25
3.1 Vitesse des phases et des volumes 25
3.2 Systèmes de type Kazhikhov–Smagulov 26
4 Résultats d'existence et de régularité des solutions 26
5 Conditions aux limites 28
6 Choix d'un modèle pour les simulations numériques 29

II Discrétisation et algorithme de résolution **31**
1 Discrétisation en temps : les termes de transport 32
1.1 Courbes caractéristiques 32
1.2 Approximation des courbes caractéristiques 34
1.3 Spécificité des problèmes à divergence prescrite 34
1.4 Semi-discrétisation en temps 35
2 Discrétisation en espace : les termes de diffusion 36
2.1 Formulation variationnelle 37
2.2 Discrétisation éléments finis 38
2.3 Algorithme de résolution 38
3 Maillages adaptatifs 40
3.1 Méthodes de réduction de l'erreur 40
3.2 Adaptation dynamique par remaillage 41
4 Implémentation efficace pour des maillages non structurés 42

III Méthode des caractéristiques et éléments finis 45
- 1 Discrétisation éléments finis et norme L^∞ 45
- 2 La méthode des caractéristiques 47
  - 2.1 Approximation de la dérivée matérielle 48
  - 2.2 Morphisme des caractéristiques 49
  - 2.3 Approximation des courbes caractéristiques 51
  - 2.4 Caractéristiques discrètes et transport non-linéaire 52
- 3 Un problème d'intégration numérique 57
- 4 Perspectives 60

IV Analyse numérique 61
- 1 Énoncé du théorème 61
- 2 Existence d'une solution et erreur dans le sous-problème de Stokes 65
  - 2.1 Conditions d'existence d'une unique solution 65
    - 2.1.1 Le problème continu 65
    - 2.1.2 Le problème discret 66
  - 2.2 Noyau de l'opérateur discret du gradient 67
    - 2.2.1 Cas des mini-éléments 67
    - 2.2.2 Cas de l'élément de Taylor–Hood 68
  - 2.3 Estimation d'erreur 69
- 3 Démonstration du théorème 71
  - 3.1 Estimation d'erreur du problème de convection-diffusion 71
    - 3.1.1 Estimation L^2 72
    - 3.1.2 Estimation H^1 76
    - 3.1.3 Estimation L^∞ 80
  - 3.2 Erreur sur χ 80
  - 3.3 Estimation d'erreur du problème de Navier-Stokes 81
    - 3.3.1 Estimation L^2 82
    - 3.3.2 Estimation H^1 83
- 4 Conclusion 84

V Simulation et validation pour les écoulements d'échange 87
- 1 Introduction 87
- 2 Simulations antérieures 88
  - 2.1 Simulations de Gröbelbauer *et al.* 88
  - 2.2 Simulations de Härtel *et al.* 89
  - 2.3 Simulations de Birman *et al.* 89
- 3 Article soumis à *Physics of Fluids* 90
- A Introduction 91
- B Lock-exchange flow conditions 92
- C Governing equations 93
  - C.1 Mass and constituent conservation equations 93
  - C.2 Momentum equation 94
- D Numerical approach 96
- E Asymptotic behaviour at the release 98
- F Comparison with experimental results 99
  - F.1 Evolution of front positions 99
  - F.2 Variation of Froude number with density ratio 102

G Conclusions 108
H Annex. Numerical scheme 110
H.1 Discretisation in time 110
H.2 Semi-discrete algorithm 112
12 Données supplémentaires non publiées 114
13 Discussion des résultats 114

VI Application aux avalanches 121
1 Justification de l'approche de modélisation 122
1.1 Caractéristiques des avalanches de neige poudreuse 122
1.2 Dynamique des avalanches 122
2 Simulations numériques et exploitation 125
2.1 Conditions des simulations 125
2.2 « Post-traitement » géométrique des résultats numériques 129
3 Validation par comparaison aux expériences dans les conditions de Boussinesq . 131
3.1 Vitesse du front 131
3.2 Croissance du nuage en hauteur et en longueur 134
3.3 Aspect général de l'écoulement 134
4 Cas des fortes différences de densité 136
4.1 Conditions aux limites 136
4.2 Effet du rapport de densité 136
4.3 Influence du nombre de Reynolds 139
4.4 Influence de la pente 139
4.5 Profils de densité et de vitesse 141
5 Conclusion 141

Perspectives 149

A Diffusivité des gaz 151

B Implémentation de la méthode des caractéristiques à l'aide d'un arbre de recherche 153
1 Problématique 153
2 Principe de la localisation par arbre de recherche 154
3 Algorithme de localisation par arbre de recherche 155
3.1 Localisation simple 155
3.2 Localisation selon un segment 155
3.3 Incidence d'un segment sur un pavé 156
4 Arbre de type « noisetier » et coût 157
4.1 Choix de la forme de l'arbre 157
4.2 Coût en place et en temps selon le maillage 157
4.3 Construction de l'arbre 158
4.4 Relations de voisinage dans l'arbre 158

Bibliographie 161

Introduction

Les écoulements gravitaires couvrent d'importants domaines d'intérêt, tant dans l'environnement que pour des problèmes industriels. Ils correspondent au cas où la mise en mouvement du système est due uniquement à la gravité, en partant d'une situation initiale instable. L'exemple canonique est le lâcher de barrage (voir figure 1), où un fluide plus dense que le fluide ambiant est contenu derrière une paroi, au repos jusqu'à l'instant initial où la paroi est supprimée. L'énergie du système est initialement seulement son énergie potentielle, le système étant par ailleurs fermé (ni entrée de fluide, ni source d'énergie).

Selon les propriétés du fluide dense (densité ϱ_d) et du fluide ambiant (plus léger, de densité ϱ_ℓ) considérées, ainsi que la géométrie du problème, l'écoulement évoluera ensuite différemment. Le cas du lâcher d'un barrage d'eau dans un fluide ambiant de densité beaucoup plus faible, comme l'air, et non-miscible, est un problème dont les applications sont aisément concevables, et très anciennement étudié. On peut par exemple citer Ritter [46], qui donna en 1892 une solution analytique des équations de Saint-Venant[1] pour ce cas, quand l'écoulement a lieu sur un plan horizontal. On voit ainsi que, si le courant est alimenté par une retenue de longueur infinie, son front atteint une vitesse limite, $2\sqrt{gH}$, où g est l'accélération de la gravité et H la hauteur du barrage. En l'absence de toute force de freinage (ni frottement à la paroi, ni fluide ambiant), l'existence de cette limite maximale s'explique simplement par l'accroissement de la longueur du courant, et donc par la nécessité d'accélérer du fluide en amont, ce qui absorbe toute l'énergie en régime

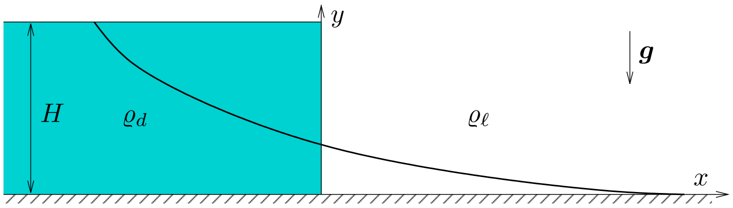


FIG. 1 – *Conditions initiales du problème du lâcher de barrage. La ligne courbe représente l'allure de la surface libre après le lâcher, décrite par Ritter [46] dans le cas inviscide, avec* $\varrho_\ell = 0$.

---

[1] Également dites « d'eau peu profonde »

permanent. Des solutions approchées analytiques ont aussi été proposées pour le cas de pentes en aval du barrage [30]. Dans ce cas, il est approprié de négliger la densité du fluide ambiant, qui n'a pas d'influence sensible sur l'écoulement. Du point de vue numérique, ce type de lâcher de barrage est un écoulement à surface libre, qui est un cas-test fréquemment utilisé pour les codes de calcul. Si l'on résout les équations sans l'hypothèse de Saint-Venant, la méthode Euler-Lagrange Arbitraire (ALE), qui calcule un maillage pour le domaine fluide en chaque instant, peut être utilisée si l'interface demeure stable, et le plus souvent on a recours à des méthodes dites de ligne de niveau, ou *Level-Set*, qui marquent l'interface par le zéro d'une fonction « couleur » advectée par l'écoulement.

Pour des rapports de densité plus faibles, le fluide léger prend une importance dans le développement de l'écoulement. Il induit en effet un freinage, de la même manière que pour le problème de la chute d'un corps, où la vitesse limite est proportionnelle à $\sqrt{\alpha g h}$, avec $\alpha = (\varrho_d - \varrho_\ell)/\varrho_\ell$ et h la dimension du corps en chute libre. Cette limite est due à la force de traînée sur le corps. Cette force de traînée inclut également le cisaillement de la vitesse à l'interface entre le courant de fluide dense et le fluide ambiant, qui peut entraîner des instabilités à cette interface, dite couche de mélange. Selon que les fluides sont ou non miscibles, l'évolution de cette instabilité peut différer ; et de même, le rapport de densité affecte cette évolution.

Le cas où les fluides sont miscibles et de densités très différentes est également riche en applications. L'industrie tout d'abord, emploie des fluides dont les densités peuvent atteindre des valeurs extrêmes. La rupture d'un confinement de gaz lourd, par exemple, peut engendrer des jets, ou des écoulements plus proches du lâcher de barrage, où un courant de fluide dense pénètre dans le domaine du fluide léger, et un courant de fluide léger dans le sens opposé le surmonte. Ces écoulements, dits écoulements d'échange, sont également intéressants pour l'environnement, par exemple en océanographie, à un détroit où deux mers de salinités différentes sont mises en présence, comme la Méditerranée et l'Atlantique à Gibraltar. Enfin, les avalanches de neige poudreuse (aussi appelées avalanches en aérosol), qui ont initialement motivé l'étude menée dans cette thèse, et certains écoulements pyroclastiques, peuvent être approchés comme de tels écoulements.

1 Avalanches de neige poudreuse

Différents types d'avalanches peuvent être identifiés, pour lesquels les comportements de l'écoulement sont très différents. On peut trouver dans [29] une revue d'ensemble de ces différents cas, qui vont des avalanches en plaques aux avalanches de neige poudreuse, qui forment un nuage de particules très fines en suspension.

Du fait de la finesse des particules, et de la grande quantité d'énergie turbulente de l'avalanche, les effets de sédimentation des particules sont négligeables durant la phase d'écoulement, où le nuage de suspension est déjà formé et s'écoule à grande vitesse sur une pente importante : la vitesse de sédimentation sera typiquement de l'ordre du mètre par seconde, tandis que la vitesse turbulente est de l'ordre du quart de la vitesse du front de l'avalanche, qui progresse de 50, voire

100 mètres par seconde. De la même façon, les particules ont une inertie suffisamment faible pour avoir des trajectoires très proches de celles du fluide : au niveau macroscopique, leur seul effet de premier ordre sera donc l'augmentation locale de la densité à l'intérieur du nuage de suspension. On aura donc un comportement de la suspension très proche de celui d'un gaz plus dense que le gaz ambiant (l'air).

2 Les équations de Navier–Stokes pour des fluides miscibles de densités différentes

Les écoulements de mélanges de fluides miscibles avec de fortes différences de densité ont été peu étudiés mathématiquement, et présentent des particularités qui peuvent être déroutantes du fait de l'habitude que nous avons des écoulements homogènes. On va en effet ici introduire un modèle d'écoulement *incompressible*, mais pour lequel *la divergence de la vitesse est non nulle* : par incompressible, on entend en effet qu'il n'y a pas, dans les écoulements considérés, de loi reliant directement la densité à la pression, et il n'y a donc pas de contradiction avec la divergence non nulle.

Cette divergence de la vitesse provient donc, non pas de la compressibilité, mais de variations de densité dues à la miscibilité, qui permet une diffusion des constituants du mélange. Revenons, pour mieux situer ce cas inhabituel, aux équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement de Navier–Stokes :

$$\frac{\partial(\varrho \boldsymbol{u})}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\varrho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) = -\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla} \cdot \tau + \boldsymbol{f} \tag{1a}$$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{1b}$$

Selon les conditions, on peut fermer ce système, soit par une loi d'état qui prescrit la pression en fonction de la densité, et les équations sont alors dites compressibles, soit en supposant que la densité est homogène, ce qui donne les équations de Navier–Stokes incompressible et homogène, où $\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$. On peut aussi simplement supposer que la densité ne varie pas sur une même ligne de courant, c'est-à-dire que la composition du fluide est transportée par le champ de vitesse sans être modifiée. Cette condition s'écrit

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \varrho = 0, \tag{2}$$

et elle donne dans l'équation de conservation de la masse (1b) la même équation $\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$. Ce sont les équations de Navier–Stokes incompressible et non-homogène, qui correspondent à des écoulement immiscibles, comme celui d'un mélange eau-air.

Lorsqu'un mélange est autorisé, c'est-à-dire que les constituants sont miscibles, un terme diffusif apparaît en second membre de l'équation (2). En combinant cette dernière équation avec celle de la conservation de la masse (1b), on obtient donc une divergence non-nulle de $\boldsymbol{u}$, en dépit de l'incompressibilité. Les équations sont alors de la forme :

$$(\mathrm{NS}_\varrho)\left\{\begin{array}{rcl} \varrho\left(\dfrac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\boldsymbol{u} & = & -\boldsymbol{\nabla}p+\boldsymbol{\nabla}\cdot\tau+\boldsymbol{f} \\ \nabla\cdot\boldsymbol{u} & = & -\dfrac{1}{\varrho}\left(\dfrac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\varrho \\ \left(\dfrac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\varrho & = & \varrho\nabla\cdot(K\boldsymbol{\nabla}\varrho) \end{array}\right.$$

Le paragraphe 1 du chapitre I donne une dérivation complète de ce système, en s'appuyant sur des considérations macroscopiques de conservation et les deux hypothèses d'un mélange newtonien d'une part et de l'existence d'une diffusion gouvernée par une loi de Fick d'autre part.

Avec les mêmes hypothèses, plus celle que le mélange n'est pas dégénéré[2], on peut obtenir le même modèle en s'appuyant sur la théorie cinétique, par le biais de moyennes d'ensemble de la vitesse des molécules de chacun des constituants. C'est par exemple ce que font Joseph et Renardy [31] ou Rajagopal et Tao [43].

Enfin, (Pierre-Louis) Lions [35] donne une dérivation de ce modèle à partir des équations de Navier–Stokes compressible, en faisant tendre le nombre de Mach vers zéro.

Ce champ de vitesse non-solénoïdal complique le traitement mathématique et numérique du problème, et plusieurs auteurs, comme par exemple Boyer [10], ont utilisé un système équivalent au système (NS_ϱ), mais basé sur un autre champ de vitesse $\boldsymbol{v}$ et tel que $\nabla\cdot\boldsymbol{v}=0$. On montre le lien entre ces modèles dans le paragraphe 3 du chapitre I, et on expose les raisons de notre choix d'utiliser le champ $\boldsymbol{u}$ au paragraphe 6, après avoir rappelé au paragraphe 4 les principaux résultats d'existence de solution.

Notons aussi que le système (NS_ϱ) peut être étudié dans la limite où la densité ne varie que très faiblement entre les deux fluides du mélange. On montre alors au paragraphe 2 que l'on retrouve en particulier la condition de divergence nulle de la vitesse.

3 Approche numérique

Si les écoulements que nous voulons simuler sont largement subsoniques, ils n'en présentent pas moins des nombres de Reynolds très élevés. Les avalanches de neige poudreuse en particulier sont des écoulements très rapides et de grande dimension, dont le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10^9. Ces valeurs extrêmement élevées ne sont pas reproduites dans les expériences en laboratoire, mais le nombre de Reynolds de 10^4 ou 10^5 de ces expériences reste élevé. On montre que ces valeurs sont les valeurs minimales suffisantes pour approcher les avalanches.

Notre première préoccupation dans le choix d'une méthode numérique pour des simulations directes (sans modèle de turbulence) est donc de pouvoir simuler avec précision des écoulements à ces nombres de Reynolds. Ils sont à la limite des capacités actuelles de calcul en deux dimensions, et notre choix est donc également contraint par la nécessité d'un coût de calcul raisonnable. Or une caractéristique des écoulements gravitaires est qu'ils ont souvent lieu dans un domaine ouvert, et que l'essentiel des transferts d'énergie a lieu dans une couche de mélange très localisée, à l'interface entre deux régions de l'espace occupée chacune par un seul fluide. Dans ces deux régions, on a généralement un écoulement peu perturbé, alors que la couche de mélange présente de très forts gradients de vitesse et de concentration. Il paraît donc capital de pouvoir employer des maillages adaptés, où le pas d'espace sera beaucoup plus fin dans la couche de mélange qu'ailleurs. Cette couche de mélange étant cependant définie par les résultats du calcul, elle n'est connue qu'implicitement et varie au cours du temps : nous avons donc besoin d'une adaptation automatique et dynamique du maillage.

---

[2] C'est-à-dire que dans tout volume élémentaire du domaine, chacune des phases est représentée.

Deux méthodes numériques peuvent répondre efficacement à ces exigences, toutes deux basées sur des maillages généraux, qui peuvent être adaptés à la forme complexe de l'interface. Il s'agit de la méthode dite de Galerkin discontinu, étudiée par Lesaint et Raviart en 1974 [34], et la méthode des caractéristiques en éléments finis, aussi appelée Lagrange–Galerkin, introduite par Bercovier et Pironneau en 1982 [6]. Notre choix a porté sur cette dernière méthode, et nous a permis la résolution de problèmes aussi complexes que ceux des avalanches.

Au chapitre II, nous proposons un algorithme de résolution basé sur cette méthode, qui discrétise le problème de Navier–Stokes non-homogène avec diffusion de masse à l'ordre un en temps, et à l'ordre trois en espace. La méthode des caractéristiques permet d'obtenir au paragraphe 1 un problème semi-discrétisé qui est purement elliptique, avec en particulier un sous-problème proche du problème de Stokes, que nous résolvons au paragraphe 2 par une méthode d'éléments finis mixtes. Le sous-problème de type Stokes présente la particularité que la divergence du champ de vitesse n'est pas nulle, et dépend de l'évolution de la composition du mélange. L'algorithme d'Uzawa (préconditionné par la technique du Lagrangien augmenté), que nous employons pour sa résolution, permet de prendre en compte cette particularité, à condition qu'une solution discrète existe. L'algorithme est donc écrit de façon à assurer cette existence. Le paragraphe 3 explique la méthode d'adaptation automatique du maillage, et le paragraphe 4 décrit l'algorithme qui permet d'utiliser efficacement la méthode des caractéristiques dans les maillages non structurés qui en résultent.

Les outils nécessaires à la preuve de la convergence de cet algorithme sont rassemblés dans le chapitre III, où sont démontrés des résultats qui concernent la méthode de Lagrange–Galerkin qui sont des extensions de ceux présentés par Süli en 1988 [55]. Nous y attirons également l'attention sur un problème délicat d'intégration numérique que fait apparaître la méthode.

Les lemmes ainsi obtenus permettent au chapitre IV de démontrer un théorème de convergence de la solution approchée vers la solution exacte du problème (NS_ϱ). Tout d'abord, nous montrons que l'algorithme admet bien une solution discrète, unique, ce qui n'est pas trivial pour le sous-problème de Stokes lorsque la divergence de la vitesse est imposée non-nulle. Le paragraphe 2 démontre que notre algorithme nous place dans les conditions d'existence de cette solution. Nous pouvons ensuite montrer que la solution obtenue par l'algorithme du chapitre II tend bien vers la solution exacte avec un ordre de convergence optimal (un en temps et trois en espace), sous certaines conditions de régularité et surtout de discrétisation. Ces conditions sont plus restrictives pour certains choix des paramètres du problème, et l'analyse de l'erreur nous permet de proposer des perspectives d'amélioration de l'algorithme qui permettraient de les lever partiellement.

4 Application aux écoulements d'échange et aux avalanches

Les écoulements d'échanges, outre leur intérêt dans des applications environnementales et industrielles, ont l'avantage de ne nécessiter qu'un dispositif assez simple, ce qui a permis à Gröbelbauer *et al.*[24] de mener des expériences d'écoulements avec de fortes différences de densité entre les fluides mélangés, allant jusqu'à $\varrho_d/\varrho_\ell \simeq 20$. Nous avons donc pu valider notre approche en comparant nos simulations numériques avec leurs résultats, les seuls à notre connaissance qui mettent en jeu des écoulements gravitaires de fluides miscibles à forte différence de densité.

Le chapitre V détaille notre approche pour cette validation. En outre, la robustesse de l'algorithme proposé a permis d'aller au-delà des limites rencontrées par l'expérience, poussant les simulations jusqu'à $\varrho_d/\varrho_\ell = 100$, avec un nombre de Reynolds $\mathrm{Re} \simeq 10^5$. Les résultats ainsi obtenus permettent d'analyser l'influence du rapport de densité sur le comportement de l'écoulement.

Pour les écoulements de nuages denses sur des pentes, en revanche, les études expérimentales sont beaucoup plus difficiles, et limitées à de faibles différences de densité ; alors que les avalanches présentent de très fortes différences de densité. Dans ce dernier cas, on compare au chapitre VI les simulations numériques aux résultats expérimentaux de Beghin *et al.*[2] et de Rastello et Hopfinger [45]. En particulier on observe la croissance de la taille du nuage, qui est un phénomène crucial dans la mécanique de ces écoulements.

Les simulations numériques pour de fortes différences de densité permettent d'étudier les mécanismes en jeu dans les avalanches, et de comprendre en quoi ils diffèrent de ceux observés dans les expériences. Les résultats obtenus sont comparés au modèle de Rastello et Hopfinger [45], et permettent aussi de visualiser la structure interne très complexe du nuage.

Chapitre I

Équations de Navier–Stokes non-homogène en présence de diffusion de masse

Ce chapitre passe en revue les aspects tant mécaniques que mathématiques des équations de Navier-Stokes dans le cas d'une densité non-homogène soumise à une diffusion. On suppose que la donnée initiale de la densité est « loin du vide » (c'est-à-dire que $\varrho_0 \geq c > 0$), et que l'écoulement est incompressible, c'est-à-dire que la densité n'est pas directement reliée à la pression. Dans ces conditions, on demeurera loin du vide pour tout instant.

Ces conditions correspondent à celles de l'écoulement d'un mélange de deux fluides miscibles de densités différentes. On écrit les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement en faisant l'hypothèse que le mélange est newtonien (équations de Navier-Stokes non-homogène) et la fermeture du système est donnée par la loi de diffusion de la densité, appelée loi de Fick. Cette loi décrit des flux diffusifs pour chaque constituant dans le sens opposé de son gradient de concentration, avec un coefficient ne dépendant que de la concentration. Ce type de modèle peut être trouvé dans les livres de Joseph et Renardy [31] ou de Rajagopal et Tao [43]. Pour certaines formes des termes de viscosité et de diffusion, ce modèle correspond aux modèles de polluants que l'on trouve chez Antonsev *et al.*[1], pour d'autres à des modèles dérivés pour des problèmes de combustion à faible nombre de Mach donné par Majda [37] et étudié par Embid [19] et Lions [36].

La dérivation qui est présentée dans les paragraphes 1 et 2 repose uniquement sur des considérations macroscopiques de conservation, complétées par les hypothèses d'un mélange newtonien et de diffusion gouvernée par la loi de Fick. Sous les mêmes hypothèses, ce modèle peut aussi être dérivé en partant d'une théorie cinétique, en introduisant deux champs de vitesse distincts, pour chacun des constituants, par une moyenne d'ensemble [31, 43]. Pour définir une vitesse « du mélange », deux pondérations sont envisagées pour combiner ces deux champs de vitesse : par la fraction massique de chaque constituant, définissant le champ $\boldsymbol{u}$ de vitesse du mélange ; ou par sa fraction volumique, définissant $\boldsymbol{v}$. Notre dérivation correspond à la première, qui a l'avantage de ne pas introduire de termes inhabituels dans l'équation de la quantité de mouvement, mais la conservation de la masse, lorsque la densité est autorisée à varier par diffusion sur une ligne de courant, donne pour équation de continuité

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = -\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right)\varrho,$$

avec un second membre non-nul en général. La seconde moyenne volumique, au contraire, donne une équation de continuité $\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0$. Le lien entre $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}$ est explicité dans le paragraphe 3.

Des résultats d'existence et de régularité de solutions faibles pour ce problème sont ensuite donnés au paragraphe 4, en s'attachant aux cas des grandes différences de densité. Le cas des faibles différences de densité (dont on donne les équations au paragraphe 2) est en effet simplement une équation de convection diffusion pour la composition à laquelle sont couplées les équations de Navier–Stokes homogènes incompressibles par le seul biais du terme de gravité.

1 Dérivation des équations

On considère l'écoulement d'un fluide dans un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ dans l'intervalle de temps $[0,T]$. Cet écoulement est décrit par la connaissance de la densité $\varrho(\boldsymbol{x},t)$ et de la vitesse $\tilde{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x},t)$ sur $\Omega \times [0,T]$. Le tilde $\tilde{}$ différenciera des quantités et opérateurs dimensionnels autrement utilisés sous forme adimensionnée.

Soit $\mathscr{V}$ un volume élémentaire fixé de Ω, de surface $\mathscr{S}$, on écrit pour ce volume les lois de la conservation.

1.1 Conservation de la masse

En un instant $\tilde{t} \in [0,T]$, le volume $\mathscr{V}$ contient une masse de fluide égale à $\int_{\mathscr{V}} \varrho \mathrm{d}\mathscr{V}$. La variation de cette masse au cours du temps s'écrit :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{t}}\int_{\mathscr{V}} \varrho \mathrm{d}\mathscr{V} = \int_{\mathscr{V}} \frac{\partial \varrho}{\partial \tilde{t}} \mathrm{d}\mathscr{V}$$

Cette variation est opposée au bilan des flux de matière sortant à travers la surface $\mathscr{S}$:

$$\begin{aligned} -\int_{\mathscr{V}} \frac{\partial \varrho}{\partial \tilde{t}} \mathrm{d}\mathscr{V} &= \int_{\mathscr{S}} \varrho \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}\mathscr{S} \\ &= \int_{\mathscr{V}} \tilde{\nabla} \cdot (\varrho \tilde{\boldsymbol{u}}) \mathrm{d}\mathscr{V} \qquad (3) \end{aligned}$$

où $\boldsymbol{n}$ est la normale sortante de $\mathscr{S}$.

Cette analyse étant valide pour tout volume élémentaire $\mathscr{V}$ de Ω, par passage à la limite on obtient l'équation de continuité :

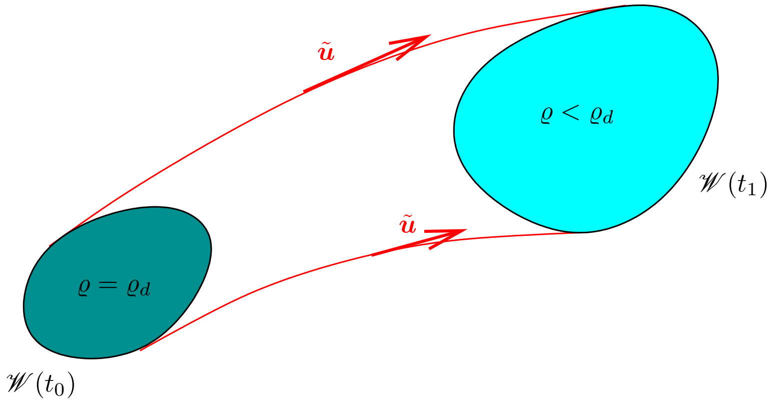


FIG. 2 – *Évolution d'un volume $\mathscr{W}(t)$ entraîné par la vitesse $\mathbf{u}$ entre les instants t_0 et t_1. La composition du mélange dans $\mathscr{W}(t)$ varie au cours du temps sous l'effet de la diffusion au travers de $\partial\mathscr{W}(t)$, ce qui fait varier ϱ.*

$$\begin{aligned} -\frac{\partial\varrho}{\partial\tilde{t}} &= \tilde{\nabla}\cdot(\varrho\tilde{\boldsymbol{u}}) \\ &= \tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\varrho + \varrho\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}} \end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}} = -\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\right)\varrho = -\frac{1}{\varrho}\frac{\mathrm{D}\varrho}{\mathrm{D}\tilde{t}} \tag{4}$$

Remarque 1 (Équation de continuité d'un mélange) .

> *Dans le cadre de l'étude d'écoulement de fluides miscibles de densités différentes, la vitesse du mélange n'est donc* pas solénoïdale, *c'est-à-dire $\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\mathbf{u}} \neq 0$, en dépit de l'incompressibilité de chaque constituant. Supposons en effet un volume $\mathscr{W}(t)$ contenant initialement du fluide dense uniquement, et qui est entraîné par la vitesse $\tilde{\mathbf{u}}$ de l'écoulement (figure 2). Par définition de la vitesse $\tilde{\mathbf{u}}$ dans (3), la masse de $\mathscr{W}(t)$ sera conservée. En effet, puisque les fluides sont miscibles il y a diffusion d'un fluide dans l'autre: à cause de la différence de densité, la mesure du volume $\mathscr{W}(t)$ va augmenter. Cela signifie que $\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\mathbf{u}} \neq 0$.*

Remarque 2 (Équation de continuité et conditions de Boussinesq) .

> *Si on se place par contre dans les conditions dites de Boussinesq de faibles variations de la densité, alors $\frac{1}{\varrho}\frac{\mathrm{D}\varrho}{\mathrm{D}\tilde{t}}$ est très petit devant les variations de la vitesse : donc $\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\mathbf{u}}$ est approximativement nul. (Voir paragraphe 2.)*

1.2 Conservation des constituants

On s'appuie ici essentiellement sur le chapitre 10 de [31].

On suppose que l'écoulement est un mélange de deux constituants, l'un plus dense de masse volumique ϱ_d et l'autre plus léger, de masse volumique ϱ_ℓ. On fait de plus l'hypothèse que c'est un mélange simple, c'est-à-dire que localement, la densité du mélange s'écrit

$$\varrho(\boldsymbol{x}) = \varrho_d \Phi_d(\boldsymbol{x}) + \varrho_\ell \Phi_\ell(\boldsymbol{x})$$

où $\Phi_d + \Phi_\ell \equiv 1$ sont les fractions volumiques (positives) de chaque constituant, donc des quantités locales caractérisant la composition du mélange, tandis que ϱ_d et ϱ_ℓ sont les masses volumiques des fluides *lorsqu'ils sont à l'état pur*, et sont ici des constantes homogènes sur le domaine, puisque nous ne considérons pas de variations de température.

Écrivons le bilan de masse de l'un des constituants, noté i, dans un volume $\mathscr{V}$ fixé :

$$\begin{aligned} -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{t}} \int_{\mathscr{V}} \varrho_i \Phi_i \mathrm{d}\mathscr{V} &= \int_{\mathscr{S}} \varrho_i \boldsymbol{G}_i \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}\mathscr{S} \\ &= \int_{\mathscr{S}} \varrho_i \Phi_i \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}\mathscr{S} + \int_{\mathscr{S}} \varrho_i \tilde{\boldsymbol{q}}_i \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}\mathscr{S} \end{aligned}$$

où $\varrho_i \boldsymbol{G}_i = \varrho_i \Phi_i \tilde{\boldsymbol{u}} + \varrho_i \tilde{\boldsymbol{q}}_i$ est le flux de masse, inconnu *a priori*, du constituant i.

Remarque 3 (Vitesses convective et diffusive) .

> *Il est à noter que même dans une situation de repos sans convection, où la seule évolution est due à la diffusion (par exemple, si l'on a une stratification stable avec du fluide dense en bas et léger en haut), la vitesse $\tilde{\boldsymbol{u}}$ est non nulle. La vitesse $\tilde{\boldsymbol{u}}$ n'est donc pas seulement la vitesse* convective*, elle a aussi une composante* diffusive.

Preuve. Prenons $\mathscr{V}$ le volume fixe correspondant au volume occupé par le fluide dense à l'instant initial (interface non encore diffusée). La diffusion va échanger un même volume de fluide dense et léger au travers de la surface $\partial\mathscr{V}$, et du fait de la différence des masses volumiques, la masse totale de $\mathscr{V}$ va diminuer.

Par conséquent, en appliquant (3), on trouve que $\tilde{\boldsymbol{u}}$ n'est pas identiquement nulle. ■

La loi de Fick gouverne les flux de diffusion d'un fluide dans l'autre sous la forme $\tilde{\boldsymbol{q}}_d = -\mathscr{D}_{d\ell} \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi_d$ et $\tilde{\boldsymbol{q}}_\ell = -\mathscr{D}_{\ell d} \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi_\ell = \mathscr{D}_{\ell d} \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi_d$, où les coefficients de diffusivité $\mathscr{D}_{ij}$ (positifs) peuvent dépendre de la composition locale du mélange, décrite par $\Phi_d = 1 - \Phi_\ell$.

Des bilans de masse des constituants, on obtient deux équations régissant l'évolution de la composition:

$$\frac{\mathrm{D}\Phi_d}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \Phi_d \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = -\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{q}}_d \tag{5a}$$

$$\frac{\mathrm{D}\Phi_\ell}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \Phi_\ell \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = -\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{q}}_\ell \tag{5b}$$

Cependant, on a aussi $\Phi_d = 1 - \Phi_\ell$, ces équations ne sauraient donc être indépendantes: il y a une condition de compatibilité entre les flux $\tilde{\boldsymbol{q}}_d$ et $\tilde{\boldsymbol{q}}_\ell$. En décrivant désormais par le seul paramètre

$\Phi = \Phi_d$ la composition locale du mélange, on obtient cette condition en sommant (5a) et (5b) après les avoir multipliées respectivement par les constantes ϱ_d et ϱ_ℓ :

$$\underbrace{\frac{\mathrm{D}\varrho}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \varrho\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}}}_{=0} = \tilde{\nabla}\cdot\Big[(\varrho_d\mathscr{D}_{d\ell} - \varrho_\ell\mathscr{D}_{\ell d})\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi\Big] \tag{6}$$

On reconnaît dans le membre de gauche la conservation de la masse (4), le membre de droite doit donc valoir zéro. Joseph et Renardy donnent cette condition [31, page 351], et concluent que soit on a $\varrho_d\mathscr{D}_{d\ell}(\Phi) = \varrho_\ell\mathscr{D}_{\ell d}(\Phi) = \varrho_d\mathscr{D}F(\Phi)$, où $\mathscr{D}$ est une diffusivité de référence et F une fonction sans dimension à fixer de la composition locale du mélange (et alors (6) est vérifiée pour toute distribution de Φ), soit Φ vérifie cette équation de compatibilité (6) partout dans le domaine (en plus d'une équation d'évolution (5).) On peut aller un peu plus loin et remarquer que seule la première alternative est viable: en effet, l'équation (6) correspond à imposer sur Φ une condition de compatibilité partout sur le domaine. Par exemple, si $\varrho_d\mathscr{D}_{d\ell} - \varrho_\ell\mathscr{D}_{\ell d}$ est pris non nul, indépendant de Φ, on devra respecter $\Delta\Phi = 0$. Cela revient à imposer que la distribution initiale des constituants Φ_0 soit une fonction potentiel, ce qui n'a pas de raison d'être. On fait donc l'hypothèse suivante :

Hypothèse H1 (Compatibilité des diffusions mutuelles) .

$\varrho_d\mathscr{D}_{d\ell} = \varrho_\ell\mathscr{D}_{\ell d} = \varrho_d\mathscr{D}F(\Phi)$.

On récrit alors l'équation d'évolution de la composition du mélange :

$$\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \Phi\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}} \;=\; \tilde{\nabla}\cdot\Big(\mathscr{D}F(\Phi)\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi\Big) \tag{7}$$

On remarque aussi que la somme de (5a) et (5b) nous donne une équation de continuité sous une autre forme que (4) :

$$\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}} \;=\; -\tilde{\nabla}\cdot\Big(\alpha\mathscr{D}F(\Phi)\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi\Big) \tag{8}$$

Le choix de la fonction $F(\Phi)$ par contre est totalement libre, et doit être fait en faisant appel aux propriétés physiques du mélange étudié, même si on verra au paragraphe 4 qu'il a des conséquences sur l'existence globale de solutions faibles aux équations.

Le choix le plus simple est de prendre $F(\Phi) \equiv 1$, et donc $\mathscr{D}_{d\ell} = \mathscr{D}$, $\mathscr{D}_{\ell d} = (\varrho_d/\varrho_\ell)\mathscr{D}$. C'est le choix qui a été fait dans les simulations numériques présentées dans la suite de cette thèse, en particulier parce que (7) est alors une équation linéaire, qu'on écrit sous forme adimensionnelle:

$$\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t} + \Phi\nabla\cdot\boldsymbol{u} \;=\; \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\Delta\Phi \tag{9}$$

où $\mathrm{ReSc} = UL/\mathscr{D}$, avec U et L une vitesse et une longueur caractéristiques de l'écoulement. Ce nombre est le produit du nombre de Reynolds, $\mathrm{Re} = UL/\nu$ et du nombre de Schmidt $\mathrm{Sc} = \nu/\mathscr{D}$.

Cependant il serait plus approprié pour des mélanges de gaz de choisir $F(\Phi) = 1/(1+\alpha\Phi)$, comme on le montre dans l'annexe A. On obtient alors un terme de diffusivité en $\Delta \log \varrho$, mais le problème devient plus difficile à résoudre numériquement, comme on le montre au chapitre IV.

1.3 Équation de la quantité de mouvement

Elle s'écrit très classiquement :

$$\varrho \frac{\mathrm{D}\tilde{\boldsymbol{u}}}{\mathrm{D}\tilde{t}} = \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \sigma_{\text{tot}} + \varrho \boldsymbol{g} \tag{10}$$

où $\boldsymbol{g}$ est l'accélération de la gravité, et σ_{tot} est le tenseur de Cauchy. Dans le cadre d'un mélange newtonien, ce tenseur se compose d'une partie sphérique, proportionnelle à la pression, et d'une partie déviatrice, associée aux contraintes visqueuses :

$$\sigma_{\text{tot}} = -p\mathbb{I} + 2\mu\tilde{\mathbb{D}}\tilde{\boldsymbol{u}} + \left(\mu' - \frac{2}{3}\mu\right)\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}\mathbb{I} \tag{11}$$

où on a noté $\tilde{\mathbb{D}}(\tilde{\boldsymbol{u}}) = (\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\tilde{\boldsymbol{u}} + \tilde{\boldsymbol{\nabla}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}})/2$, $\mathbb{I}$ la matrice identité, et introduit la pression $\tilde{p}$, la viscosité dynamique μ et la viscosité de dilatation μ'. Cette dernière viscosité est nulle ou peut être négligée dans les cas que nous considérerons dans cette thèse [52, page 67]. La viscosité dynamique au contraire joue un rôle crucial dans le comportement du mélange. On envisage qu'elle puisse être dépendante ou non de la composition locale du mélange, et on écrira $\mu(\Phi) = \eta\Lambda(\Phi)$, où η est une viscosité dynamique de référence et Λ un coefficient sans dimension, dépendant de la composition locale du mélange.

Dans notre cas, l'équation (10) peut donc être récrite:

$$\varrho \frac{\mathrm{D}\tilde{\boldsymbol{u}}}{\mathrm{D}\tilde{t}} = -\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\tilde{p} + \eta\tilde{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \left[\Lambda(\Phi)\left(2\tilde{\mathbb{D}}\tilde{\boldsymbol{u}} - \frac{2}{3}\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}\mathbb{I}\right)\right] + \varrho\boldsymbol{g} \tag{12}$$

Remarque 4 (Choix de la rhéologie $\Lambda(\Phi)$) .

> *Par exemple, le choix Λ indépendant de Φ donne une viscosité dynamique identique dans les fluides dense et léger. Il est connu que c'est un bon choix pour un mélange de deux gaz (voir chapitre V).*
>
> *Le choix d'une viscosité dynamique variant comme la densité $\eta\Lambda(\Phi) \propto \varrho(\Phi)$ conduit à une viscosité cinématique μ/ϱ indépendante de la composition locale.*

Adimensionnement. Les écoulements gravitaires ont ceci de particulier que la quantité de mouvement mise en jeu est due à l'énergie potentielle de la situation initiale. On peut donc définir une vitesse caractéristique intrinsèque à l'écoulement, qui est la vitesse de chute U d'une particule de fluide lourd dans le fluide léger pour une distance de chute L. On aura $U = \sqrt{\alpha g L}$, où $\alpha = (\varrho_d - \varrho_\ell)/\varrho_\ell$ a déjà été introduit plus haut. En bonne logique, on écrit $\varrho = \varrho_\ell(1+\alpha\Phi)$ et on prendra donc comme densité de référence celle du fluide léger ϱ_ℓ.

Avec ces choix, on obtient

$$(1+\alpha\Phi)\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \quad = \quad -\boldsymbol{\nabla} p + \frac{1}{\mathrm{Re}}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Lambda(\Phi)\left(2\mathbb{D}\boldsymbol{u} - \frac{2}{3}\nabla\cdot\boldsymbol{u}\,\mathbb{I}\right)\right] - \frac{1+\alpha\Phi}{\alpha}\boldsymbol{e}_y, \qquad (13)$$

où $\mathrm{Re} = \varrho_\ell UL/\eta$, $\boldsymbol{u} = \tilde{\boldsymbol{u}}/U$, $\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{x}}/L$, $t = \tilde{t}/T = tU/L$, et $p = \tilde{p}/\varrho_\ell U^2$.

Remarque 5 (Nombre de Froude) .

On constate que le nombre de Froude $U/\sqrt{gL}$ *se réduit à* $\mathrm{Fr} = \sqrt{\alpha}$, *puisque l'on utilise la vitesse caractéristique* $U = \sqrt{\alpha g L}$. *En effet, ce choix de* U *correspond à supposer les forces d'inertie de l'ordre des forces de gravité, ce qui est naturel pour les écoulements gravitaires.*

Remarque 6 (La signification des nombres sans dimension) .

Le nombre de Reynolds qui apparaît dans l'équation (13) n'a pas le même sens qu'un nombre de Reynolds mesuré localement dans un écoulement réalisé expérimentalement ou numériquement. Le premier est un nombre de Reynolds de référence, dont il est souhaitable qu'il soit aussi proche que possible de la réalité de l'écoulement (c'est l'enjeu d'un adimensionnement pertinent), tandis que le second donne une indication locale en espace et en temps de l'équilibre effectif des forces d'inertie (ici directement reliées à la gravité) et des forces de dissipation.

Il en va de même pour le nombre de Schmidt.

Remarque 7 (Le nombre de Reynolds selon la rhéologie $\Lambda(\Phi)$ choisie) .

Si l'on se place dans une particule de fluide dense pur, donc avec $\Phi = 1$ *localement, l'équation (13) donne un rapport effectif entre le terme de diffusion* $\nabla\cdot 2\mathbb{D}\boldsymbol{u}$ *et le terme d'inertie* $\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}$ *valant* $\mathrm{Re}_d = (1+\alpha)UL/\Lambda(1)$. *Dans une particule de fluide léger au contraire, on aura un rapport* $\mathrm{Re}_\ell = UL/\Lambda(0)$. *On en déduit qu'en prenant toutes choses identiques par ailleurs, le nombre de Reynolds effectif ne sera indépendant de la composition locale que si* $\Lambda \propto \varrho$.

C'est ce que l'on constatera dans le chapitre V où deux fronts d'intrusions, l'un dense et l'autre léger, développent des instabilités au même stade de leur progression pour une viscosité cinématique constante ($\Lambda \propto \varrho$*), alors que le front léger est stable plus longtemps dans le cas d'une viscosité dynamique constante (*$\Lambda \equiv 1$*).*

1.4 Le système obtenu

Sous forme adimensionnelle, les équations (13), (8) et (7) forment le système suivant:

$$(\mathrm{NS}_\Phi)\left\{\begin{array}{rcl} (1+\alpha\Phi)\dfrac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} & = & -\boldsymbol{\nabla} p + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Lambda(\Phi)\left(2\mathbb{D}\boldsymbol{u} - \dfrac{2}{3}\nabla\cdot\boldsymbol{u}\,\mathbb{I}\right)\right] - \dfrac{1+\alpha\Phi}{\alpha}\boldsymbol{e}_y \\ \nabla\cdot\boldsymbol{u} & = & -\dfrac{\alpha}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot(F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi) \\ \dfrac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t} + \Phi\nabla\cdot\boldsymbol{u} & = & \dfrac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot(F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi) \end{array}\right.$$

Ce système, complété par le choix des fonctions de viscosité Λ et de diffusion F, ainsi que des conditions aux limites et des conditions initiales pour la vitesse $\boldsymbol{u}$ et la composition Φ détermine l'écoulement.

Dans le paragraphe 4, on verra sous quelles hypothèses sur $F(\Phi)$ et $\Lambda(\Phi)$ on est assuré de l'existence globale d'une solution faible. Lorsque ces hypothèses ne sont pas satisfaites, il existe en effet des cas, pourtant *a priori* physiquement pertinents, pour lesquels on ne parvient pas à montrer l'existence de solution faible d'énergie décroissante.

Remarque 8 (Le cas-limite du vide) .

> *Dans le cas où $\alpha \to \infty$, c'est-à-dire où l'on remplace le fluide léger par du vide, notre adimensionnement pour la vitesse perd sa pertinence : la vitesse ne tend en effet pas vers l'infini. On peut cependant faire des simulations numériques avec des nombres α importants (testés jusqu'à 100 environ avec notre puissance de calcul[1]), et qui permettent déjà de donner des résultats quantitatifs pertinents concernant ce passage à la limite (chapitre V).*

Remarque 9 (Valeur du nombre de Schmidt dans les calculs) .

> *Dans tous les cas présentés dans cette thèse, le nombre de Schmidt a été pris égal à 1. Cette valeur est adaptée aux mélanges de gaz* $(\mathrm{Sc} \simeq 0{,}3)$*, mais pas du tout au cas de mélanges d'eau salée et d'eau pure* $(\mathrm{Sc} \simeq 700)$ *ni des avalanches, ou le nombre de Schmidt est très grand.*
>
> *On n'a cependant pas souhaité tenter de reproduire des nombres de Schmidt élevés, étant donné que dans la littérature, la difficulté de ces calculs est soulignée même pour de faibles Reynolds dès que le nombre de Schmidt est plus grand que 1. Dans [59, 60], les auteurs montrent la difficulté de ces calculs pour* $\mathrm{Sc} = 4$*, dans un cas où Φ est un scalaire passif (i.e. $\alpha = 0$) et à relativement faible Reynolds, de l'ordre de* 10^3.

2 Approximation de Boussinesq dans le cas-limite des faibles différences de densité

On considère ici le cas où $\alpha \ll 1$, ce qui fait que les termes en $1 + \alpha\Phi$ sont réduits à 1. Il n'y a cependant pas lieu de changer d'adimensionnement, les arguments du paragraphe 1.3 s'appliquent en effet de la même façon.

On fait l'analyse d'ordre de grandeur de l'équation de la conservation de la masse (4) :

$$\tilde{\nabla}\cdot\,\tilde{\boldsymbol{u}} \;= \sum_{i=1}^{d}\underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_i}}_{\frac{U}{L}} \;= -\underbrace{\frac{\alpha}{1+\alpha\Phi}}_{\alpha}\underbrace{\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi\right)}_{\frac{U}{L}}$$

---

[1] Ordinateur individuel « standard » au moment de cette thèse, de fréquence d'horloge interne 2 GHz et mémoire vive 2 Go.

d'où :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{14}$$

Dans l'équation de la quantité de mouvement (13), on trouve un terme d'ordre $1/\alpha$ dans le terme de gravité. Ce terme est homogène dans le domaine, et correspond à un gradient de *pression hydrostatique*[2] $\boldsymbol{\nabla} p_H = \boldsymbol{e}_y/\alpha$.

$$\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} = -\boldsymbol{\nabla}(p_H + p) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\boldsymbol{\nabla} \cdot (2\Lambda(\Phi)\mathbb{D}\boldsymbol{u}) - \Phi \boldsymbol{e}_y \tag{15}$$

Les équations (14, 15) correspondent à l'approximation de Boussinesq.

3 Lien avec les systèmes de type Kazhikhov–Smagulov

3.1 Vitesse des phases et des volumes

À partir des équations de conservation des constituants (5), on peut obtenir, partout où le mélange n'est pas dégénéré ($\Phi(\boldsymbol{x}) \in]0,1[$), une vitesse $\tilde{\boldsymbol{v}}_i$ pour chaque constituant $i \in \{\ell,d\}$:

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\nabla} \cdot \left(\Phi_i \underbrace{\left[\tilde{\boldsymbol{u}} - \frac{\mathscr{D}_{ij}}{\Phi_i} \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi_i \right]}_{\tilde{\boldsymbol{v}}_i} \right) = 0$$

Par construction, sous l'hypothèse H1, $\tilde{\boldsymbol{v}}_d$ et $\tilde{\boldsymbol{v}}_\ell$ respectent la relation

$$\tilde{\boldsymbol{u}} = \frac{\varrho_d \Phi_d \tilde{\boldsymbol{v}}_d + \varrho_\ell \Phi_\ell \tilde{\boldsymbol{v}}_\ell}{\varrho_d \Phi_d + \varrho_\ell \Phi_\ell},$$

ce qui signifie que $\tilde{\boldsymbol{u}}$ est bien la vitesse du centre de masse du système, sur laquelle les principes de conservation de l'énergie s'appliquent.

Cependant il est intéressant de considérer une autre quantité $\tilde{\boldsymbol{v}}$, définie cette fois comme moyenne *volumique* des vitesses des constituants, qui est elle définie même pour des mélanges dégénérés :

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{v}} &= \Phi_d \tilde{\boldsymbol{v}}_d + \Phi_\ell \tilde{\boldsymbol{v}}_\ell \qquad (16) \\ &= \tilde{\boldsymbol{u}} + \alpha \mathscr{D} F(\Phi) \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi, \end{aligned}$$

car elle a la propriété d'avoir une divergence nulle, d'après l'équation (8). Les systèmes de type Kazhikhov–Smagulov s'écrivent en remplaçant la vitesse physique $\tilde{\boldsymbol{u}}$ par cette vitesse volumique.

---

[2] Un terme de pression hydrostatique peut également être isolé en dehors du cadre des conditions de Boussinesq, cependant il est du même ordre que les autres termes et il n'y a pas de nécessité de lui réserver un traitement particulier.

3.2 Systèmes de type Kazhikhov–Smagulov

On adimensionne $\tilde{\boldsymbol{v}}$ en $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} + \dfrac{\alpha}{\mathrm{ReSc}} F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi$. En injectant dans l'équation d'évolution de la composition $(\mathrm{NS}_\Phi)_3$, on trouve (17c). En revanche, dans l'équation de la quantité de mouvement $(\mathrm{NS}_\Phi)_1$, la récriture est plus compliquée. En négligeant les termes en $1/\mathrm{Re}^2$, Kazhikhov et Smagulov obtiennent :

$$\begin{aligned}
(1+\alpha\Phi)\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\boldsymbol{v} &= -\boldsymbol{\nabla}p - \frac{1+\alpha\Phi}{\alpha}\boldsymbol{e}_y + \frac{1}{\mathrm{Re}}\boldsymbol{\nabla}\cdot(2\Lambda(\Phi)\mathbb{D}\boldsymbol{v}) && \text{(17a)}\\
&\quad + \frac{\alpha}{\mathrm{ReSc}}\left[F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}(F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi)\right]\\
\nabla\cdot\boldsymbol{v} &= 0 && \text{(17b)}\\
\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\Phi &= \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot\left[(1+\alpha\Phi)F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi\right] && \text{(17c)}
\end{aligned}$$

Mais dans le cas où l'on a l'égalité $\dfrac{\alpha}{\mathrm{Sc}}(1+\alpha\Phi)F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi = 2\boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi)$, alors certains termes en $1/\mathrm{Re}^2$ s'annulent, ou s'écrivent sous la forme d'un gradient et sont donc assimilables à un terme de pression supplémentaire. Bresch *et al.* obtiennent ainsi :

$$\begin{aligned}
(1+\alpha\Phi)\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right) &= \frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\boldsymbol{\nabla}\cdot(2\Lambda(\Phi)\mathbb{D}\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi)\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi)\right] && \text{(18a)}\\
&\quad - \boldsymbol{\nabla}\pi - \frac{1+\alpha\Phi}{\alpha}\boldsymbol{e}_y\\
\nabla\cdot\boldsymbol{v} &= 0 && \text{(18b)}\\
\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\Phi &= \frac{2}{\alpha\mathrm{Re}}\Delta\Lambda(\Phi) && \text{(18c)}
\end{aligned}$$

La variable π s'écrit :

$$\pi = p + \frac{2}{\mathrm{Re}}\frac{\partial\Lambda(\Phi)}{\partial t} - \frac{4}{\mathrm{Re}^2}\left(\Lambda(\Phi)\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi)}{1+\alpha\Phi} + \frac{|\boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi)|^2}{1+\alpha\Phi}\right)$$

4 Résultats d'existence et de régularité des solutions

Un premier résultat, d'une grande importance, est la conservation des bornes sur l'inconnue Φ : si la donnée initiale $\Phi(t=0)$ a ses valeurs dans $[0{,}1]$, alors en tout instant $t > 0$, Φ prendra ses valeurs dans $[0{,}1]$.

On montre ce principe du maximum dans les cas des conditions aux limites (23) et (22). Introduisons la fonction $\Phi^-(\boldsymbol{x},t) = \min\{0, \Phi(\boldsymbol{x},t)\}$ et utilisons-la comme fonction-test sur Ω dans l'équation $(\mathrm{NS}_\Phi)_3$. Comme Φ^- vaut zéro en tout point $\boldsymbol{x}$ où $\Phi \neq \Phi^-$, les termes du type $\Phi^-\partial\Phi$

peuvent être remplacés par $\Phi^- \partial \Phi^- = \partial(\Phi^-)^2$, et on obtient :

$$\int_\Omega \frac{\partial(\Phi^-)^2}{\partial t}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_\Omega \left(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}(\Phi^-)^2 + (\Phi^-)^2 \nabla \cdot \boldsymbol{u} - \frac{\Phi^-}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot \left[F(\Phi) \boldsymbol{\nabla} \Phi^- \right] \right) \mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0$$

Ce qui donne, par intégration par partie :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega (\Phi^-)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \int_\Omega F(\Phi)(\boldsymbol{\nabla}\Phi^-)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0$$

Puisque $F(\Phi)$ est une fonction positive, elle est bornée inférieurement par $C \geq 0$, on obtient par intégration en temps entre 0 et t l'inégalité

$$\left\|\Phi^-(\cdot,t)\right\|_{0,\Omega}^2 + \frac{C}{\mathrm{ReSc}} \int_0^t \left\|\boldsymbol{\nabla}\Phi^-(\cdot,\tau)\right\|_{0,\Omega}^2 \mathrm{d}\tau \;\leq\; \left\|\Phi^-(\cdot,0)\right\|_{0,\Omega}^2 \overset{C.I.}{=} 0,$$

et donc Φ^- est identiquement nulle. On procède de même pour la borne supérieure, avec $\Phi^+(\boldsymbol{x},t) = \max\{0, \Phi(\boldsymbol{x},t) - 1\}$.

Les travaux de Kazhikhov et Smagulov, en 1977 [32], ont donné un premier résultat d'existence globale de solutions faibles pour un problème approchant (NS_Φ). Il a été obtenu pour la formulation (17), dans le cas $\Lambda \equiv 1$ et $F(\Phi) = \dfrac{1}{1+\alpha\Phi}$ et des conditions aux limites d'adhérence à la paroi données sur $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} + \dfrac{1}{\mathrm{ReSc}} \dfrac{\alpha}{1+\alpha\Phi} \boldsymbol{\nabla}\Phi$:

$$\boldsymbol{v}_{|\partial\Omega} = 0\,; \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial\boldsymbol{n}}_{|\partial\Omega} = 0, \tag{19}$$

les conditions initiales étant données par

$$\boldsymbol{v}_{|t=0} = \boldsymbol{v}_0\,; \qquad \Phi_{|t=0} = \Phi_0. \tag{20}$$

Il s'énonce comme suit :

Théorème 1 (Kazhikhov–Smagulov) .

> *Si* $\Phi_0 \in H^1(\Omega)$, $0 \leq \Phi_0 \leq 1$ *et* $\boldsymbol{v}_0 \in \boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{f} \in L^p(0,T; L^q(\Omega)^d)$ *avec* $p \in [1;2]$, $q \in [6/5;2]$, $1/p + 3/2q \leq 7/4$, *et que de plus les termes de diffusivité et de viscosité sont tels que* $\Lambda \equiv 1$ *et* $F(\Phi) = \dfrac{1}{1+\alpha\Phi}$, *alors une condition suffisante à l'existence d'une solution généralisée du problème (17,19,20) est que* $\alpha < 2\mathrm{Sc}$.

L'espace $\boldsymbol{H}$ est l'adhérence de l'espace $\left\{\boldsymbol{w} \in (\mathscr{D}(\Omega))^d; \nabla \cdot \boldsymbol{w} = 0\right\}$ pour la norme $(L^2(\Omega))^d$. La preuve en est donnée dans [1], où des résultats d'existence et d'unicité de solution régulière, locale ou globale en temps selon la dimension en espace, sont aussi donnés. La condition imposée sur la différence de densité α et le nombre de Schmidt est, d'un point de vue mécanique, assez restrictive : de nombreux mélanges de gaz, pour lesquels $\mathrm{Sc} \simeq 0.3$, ne la respectent pas (voir chapitre V). En incluant les termes d'ordre 2 dus à la diffusion, mais en prenant par contre une viscosité nulle (équations d'Euler), Beirão da Veiga *et al.* obtiennent dans [3] un résultat d'existence locale de solution forte pour le problème complet.

Lorsque la diffusivité F s'écrit $F(\Phi) = \dfrac{1}{(1+\alpha\Phi)^2}$, et pour une viscosité Λ réguliere dépendant de ϱ, Embid [19] donne un résultat d'existence locale, et Lions [36] un résultat d'existence globale pour des données proches de l'équilibre en dimension 2.

Récemment, Bresch *et al.* ont donné dans [12] le premier résultat d'existence globale de solutions faibles sans hypothèse de petitesse ni sur les coefficients, ni sur les données. Pour ce faire une condition algèbrique de compatibilité entre la viscosité et la diffusivité est nécessaire. Le résultat s'énonce ainsi :

Théorème 2 (Bresch *et al.*)

> *Si* $\Lambda(\Phi)$ *est une fonction de classe* $C^1([0;1])$ *et* $\Lambda(\Phi) \geq c > 0$, $\Phi_0 \in H^1(\Omega)$, $0 \leq \Phi_0 \leq 1$ *et* $\boldsymbol{v}_0 \in \boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{f} \in L^p(0,T;L^q(\Omega)^d)$ *avec* $p \in [1;2]$, $q \in [6/5;2]$, $1/p + 3/2q \leq 7/4$, *alors une condition suffisante à l'existence d'une solution faible globale du problème (18,19,20) est que*
>
> $$\boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi) = \frac{\alpha}{2\mathrm{Sc}}(1+\alpha\Phi)F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi. \tag{21}$$

Ce résultat couvre par exemple, pour toutes différences de densité et valeurs du nombre de Reynolds, les mélanges de fluides ayant une viscosité cinématique ν indépendante de la composition, un coefficient de diffusion $F(\Phi) = \dfrac{1}{1+\alpha\Phi}$, ainsi qu'un nombre de Schmidt à une valeur physiquement pertinente (pour des mélanges de gaz) de $1/2$. Il ne couvre par contre pas le cas où c'est la viscosité dynamique $\mu = \nu/\varrho$ qui demeure constante.

L'étude mathématique des problèmes de ce type présente encore de nombreuses questions ouvertes, et, au-delà, la compréhension des raisons physiques de ces difficultés serait d'un grand secours pour mieux les appréhender.

5 Conditions aux limites

Une limite des résultats mathématiques donnés ci-dessus concerne les conditions aux limites (19). En effet, on a vu que le champ de vitesse moyennée en volume $\boldsymbol{v}$ différait du champ de vitesse $\boldsymbol{u}$, auquel les principes de conservation s'appliquent,

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} + \frac{\alpha}{\mathrm{ReSc}}F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi.$$

Cette différence n'a pas de raison de s'annuler aux bords, et donc imposer des conditions aux limites sur $\boldsymbol{v}$ n'est pas équivalent à les poser sur $\boldsymbol{u}$:

$$\boldsymbol{u}_{|\partial\Omega} = 0\,; \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial\boldsymbol{n}}_{|\partial\Omega} = 0. \tag{22}$$

D'autre part, il n'y a aucun résultat concernant les conditions aux limites de glissement parfait

$$\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n}_{|\partial\Omega} = 0\,; \qquad (\sigma\cdot\boldsymbol{n})_{\mathrm{t}} = \boldsymbol{0}\,; \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial\boldsymbol{n}} = 0, \tag{23}$$

où on a noté $(\sigma \cdot \boldsymbol{n})_\mathrm{t}$ les contraintes tangentielles à la paroi $\sigma \cdot \boldsymbol{n} - [(\sigma \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{n}]\boldsymbol{n}$, et $\sigma = \Lambda(\Phi)\left(2\mathbb{D}\boldsymbol{u} - \frac{2}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u}\,\mathbb{I}\right)$. On peut noter au passage que, lorsque $\nabla \cdot \boldsymbol{u} \neq 0$, cette condition de glissement n'entraîne pas la nullité de la dérivée normale de la composante tangentielle de la vitesse sur la frontière : $\frac{\partial \boldsymbol{u}_\mathrm{t}}{\partial \boldsymbol{n}} \neq 0$. On peut le constater dans les résultats numériques, figures 52 à 55, au chapitre VI.

6 Choix d'un modèle pour les simulations numériques

Le choix habituel d'auteurs précédents entre les équations (NS_Φ) écrites en terme du champ de vitesse $\boldsymbol{u}$ et le modèle récrit pour le champ de vitesse $\boldsymbol{v}$ était en faveur de ce dernier, parce que le champ de vitesse est alors à divergence nulle. Par exemple, Boyer [10] présente des simulations numériques avec ce modèle (avec une diffusion de la densité qui suit un potentiel chimique de Cahn-Hilliard à la place de notre loi de Fick). Des arguments d'analyse d'ordre de grandeur pour certaines configurations d'écoulement permettent de négliger les termes croisés qui apparaissent dans l'équation de la quantité de mouvement.

Outre la présence de ces termes croisés, les questions concernant les conditions aux limites sont l'argument qui a déterminé pour nous le choix d'un modèle écrit en terme de la vitesse $\boldsymbol{u}$ du mélange. En effet, on a vu au paragraphe 4 qu'imposer des conditions d'adhérence sur $\boldsymbol{v}$ n'est pas équivalent à les imposer sur $\boldsymbol{u}$. Or c'est pour $\boldsymbol{u}$ que ces conditions ont un sens en mécanique.

Nous avons donc choisi d'utiliser le système (NS_Φ) avec soit les conditions d'adhérence (22) soit les conditions de glissement (23) dans les simulations numériques présentées aux chapitres V et VI. L'étude numérique faite aux chapitres III et IV est restreinte aux conditions d'adhérence (22).

Chapitre II

Discrétisation et algorithme de résolution

L'objet de ce chapitre est d'introduire une discrétisation du système (NS_Φ) de la page 23, et d'élaborer un algorithme permettant de le résoudre numériquement. Avec les conditions aux limites (22) on peut ainsi écrire le problème :

Problème (24)

Étant donnés $\boldsymbol{u}_0$ et Φ_0, trouver $\boldsymbol{u}$, Φ et p tels que

$$\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t} + \Phi\,\nabla\cdot\boldsymbol{u} - \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot\left(F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi\right) = 0\,; \tag{24a}$$

$$(1+\alpha\Phi)\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} - \frac{1}{\mathrm{Re}}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Lambda(\Phi)\left(2\mathbb{D}\boldsymbol{u} - \frac{2}{3}\nabla\cdot\boldsymbol{u}\,\mathbb{I}\right)\right] + \boldsymbol{\nabla}p = -\frac{1+\alpha\Phi}{\alpha}\boldsymbol{e}_y\,; \tag{24b}$$

$$-\nabla\cdot\boldsymbol{u} = \frac{\alpha}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot\left(F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi\right)\,; \tag{24c}$$

$$\boldsymbol{u}_{|\partial\Omega} = 0\,; \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial\boldsymbol{n}}_{|\partial\Omega} = 0\,; \tag{24d}$$

$$\boldsymbol{u}_{|t=0} = \boldsymbol{u}_0\,; \qquad \Phi_{|t=0} = \Phi_0. \tag{24e}$$

Deux sous-problèmes se dégagent de la structure de ce système, pour lesquels des méthodes numériques efficaces sont connues. L'équation (24a) est une équation de convection-diffusion, et on reconnaît dans (24b, 24c) des équations similaires à celles de Navier–Stokes dans le cas incompressible et non-homogène. Ces deux sous-problèmes sont couplés entre eux par des termes non-linéaires. Nous allons les découpler par une méthode itérative sur les instants de temps, ce qui va permettre de résoudre séparément chacun de ces sous-problèmes (voir paragraphe 1.4).

Chacun de ces sous-problèmes présente dans sa structure des termes elliptiques, qui correspondent à la diffusion de la masse dans (24a) et de la quantité de mouvement (viscosité) dans (24b-24c) ; et des termes de transport, linéaires pour (24a) et non-linéaires pour (24b-24c). L'équilibre entre l'ordre de grandeur de ces termes est gouverné par des nombres sans dimensions, les nombres de Reynolds Re et de Schmidt Sc. On a dit au chapitre I, remarque 9 page 24, que nous nous restreignons à un nombre de Schmidt $\mathrm{Sc} = 1$. Le nombre de Reynolds, par contre, est élevé dans les applications que nous voulons considérer. Cela signifie donc que les termes de transport seront en général prépondérants, et que nous devons pouvoir en faire une bonne approximation. Mais par ailleurs, du fait de la viscosité non nulle, les conditions des écoulements que nous voulons simuler sont génératrices de régions dans lesquelles des gradients très importants apparaîssent : gradient de vitesse dans les couches-limites des parois, et gradients de vitesse et de concentration dans les couches de mélange entre des régions où la concentration est homogène. C'est dans ces régions que se produit la dissipation d'énergie qui gouvernera essentiellement la mécanique de l'écoulement, et ce sont les termes de diffusion qui tendent alors à devenir prépondérants : il nous faudra faire un calcul très précis de cette dissipation pour espérer reproduire les phénomènes physiques.

Comme nous l'exposons dans l'introduction, ces conditions guident notre choix d'une méthode numérique, et nous avons choisi d'utiliser la méthode des caractéristiques couplée à une méthode d'éléments finis. La méthode des caractéristiques permet une discrétisation directe et efficace des termes de transport dans le cadre de la discrétisation en temps. Elle nous permet au paragraphe 1 d'aboutir à un problème semi-discrétisé en temps (29), qui est cette fois de type elliptique uniquement : en effet, elle introduit naturellement une séparation entre la résolution des termes de transport et celle des termes de diffusion. Cette semi-discrétisation en temps conduit à un algorithme découplé, qui fait apparaître deux sous-problèmes standards : l'un de type Helmholtz non-homogène provenant de (24a), l'autre de type Stokes généralisé provenant de (24b, 24c). La méthode des éléments finis pourra donc être employée pour résoudre ce problème (29), en utilisant une méthode d'adaptation automatique de maillages, qui nous permettra de capturer les couches limites et les zones de forte dissipation d'énergie.

1 Discrétisation en temps : les termes de transport

On introduit ici formellement la transformation des caractéristiques, qui va permettre une discrétisation directe des termes de transport. On supposera dans cette partie que cette transformation vérifie les propriétés nécessaires pour l'utilisation que nous en faisons, la justification et des estimations d'erreur pour les approximations seront données dans le paragraphe 2 du chapitre III.

Cependant, le choix de la discrétisation va conditionner la possibilité de mener au chapitre IV une estimation *a priori* de l'erreur commise dans l'approximation de la solution, et pour certains choix, l'existence même d'une solution au problème discret ne pourra être démontrée : le paragraphe 1.3 donne les raisons de ces difficultés et explique notre choix de discrétisation.

1.1 Courbes caractéristiques

Dans la description eulérienne de l'écoulement, les termes de transport apparaissent sous la forme de dérivées matérielles $\left(\dfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right)$ des inconnues de composition du mélange Φ et de

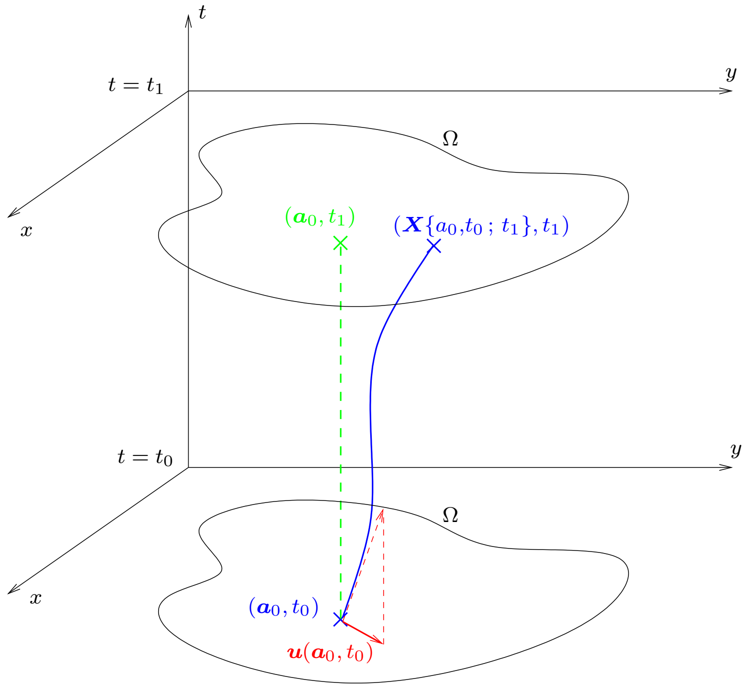

t
$t = t_1$
y
x
Ω
$(\boldsymbol{a}_0, t_1)$
$(\boldsymbol{X}\{a_0,t_0\,;\,t_1\}, t_1)$
$t = t_0$
y
x
Ω
$(\boldsymbol{a}_0, t_0)$
$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{a}_0, t_0)$

FIG. 3 – *La courbe caractéristique* $t \mapsto (\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\},t)$ *représentée dans l'espace temps* $\Omega \times [t_0,t_1]$*. En rouge, sa tangente* $(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{a}_0,t_0),1)$ *en* $(\boldsymbol{a}_0,t_0)$.

vitesse $\boldsymbol{u}$. Physiquement, ces dérivées correspondent aux variations temporelles des quantités Φ et $\boldsymbol{u}$ pour un même volume élémentaire de fluide : puisque ce volume élémentaire se déplace au cours du temps à la vitesse $\boldsymbol{u}$, cette vitesse apparaît dans la dérivée.

La description lagrangienne de l'écoulement est une alternative à cette représentation qui simplifie l'expression de la dérivée matérielle : plutôt que d'utiliser un repère fixe au cours du temps, comme pour la description eulérienne, on décrit le domaine Ω par la position $\boldsymbol{a} = (a,b,c)^T \in \mathbb{R}^3$ que les éléments de fluide qui le composent occupent à un instant initial t_0. Si on note $\hat{\Phi}(\boldsymbol{a}_0,t)$ la composition d'un volume élémentaire occupant la position $\boldsymbol{a}_0$ à l'instant t_0, la variation pour ce volume sera simplement $\partial\hat{\Phi}/\partial t$.

Pour relier $\hat{\Phi}$ et Φ, il faut considérer les trajectoires engendrées par le champ de vitesse $\boldsymbol{u}$. On peut décrire par une équation intégrale la trajectoire $t \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\}$ d'un élément de fluide dans le repère eulérien passant par un point $\boldsymbol{a}_0$ au temps t_0 :

$$\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\} = \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\},t)\mathrm{d}t \tag{25}$$

La figure 3 représente cette courbe. Le paragraphe 2.1 du chapitre III donne les conditions sous lesquelles elle est bien définie.

On a, par définition de $\hat{\Phi}$, $\hat{\Phi}(\boldsymbol{a}_0,t) = \Phi(\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\},t)$, et on obtient par dérivation de la fonction composée:

$$\frac{\partial\hat{\Phi}}{\partial t}(\boldsymbol{a}_0,t) = \frac{\partial\Phi(\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\},t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\Phi\right](\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\},t) \tag{26}$$

La dérivée matérielle peut donc être remplacée par la dérivée partielle d'une fonction composée par $\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{a}_0,t_0;t\}$, qui est appelée courbe caractéristique de l'opérateur de dérivée matérielle. C'est ce constat qui fonde la méthode des caractéristiques et permet l'intégration des termes de transport, en calculant les courbes caractéristiques d'abord, puis en discrétisant cette dérivée composée par une méthode classique.

1.2 Approximation des courbes caractéristiques

On introduit maintenant une partition $\{t_m = m \times \delta t,\ m = 0...M\}$ de l'intervalle de temps [0,T], pour $M \in \mathbb{N}^*$ et $\delta t = T/M$. Par récurrence, on suppose connues des approximations $\boldsymbol{u}^m$ et Φ^m des inconnues du problème (24) au temps t_m, et on veut calculer une approximation $\boldsymbol{X}^m$ de $\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ qui donne la position qu'occupait au temps t_m, un élément de fluide situé en $\boldsymbol{x}$ à l'instant t_{m+1}. Cette approximation nous permettra au paragraphe 1.4 d'obtenir des approximations $\boldsymbol{u}^{m+1}$ et Φ^{m+1} au temps t_{m+1} des inconnues du problème (24).

On utilise la méthode de Runge-Kutta :

$$\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} \simeq \boldsymbol{x} - \delta t\boldsymbol{u}\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t_{m+1}),t_{m+1/2}\right)$$

Dans notre cas, la vitesse $\boldsymbol{u}$ est une inconnue du problème, et on doit donc calculer l'approximation $\boldsymbol{X}^m$ de $\boldsymbol{X}$ en n'utilisant que cette donnée :

$$\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} := \boldsymbol{x} - \delta t\boldsymbol{u}^m\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}^m(\boldsymbol{x})\right)$$

On étudiera au paragraphe 2.3 du chapitre III l'ordre de précision de cette discrétisation.

1.3 Spécificité des problèmes à divergence prescrite

La nouveauté dans le problème (24) est le second membre de l'équation (24c), qui est nul dans le cas classique du problème de Stokes. Des travaux théoriques, comme ceux de Girault et Raviart [23] et de Brezzi et Fortin [13] sont présentés dans le cas général, cependant nous ne connaissons pas d'exemples d'implémentations dans ce cas.

Introduisons la variable intermédiaire χ, qui va représenter ce second membre. On a déjà noté au chapitre I, page 21 qu'il existe deux écritures possibles pour χ, obtenues en combinant les équations (24a) et (24c) :

$$\chi = \frac{\alpha}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot (F(\Phi) \boldsymbol{\nabla} \Phi) \tag{27a}$$

$$= \frac{\alpha}{1+\alpha\Phi} \frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t} \tag{27b}$$

Ces deux écritures sont strictement équivalentes pour le problème continu. Cependant, la discrétisation en temps rompt cette équivalence et introduit une différence de l'ordre de l'erreur de discrétisation entre ces deux écritures. Or, une condition nécessaire à l'existence d'une solution, qu'elle soit continue ou discrète, du sous-problème de type Stokes (24b,24c) est que

$$\int_\Omega \chi \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega} \, \mathrm{d}s. \tag{28}$$

Cette condition se trouve facilement en appliquant le théorème de la divergence, et est une condition nécessaire et suffisante d'appartenance de χ à l'image de l'opérateur divergence[1]. L'approximation χ^m de χ que nous calculerons doit donc se conformer strictement à cette condition, c'est-à-dire que l'erreur de discrétisation ne doit pas affecter cette compatibilité. On constate que c'est bien le cas si l'on emploie l'écriture (27a), puisque χ sera alors évidemment dans l'image de l'opérateur divergent.

Cependant, avec cette écriture (27a), nous ne parvenons pas à obtenir d'estimation d'erreur a priori pour l'approximation χ^m de χ dans $L^2(\Omega)$. L'écriture fait en effet intervenir des gradients, or on ne contrôle pas le gradient de χ^m.

La seconde écriture (27b) ne présente pas ce problème, et l'on peut obtenir facilement une estimation L^2 de l'erreur (paragraphe 3.2, chapitre IV). Mais alors on a $\int_\Omega \chi^m \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} - \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{u}^m \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega} \, \mathrm{d}s$ de l'ordre de l'erreur numérique. Nous proposons donc de projeter le résultat obtenu par (27b) sur l'image de l'opérateur discret de la divergence. Cette étape de projection se fait avec la même précision que les autres calculs, comme on le montre au paragraphe 3.2 du chapitre IV.

1.4 Semi-discrétisation en temps

Avec l'aide de l'équation (26) et en utilisant les courbes caractéristiques approchées, on discrétise au premier ordre entre deux instants consécutifs t_m et t_{m+1} la dérivée matérielle d'une fonction f définie sur Ω, par une méthode d'Euler implicite :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) f(\boldsymbol{x}, t_{m+1}) \simeq \frac{1}{\delta t}(f(\boldsymbol{x}, t_{m+1}) - f(\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x}, t_{m+1}; t_m\}, t_m))$$

quelque soit $\boldsymbol{x}$ dans Ω. Au paragraphe 2.1 du chapitre III, on donne les raisons du choix de cette discrétisation. En particulier, pour que cette discrétisation soit correcte, il faut que $\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x}, t_{m+1}; t_m\}$ soit un point de Ω. Cette propriété et d'autres propriétés de la transformation $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x}, t_{m+1}; t_m\}$ nécessaires à l'analyse numérique de la méthode sont démontrées, d'abord pour la transformation exacte $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ au paragraphe 2.2 de ce même chapitre, puis pour son approximation $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ au paragraphe 2.4.

---

[1] Bien entendu, cette image est définie pour un espace de définition donné, et il est nécessaire d'étudier la divergence sur les espaces discrets, voir le paragraphe 2.1.2 du chapitre IV

Avec l'aide de cette discrétisation de la dérivée matérielle, on obtient une version semi-discrétisée du problème (24), où n'apparaissent plus de dérivées en temps :

Problème (29)

Étant donnés Φ^m, $\boldsymbol{u}^m$ et la transformation $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$, trouver Φ^{m+1} tel que

$$\frac{1}{\delta t}\Phi^{m+1} - \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot\left(F(\Phi^m)\boldsymbol{\nabla}\Phi^{m+1}\right) = \frac{1}{\delta t}\Phi^m \circ \boldsymbol{X}^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \Phi^m\nabla\cdot\boldsymbol{u}^m\,, \tag{29a}$$

avec la condition aux limites $\dfrac{\partial\Phi^{m+1}}{\partial\boldsymbol{n}}_{|\partial\Omega} = 0$. Calculer

$$\Gamma^{m+1} = \frac{\alpha}{\delta t}\left(\Phi^{m+1} - \Phi^m \circ \boldsymbol{X}^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\right), \tag{29b}$$

et sa projection sur l'image de l'opérateur divergence

$$\chi^{m+1} = \Gamma^{m+1} - \frac{1}{|\Omega|}\left(\int_\Omega \Gamma^{m+1}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)\mathbb{1}. \tag{29c}$$

Puis trouver $(\boldsymbol{u}^{m+1},p^{m+1})$ tels que

$$\frac{1+\alpha\Phi^{m+1}}{\delta t}\boldsymbol{u}^{m+1} - \frac{1}{\mathrm{Re}}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Lambda(\Phi^{m+1})\left(2\mathbb{D}\boldsymbol{u}^{m+1} - \frac{2}{3}\nabla\cdot\boldsymbol{u}^{m+1}\,\mathbb{I}\right)\right] + \boldsymbol{\nabla}p^{m+1} \tag{29d}$$

$$= \frac{1+\alpha\Phi^{m+1}}{\delta t}\boldsymbol{u}^m \circ \boldsymbol{X}^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \frac{1+\alpha\Phi^{m+1}}{\alpha}\boldsymbol{e}_y\,;$$

$$-\nabla\cdot\boldsymbol{u}^{m+1} = \frac{\alpha}{\delta t}(\Phi^{m+1} - \Phi^m \circ \boldsymbol{X}^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\})\,, \tag{29e}$$

avec la condition aux limites $\boldsymbol{u}^{m+1}_{|\partial\Omega} = 0$.

On remarque que notre choix de discrétisation en temps permet de résoudre successivement et indépendamment l'équation (29a), puis le sous-problème de type Stokes (29d, 29e).

2 Discrétisation en espace : les termes de diffusion

Après discrétisation en temps par la méthode des caractéristiques, le problème (29) se compose de deux sous-problèmes elliptiques, que l'on propose de résoudre par une méthode d'éléments finis. Pour cela, on écrit au paragraphe 2.1 une formulation variationnelle de (29), on introduit au paragraphe 2.2 des espaces discrets et on donne l'algorithme de résolution au paragraphe 2.3.

2.1 Formulation variationnelle

Pour alléger un peu les notations, on note $\bar{F} = \dfrac{1}{\mathrm{ReSc}} F$ et $\bar{\Lambda} = \dfrac{1}{\mathrm{Re}} \Lambda$ dans la suite.

Introduisons les espaces fonctionnels suivants :

$$\begin{aligned}
W &= H^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega) \\
\boldsymbol{X} &= [H^1(\Omega)]^d \\
\boldsymbol{X}(\boldsymbol{g}) &= \left\{ \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}, \boldsymbol{v}_{|\partial\Omega} = \boldsymbol{g} \right\} \\
Q &= L^2(\Omega) \\
Q_0 &= \left\{ q \in Q, \int_\Omega q \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0 \right\} \\
\boldsymbol{V}(\chi) &= \{ \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}, \nabla \cdot \boldsymbol{v} = -\chi \}
\end{aligned}$$

On définit de plus les formes bilinéaires :

$$\begin{aligned}
a(\Phi;\, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) &= 2 \left(\bar{\Lambda}(\Phi) \mathbb{D}\boldsymbol{u}, \mathbb{D}\boldsymbol{v} \right) - \frac{2}{3} \left(\nabla \cdot \boldsymbol{u}, \nabla \cdot \boldsymbol{v} \right) & \qquad \forall (\Phi, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) \in W \times \boldsymbol{X} \times \boldsymbol{X} \\
b(\boldsymbol{v}, q) &= - \left(\nabla \cdot \boldsymbol{v}, q \right) & \qquad \forall (\boldsymbol{v}, q) \in \boldsymbol{X} \times Q
\end{aligned}$$

On cherche une solution faible $(\Phi^{m+1}, \boldsymbol{u}^{m+1}, p^{m+1}) \in W \times \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \times Q_0$ au problème (29), écrit sous forme variationnelle.

Problème (30)

Trouver $\Phi^{m+1} \in W$ tel que :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\delta t} \left(\Phi^{m+1}, \psi \right) + \left(\bar{F}(\Phi^m) \boldsymbol{\nabla} \Phi^{m+1}, \boldsymbol{\nabla} \psi \right) \\
&\qquad = \frac{1}{\delta t} \left(\Phi^m \circ \boldsymbol{X}^m\{\cdot, t_{m+1}; t_m\}, \psi \right) - \left(\Phi^m \chi^m, \psi \right) \qquad \forall \psi \in W \qquad \text{(30a)}
\end{aligned}$$

Calculer

$$\Gamma^{m+1} = \frac{\alpha}{\delta t} \left(\Phi^{m+1} - \Phi^m \circ \boldsymbol{X}^m\{\cdot, t_{m+1}; t_m\} \right), \qquad \text{(30b)}$$

et sa projection sur l'image de l'opérateur divergence

$$\chi^{m+1} = \Gamma^{m+1} - \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_\Omega \Gamma^{m+1} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \right) \mathbb{1}. \qquad \text{(30c)}$$

Trouver $(\boldsymbol{u}^{m+1}, p^{m+1}) \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \times Q_0$ tels que :

$$\left(\frac{1+\alpha\Phi^{m+1}}{\delta t}\boldsymbol{u}^{m+1}, \boldsymbol{v}\right) + a(\Phi^{m+1}; \boldsymbol{u}^{m+1}, \boldsymbol{v}) + b(\boldsymbol{v}, p^{m+1})$$
$$= \left(\frac{1+\alpha\Phi^{m+1}}{\delta t}\boldsymbol{u}^{m} \circ \boldsymbol{X}^{m}\{\cdot, t_{m+1}; t_m\} - \frac{1+\alpha\Phi^{m+1}}{\alpha}\boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{v}\right) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \tag{30d}$$

$$b(\boldsymbol{u}^{m+1}, q) = \left(\chi^{m+1}, q\right) \qquad \forall q \in Q \tag{30e}$$

2.2 Discrétisation éléments finis

Le sous-problème de Stokes (30d, 30e) restreint nos choix de discrétisation : en effet, il nous faut respecter la condition de compatibilité de Babuška–Brezzi entre la discrétisation de la vitesse et celle de la pression pour éviter l'apparition de modes parasites de pression, c'est-à-dire choisir $\boldsymbol{X}_h$ et Q_h tels qu'il existe une constante k_b indépendante de h et

$$\sup_{\boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h} \frac{\int_\Omega q_h \nabla \cdot \boldsymbol{v}_h \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{v}_h\|_{1,\Omega}} \geq k_b \|q_h\|_{L^2(\Omega)/\mathbb{R}} \,. \tag{31}$$

L'élément fini de Taylor-Hood [28] respecte cette condition [5, 56] et présente un bon compromis entre ordre d'approximation et simplicité de mise en œuvre. Il consiste à prendre un champ de vitesse continu, quadratique par élément, et un champ de pression continu également, affine par morceaux. La discrétisation pour l'inconnue Φ n'est pas contrainte, et nous l'avons approchée de la même façon que la vitesse, ainsi que Γ et χ.

Sur une triangulation $\mathscr{T}_h$ du domaine Ω, supposé polygonal, les espaces d'approximation sont donc définis par

$$\begin{aligned} W_h &= \left\{ f_h \in C^0(\Omega), f_{h|_K} \in \mathscr{P}_2(K), \forall K \in \mathscr{T}_h \right\} \subset W, \\ Q_h &= \left\{ f_h \in C^0(\Omega), f_{h|_K} \in \mathscr{P}_1(K), \forall K \in \mathscr{T}_h \right\} \subset Q, \\ \boldsymbol{V}_h(\chi_h) &= \{ \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h, b(\boldsymbol{v}_h, q_h) = (\chi_h, q_h), \forall q_h \in Q_h \} \end{aligned}$$

où $\mathscr{P}_n(K)$ est l'espace des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à n définies sur K.

2.3 Algorithme de résolution

On cherche à chaque pas de temps t_m une approximation de $\boldsymbol{u}^m$, p^m et Φ^m dans les espaces d'éléments finis.

Algorithme (32)

Initialisation : Pour $m = 0$,

Fixer Φ_h^0, $\boldsymbol{u}_h^0$ et χ_h^0 projections de Φ_0, $\boldsymbol{u}_0$ et $\nabla \cdot \boldsymbol{u}_0$ sur W_h, $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$ et W_h respectivement.

Récurrence : Pour $0 \leq m \leq M-1$, connaissant $\boldsymbol{u}_h^m$ et Φ_h^m,

- **Étape 1 :** Calculer $\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}$ par

$$\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t \boldsymbol{u}_h^m \left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})\right). \tag{32a}$$

- **Étape 2 :** Trouver $\Phi_h^{m+1} \in W_h$,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\delta t}\left(\Phi_h^{m+1}, \psi_h\right) + \left(\bar{F}(\Phi_h^m)\boldsymbol{\nabla}\Phi_h^{m+1}, \boldsymbol{\nabla}\psi_h\right) \\ &\qquad = \frac{1}{\delta t}\left(\Phi_h^m \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}, \psi_h\right) - \left(\Phi_h^m \chi_h^m, \psi_h\right), \quad \forall \psi_h \in W_h. \end{aligned} \tag{32b}$$

- **Étape 3 :** Calculer $\Gamma_h^{m+1} \in W_h$,

$$\Gamma_h^{m+1} = \frac{\alpha}{\delta t}\left(\Phi_h^{m+1} - \Phi_h^m \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\right). \tag{32c}$$

- **Étape 4 :** Calculer $\chi_h^{m+1} \in W_h$,

$$\chi_h^{m+1} = \Gamma_h^{m+1} - \frac{1}{|\Omega|}\left(\int_\Omega \Gamma_h^{m+1}\, \mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)\mathbb{1}. \tag{32d}$$

- **Étape 5 :** Résoudre par la méthode du Lagrangien augmenté le sous-problème de Stokes pour trouver $\boldsymbol{u}_h^{m+1} \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}_h(\chi_h^{m+1})$ et $p_h^{m+1} \in Q_{0,h}$,

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1+\alpha\Phi_h^{m+1}}{\delta t}\boldsymbol{u}_h^{m+1}, \boldsymbol{v}\right) + a(\Phi_h^{m+1};\boldsymbol{u}_h^{m+1},\boldsymbol{v}_h) + b(\boldsymbol{v}_h,p_h^{m+1}) \\ &\qquad = \left(\frac{1+\alpha\Phi_h^{m+1}}{\delta t}\boldsymbol{u}_h^m \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \frac{1+\alpha\Phi_h^{m+1}}{\alpha}\boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{v}_h\right), \quad \forall \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}); \end{aligned} \tag{32e}$$

$$b(\boldsymbol{u}_h^{m+1},q_h) = \left(\chi_h^{m+1}, q_h\right) \qquad \forall q_h \in Q_h. \tag{32f}$$

Une première remarque concerne l'initialisation, qui demande de connaître $\boldsymbol{u}_0$ et Φ_0 tels que $\boldsymbol{u}_0 \in \boldsymbol{V}(\chi_0)$, où $\chi_0 = \dfrac{\alpha}{\mathrm{ReSc}}\nabla \cdot [F(\Phi_0)\boldsymbol{\nabla}\Phi_0]$. Dans les cas non-triviaux, $\boldsymbol{V}(\chi_0)$ n'est pas un espace vectoriel mais un espace affine, et par exemple le choix $\boldsymbol{u}_0 = 0$ n'est pas possible. En revanche, on peut se souvenir, paragraphe 3 du chapitre I, que $\boldsymbol{u}$ se décompose en une partie $\boldsymbol{v}$ dans $\boldsymbol{V}(0)$ et un terme $\dfrac{\alpha}{\mathrm{ReSc}}F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi$. On peut donc fixer $\boldsymbol{v}_0$ et Φ_0, et en déduire l'expression de $\boldsymbol{u}_0$.

La première étape demande à être un peu mieux définie, et en particulier il faut préciser en quels points de Ω on calcule $\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}$. Dans notre cas, ce calcul a été fait pour chaque degré de liberté des espaces d'éléments finis, c'est-à-dire pour les sommets et les milieux des arêtes de la triangulation. De ce choix découle la définition de l'opérateur de composition qui permet de définir g_h, approximation de $f_h \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}$ dans W_h : ici, g_h est obtenu par interpolation de Lagrange, c'est-à-dire qu'à chaque degré de liberté $\boldsymbol{x}_i$ de g_h on a affecté la valeur $f_h \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x}_i,t_{m+1};t_m\}$. Ce choix a l'avantage de la simplicité, et en pratique montre une bonne stabilité. Il est discuté au paragraphe 3 du chapitre III.

Par ailleurs, le calcul de $f_h \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x}_i,t_{m+1};t_m\}$ n'est pas aussi évident qu'il n'y paraît lorsque f_h est défini sur un maillage général : en effet, on ne connaît alors pas directement l'élément K du maillage tel que $\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x}_i,t_{m+1};t_m\} \in K$. Le développement d'un algorithme efficace de recherche a donc été nécessaire, que l'on explique au paragraphe 4.

L'étape 4 est la projection de Γ_h^{m+1} sur l'espace $Q_{0,h}$, qui permet à l'équation (32f) d'admettre des solutions, de la même façon que la projection de Γ sur Q_0 le permettait dans le problème continu en espace.

En effet, la démonstration de la condition inf-sup (31) pour les éléments de Taylor-Hood dans [13, page 253] en 2D, dans [57] en 3D, prouve que l'opérateur du gradient discret B^{T} a pour noyau les constantes :

$$\langle B\boldsymbol{v}_h, q_h\rangle := b(\boldsymbol{v}_h,\boldsymbol{\nabla} q_h) = 0, \quad \forall \boldsymbol{v}_h \in W_h \qquad \Rightarrow \qquad q_h \equiv c \in \mathbb{R}$$

Par conséquent, l'image du divergent discret est bien $Q_{0,h}$, car on a $(\mathrm{Im}B)^\perp = \ker B^{\mathrm{T}}$.

L'étape 5 fait intervenir la technique du Lagrangien augmenté pour respecter la contrainte $\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h^{m+1} = -\chi_h^{m+1}$, combiné à l'algorithme itératif d'Uzawa [22].

3 Maillages adaptatifs

3.1 Méthodes de réduction de l'erreur

L'erreur de notre méthode d'éléments finis, comme on le montre au chapitre IV, s'exprime en terme, d'une part, de l'erreur de discrétisation de la dérivée matérielle par la méthode des caractéristiques, et d'autre part, en terme de l'erreur de projection de la solution exacte sur le sous-espace d'éléments finis. On cherche donc à réduire chacune de ces erreurs, et ce pour une complexité constante (c'est-à-dire avec un nombre de degrés de liberté $\sum_{m=1}^{M} \dim \mathscr{W}_{h_m}$ constant dans notre famille de solutions approchées $(\boldsymbol{U}_{h_m}^m)_m$ pour $m \in \{1,...,M\}$ et $\boldsymbol{U}_{h_m}^m \in \mathscr{W}(\mathscr{T}_{h_m})$). Plusieurs stratégies sont envisagées.

La première est d'augmenter l'ordre des discrétisations, que cela soit en temps ou en espace. Cette méthode vise donc à diminuer la distance maximale entre un élément de l'espace des solutions continues et l'espace de discrétisation. Cette approche repose sur des hypothèses de régularité de la solution, car l'erreur de projection d'une méthode d'ordre k s'exprime en terme des dérivées d'ordre $k+1$ de la solution exacte, et permet des gains en vitesse de convergence très importants. Les méthodes d'ordre supérieur en temps sont discutées au paragraphe 2.1. En espace, bien qu'elles nécessitent un important effort d'implémentation, les méthodes d'ordre supérieur sont une direction prometteuse dans les années à venir. Mais, pour une méthode d'éléments finis couplée à la méthode des caractéristiques, la question épineuse de l'intégration numérique des champs advectés par la méthode des caractéristiques (voir paragraphe 3) ne permet pas de bénéficier des gains en ordre de convergence. Il n'est donc pas pertinent, en l'absence de meilleure méthode d'intégration numérique, d'augmenter l'ordre des approximations en espace. En pratique, nous avons choisi le compromis de l'élément de Taylor-Hood, qui combine les avantages d'une approximation continue de la pression et d'une approximation des vitesses quadratique par morceaux (voir paragraphe 2.2).

La seconde stratégie est une adaptation de notre espace d'approximation aux spécificités de la solution exacte elle-même, et non plus de l'espace des solutions continues tout entier. Cette méthode consiste donc à minimiser, par un choix de maillage $\mathscr{T}_h$ optimal[2], l'erreur de projection $\left\|\boldsymbol{U} - \Pi_{\mathscr{W}(\mathscr{T}_h)}\boldsymbol{U}\right\|$ de la solution exacte $\boldsymbol{U}$ sur l'espace $\mathscr{W}(\mathscr{T}_h)$. Si l'on a une connaissance *a priori* de certaines caractéristiques de la solution, par exemple l'existence et la nature d'une couche limite dans une géométrie simple, il est parfois possible d'en déduire des maillages réguliers dont on peut prouver l'optimalité [21]. Cependant, en général aucune information de ce type n'est disponible et l'adaptation de maillage est conçue comme une suite $(\mathscr{T}_r)_r$ de maillages convergeant vers un maillage optimal, où le maillage $\mathscr{T}_{r+1}$ est calculé sur la base d'une solution approchée $\boldsymbol{U}_r \in \mathscr{W}(\mathscr{T}_r)$.

Plusieurs définitions de ces suites de maillage sont bien sûr possibles, tant en ce qui concerne le nombre d'itérations R de raffinement, le nombre de degrés de liberté des maillages « grossiers » (c'est-à-dire, pour $r < R$) et surtout les critères de raffinement, dont dépendra la convergence de la suite des maillages et l'optimalité de sa limite. Nous présentons notre choix dans le paragraphe qui suit.

3.2 Adaptation dynamique par remaillage

Nous nous sommes basés sur les travaux de Borouchaki *et al.* [9] et qui sont implémentées dans le mailleur bidimensionnel anisotropique `bamg` [26].

Ceux-ci partent sur le constat que, pour un champ $f \in H^2(\Omega)$, l'erreur de projection sur un espace d'éléments finis affine par morceaux s'écrit

$$\|f - \Pi_{1,h} f\|_{0,\Omega} \leq Ch^2 \|f\|_{2,\Omega} = Ch^2 \|\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} f)\|_{0,\Omega},$$

où $\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} f) = \left(\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right)_{i,j}$ est la Hessienne de f. En particulier, sur un triangle K et dans une direction $\boldsymbol{d}$ (où $\boldsymbol{d}$ est un vecteur normalisé), l'erreur $e_{K,\boldsymbol{d}}$ peut être estimée par

$$e_{K,\boldsymbol{d}} = h_{K,\boldsymbol{d}}^2 \left\|\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{d}^2}\right\|_{0,K} = h_{K,\boldsymbol{d}}^2 \left\|\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} f) \cdot \boldsymbol{d}\right\|_{0,K},$$

---

[2] Ou, pour une adaptation en temps, à minimiser l'erreur ℓ^∞ de la suite de solutions par un choix optimal des instants $t_1,\dots,t_M$ de $[0,T]$

où $h_{K,\boldsymbol{d}}$ est le diamètre du triangle K dans la direction $\boldsymbol{d}$. Formellement, on peut dire que l'adaptation de maillage va permettre d'équilibrer cette erreur sur l'ensemble des directions et des triangles du maillages, en diminuant $h_{K,\boldsymbol{d}}$ lorsque $\left\|\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} f) \cdot \boldsymbol{d}\right\|_{0,K}$ est grand et inversement. À cette fin, il est naturel de s'intéresser aux vecteurs propres $\boldsymbol{d}_1,\boldsymbol{d}_2$ de $\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} f)$, qui seront les directions d'étirement extrême du triangle, la racine carrée des valeurs propres donnant le coefficient d'étirement.

Comme le champ f pour lequel on souhaite adapter le maillage est une inconnue du problème, on utilise, comme indiqué ci-dessus, un algorithme de point fixe sur des approximations successives f_r de f, calculées sur des maillages $\mathscr{T}_r$, qui ont été raffinés avec le critère f_{r-1} ; $\mathscr{T}_0$ étant un maillage grossier, uniforme.

Dans le cas d'écoulements gravitaires, où l'inhomogénéité de la densité est la source d'énergie et où des fronts d'intrusion se développent, un premier critère naturel pour l'adaptation de maillage est la densité. Il est également naturel de faire un raffinement de maillage lié à la vitesse, en particulier pour résoudre les couches limites qui peuvent apparaître aux parois, mais aussi dans les couches de mélange où les variations de vitesse et les gradients de densité n'ont pas de raison d'être co-localisés. Par analogie avec le choix retenu dans [49], on peut adapter le maillage pour équirépartir l'erreur sur la dissipation, et donc sur l'intensité des contraintes $|\mathbb{D}\boldsymbol{u}|$. C'est ce choix qui a permis les simulations d'avalanches avec conditions de glissement aux parois, chapitre VI. Par contre, on a noté en pratique que le mailleur se comportait de façon inattendue avec ce choix lorsque les conditions aux limites de vitesse étaient celles de Dirichlet homogène, et que les zones de fort gradient n'étaient plus capturées dans ce cas : le mailleur tendait à donner un maillage uniformément fin. Nous avons constaté qu'au contraire, le choix de $|\boldsymbol{u}|$ comme critère donnait dans ce cas de bons résultats. (Inversement, ce dernier critère avec des conditions aux limites de glissement entraîne les mêmes problèmes de remaillage.)

4 Implémentation efficace pour des maillages non structurés

La première étape de l'algorithme (32) consiste à calculer, pour un point $\boldsymbol{x} \in \Omega$ donné, les coordonnées d'un autre point $\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$, avec :

$$\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t \boldsymbol{u}_h^m\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})\right). \tag{33}$$

Dans le cas de frontières « imperméables » ($\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0$), le lemme 7, page 53, montre que ce point, et le point intermédiaire $\boldsymbol{x} - \delta t/2\ \boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})$, sont dans Ω si δt est suffisamment petit. Ce n'est bien sûr pas le cas s'il y a un débit d'entrée à la frontière. Par ailleurs, d'un point de vue algorithmique, la volonté d'implémenter une méthode robuste nous conduit à considérer aussi le cas où ces points sortent du domaine Ω. (La routine correspondante pourra alors émettre un avertissement, et le programme utilisateur s'interrompre ou non).

Évaluation ponctuelle d'un champ éléments finis. La première remarque au vu de l'équation (33) est qu'elle fait apparaître l'évaluation ponctuelle du champ aux éléments finis $\boldsymbol{u}_h^m$, ce qui est inhabituel dans le contexte des éléments finis, où les formulations sont d'habitude basées sur des intégrales. Les champs éléments finis font toutefois intervenir certaines valeurs ponctuelles de la fonction qu'ils représentent : ce sont les valeurs aux degrés de liberté $\boldsymbol{x}_i$ du maillage[3]. L'implémentation sera donc différente selon que $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_i$, auquel cas on a $\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x}_i) = (\boldsymbol{u}_h^m)_i$; dans le cas contraire il faut interpoler la valeur de $\boldsymbol{u}_h^m$ au point $\boldsymbol{x}$.

Interpolation ponctuelle. Ce calcul d'interpolation nécessite la donnée de la maille $K \in \mathscr{T}_h$ telle que $\boldsymbol{x} \in K$. On peut alors calculer la coordonnée $\hat{\boldsymbol{x}}$ de l'image dans l'élément de référence $\hat{K}$ de $\boldsymbol{x}$ par la transformation affine $\boldsymbol{F}_K^{-1} : K \to \hat{K}$ [16, page 83], et évaluer $\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})$ par

$$\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x}) = \sum_j (\boldsymbol{u}_h^m)_{N(j,K)} \hat{\psi}_j \circ \boldsymbol{F}_K^{-1}(\boldsymbol{x})$$

où les $\hat{\psi}_j$ sont les fonctions de base de l'élément fini et $j \mapsto N(j,K)$ donne l'index du j–ème nœud de K dans la numérotation globale.

Localisation dans un maillage. Le problème est donc de trouver la maille $K \in \mathscr{T}_h$ telle que $\boldsymbol{x} \in K$. Si le maillage est un maillage régulier, cela peut se faire explicitement. Pour un maillage cartésien de $N = N_x \times N_y$ éléments, une recherche par dichotomie permet de donner la réponse en $\log_2 N$ opérations. Par contre, dans le cas d'un maillage général non structuré, l'algorithme naïf de test systématique de toutes les mailles a un coût en N. Ce coût est prohibitif, car l'algorithme (32) implique de mener cette recherche pour un nombre de points $\boldsymbol{x}$ de l'ordre de N, ce qui donne un algorithme en N^2.

Nous proposons donc d'introduire une structure de données supplémentaires, qui permette une recherche rapide par dichotomie. Un arbre de recherche de type *quadtree* (ou *octree* en 3 dimensions) permet de localiser le point $\boldsymbol{x}$ dans une région de l'espace $B_{ij} = [i/2^n; (i+1)/2^n] \times [j/2^n; (j+1)/2^n]$ en $2\log_2 n$ opérations. Ces régions ne sont cependant pas identifiables aux mailles de $\mathscr{T}_h$: l'opération suivante consiste donc à utiliser l'algorithme naïf de parcours systématique de toutes les mailles *ayant une intersection non vide avec* B_{ij}. Si n est choisi tel que $2^n h$ est de l'ordre de 1, le nombre de mailles à parcourir avec l'algorithme naïf est une constante. L'avantage des arbres de recherche, par rapport à une grille cartésienne, est que la subdivision peut avoir des profondeurs n différentes localement, et donc être adaptée au « h–local » d'un maillage adapté, c'est à dire au diamètre des éléments dans la région concernée du maillage.

En annexe B, nous donnons un algorithme qui combine ces deux approches. L'implémentation utilisée pour les calculs présentés ici n'inclut cependant pas à l'heure actuelle des arbres de recherche de profondeur variable : toutes les régions B_{ij} ont donc la même taille, indépendamment de la taille locale des éléments.

---

[3] C'est-à-dire en tous les degrés de liberté pour des éléments finis de Lagrange, et en ceux « d'ordre 0 » (ne faisant pas intervenir la dérivée) pour ceux d'Hermite.

Enfin, une question épineuse concerne le test d'appartenance d'un point à un polygone dans un environnement bruité du fait de l'erreur numérique d'arrondi. Étant donné que l'algorithme naïf considère successivement et indépendamment les mailles K, en testant pour chaque face $e_{K,j}$ de « quel côté », intérieur ou extérieur, se situe le point $\boldsymbol{x}$, si $\boldsymbol{x}$ est très proche de la face e_0, l'erreur d'arrondi peut mener à estimer que $\boldsymbol{x}$ est en dehors des deux mailles[4] qui partagent cette face e_0, et donc que $\boldsymbol{x}$ n'appartient à aucune maille de $\mathscr{T}_h$. Il convient donc « d'épaissir » les mailles par un petit coefficient, ce qui est assez malaisé. L'algorithme retenu, basé sur une tolérance dans les produits vectoriels, peut donner des résultats peu satisfisants (trop tolérants) pour des polygones présentant des angles très aigus. Il n'est pas non plus totalement infaillible, mais sur un total de plusieurs centaines de milliards de recherches, il n'y a eu qu'une demi-douzaine d'échecs de l'algorithme.

Sortie du domaine. Dans le cas où $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x} - \delta t \boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x}) \notin \Omega$, on souhaite trouver le point d'intersection de $[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]$ avec $\partial\Omega$. Cette recherche est une simple généralisation de la recherche d'un point dans un maillage, en substituant le maillage $\mathscr{T}_h$ par le maillage de la frontière $\partial\mathscr{T}_h$, et en substituant les notions d'appartenance (appartenance de $\boldsymbol{x}$ à B_{ij}, à K) par des notions d'incidence (intersection de $[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]$ avec B_{ij}, ou avec e arête de $\partial\mathscr{T}_h$). L'algorithme correspondant est donné en annexe B.

La finalité du calcul de $\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ est de pouvoir faire l'intégration numérique du terme de second membre des caractéristiques, qui s'écrit $f_h \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}$. Notre choix a été de faire d'abord une interpolation de Lagrange de $f_h \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}$ dans l'espace d'éléments finis, en définissant g_h telle que $g_h(\boldsymbol{x}_i) = f_h \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_i,t_{m+1};\, t_m\}$ pour tout $\boldsymbol{x}_i$ nœud du maillage. D'autres choix sont possibles, que nous discutons au paragraphe 3 du chapitre III. En pratique, on a donc calculé $\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_i,t_{m+1};\, t_m\}$ pour tous les $\boldsymbol{x}_i$ degrés de liberté de l'espace $W_h = P_2(\mathscr{T}_h)$.

---

[4] En effet, l'orientation des faces est définie localement, et l'ordre des opérations change selon la maille considérée, le résultat peut donc différer du fait de l'erreur d'arrondi.

Chapitre III

Méthode des caractéristiques et éléments finis

Le chapitre II expose la méthode de Lagrange–Galerkin, retenue pour la résolution du problème (24) et donne l'algorithme qui en découle. Avant d'analyser l'erreur numérique de cet algorithme pour le problème spécifique de Navier–Stokes en présence de diffusion de masse au chapitre IV, on donne dans ce chapitre des résultats qui ont une portée générale pour la méthode de Lagrange–Galerkin, c'est-à-dire la combinaison d'une discrétisation des dérivées matérielles par la méthode des caractéristiques et des dérivées en espace par une méthode d'éléments finis.

Tout d'abord, le paragraphe 1 donne quelques résultats peu usuels sur la norme L^∞ des approximations aux éléments finis. Ces résultats seront utilisés aussi bien pour définir la méthode des caractéristiques que pour majorer des termes non-linéaires dans l'estimation d'erreur pour le problème de Navier–Stokes avec diffusion de masse, au chapitre IV.

Le paragraphe 2 regroupe les résultats qui permettent de bien définir la transformation des caractéristiques et donnent une estimation de l'erreur de consistance commise par la méthode. Dans le cas de problèmes de transport non-linéaire, les courbes caractéristiques sont calculées sur une approximation de la vitesse, et on donne également l'erreur de la méthode des caractéristiques en fonction de l'erreur de cette approximation.

Enfin, le paragraphe 3 soulève le problème d'intégration numérique que pose l'utilisation de la méthode des caractéristiques dans le cadre des éléments finis.

1 Discrétisation éléments finis et norme L^∞

Soit une famille de maillages $(\mathscr{T}_h)_h$, non-dégénérée [11, page 106]. Nous nous plaçons dans le cadre général d'un espace W_h d'éléments finis conformes de Lagrange de degré k, notés P_k. Puisque nous avons $P_r \subset P_k$ pour $r \leq k$, on peut définir sur P_k l'opérateur d'interpolation de Lagrange $\psi \mapsto \Pi_{r,h}\psi$ qui à ψ associe son interpolation dans P_r. L'erreur associée à cette interpolation est (voir par exemple [16])

$$\|\psi - \Pi_{r,h}\psi\|_{0,\Omega} \leq Ch^{r+1} \|\psi\|_{r+1,\Omega}\,, \qquad \|\psi - \Pi_{r,h}\psi\|_{1,\Omega} \leq Ch^{r} \|\psi\|_{r+1,\Omega}\,.$$

En plus de ces estimations, nous souhaitons pouvoir contrôler le maximum des approximations aux éléments finis. Les résultats utilisés pour cela ne sont pas classiques, c'est pourquoi nous les démontrons ici.

Commençons par remarquer que, à la différence des interpolations d'ordre supérieur, l'interpolation P_1 conserve les bornes de la fonction interpolée :

Lemme 1 (Bornes sur l'interpolation de Lagrange par des éléments P_1) .

Si il existe deux réels m et M tels que $m \leq \psi(\boldsymbol{x}) \leq M$ p.p. $\boldsymbol{x} \in \Omega$, alors

$$m \leq \Pi_{1,h}\psi(\boldsymbol{x}) \leq M.$$

Preuve. Les valeurs $\psi_i = \psi(\boldsymbol{x}_i)$, où les points $\boldsymbol{x}_i$ sont les degrés de liberté du maillage éléments finis, sont par hypothèse comprises entre m et M. Or $\Pi_{1,h}\psi(\boldsymbol{x})$ est une combinaison linéaire $\sum_i \Lambda_i\psi_i$ des ψ_i, où les réels Λ_i sont les valeurs des fonctions de base de P_1 au point $\boldsymbol{x}$. Par définition, on a donc $\sum_i \Lambda_i = 1$, et de plus les Λ_i sont positifs. La combinaison $\sum_i \Lambda_i\psi_i$ est donc une combinaison convexe, d'où $m \leq \Pi_{1,h}\Phi(\boldsymbol{x}) \leq M$. ■

Lemme 2 (Injections continues de L^∞) .

Pour tout ψ_h dans W_h,

$$\|\psi_h\|_{0,\infty,\Omega} \leq Ch^{-d/p} \|\psi_h\|_{0,p,\Omega}$$

et

$$\|\psi_h\|_{0,\infty,\Omega} \leq C\delta(h) \|\psi_h\|_{1,\Omega} \qquad \forall \psi_h \in W_h$$

où $\delta(h) = h^{1-d/2} \left(\log \dfrac{1}{h}\right)^{1-1/d}$

On trouvera la preuve de la première inégalité dans [16], et de la seconde dans [55].

Lemme 3 (Bornes sur une approximation aux éléments finis) .

Pour $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Soit $\psi \in H^2(\Omega)$, avec m et M tels que $m \leq \psi(\boldsymbol{x}) \leq M$ pour tout $\boldsymbol{x} \in \Omega$; et soit $(\psi_h)_h$ une famille d'approximations dans $(W_h)_h$ de ψ telle qu'il existe une constante C indépendante de h, et $\|\psi - \psi_h\|_{1,\Omega} \leq C(\delta t + h)$. Alors on a sur ψ_h les bornes :

$$m - C\delta(h)(\delta t + h) \leq \psi_h(\boldsymbol{x}) \leq M + C\delta(h)(\delta t + h) \qquad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega$$

Preuve. D'après le lemme 2, on a :

$$\|\psi_h - \Pi_{1,h}\psi\|_{0,\infty,\Omega} \leq C'\delta(h)\,\|\psi_h - \Pi_{1,h}\psi\|_{1,\Omega}$$

et par ailleurs :

$$\|\psi_h - \Pi_{1,h}\psi\|_{1,\Omega} \leq \|\psi_h - \psi\|_{1,\Omega} + \|\psi - \Pi_{1,h}\psi\|_{1,\Omega}$$

Le second terme est l'erreur d'interpolation P_1, tandis que le premier est borné par hypothèse, on a donc

$$\|\psi_h - \Pi_{1,h}\psi\|_{0,\infty,\Omega} \leq C''(\delta t + h)\delta(h)$$

Enfin, le lemme 1 donne que $m \leq \Pi_{1,h}\psi(\boldsymbol{x}) \leq M$, on en déduit le résultat annoncé. ■

Lemme 4 (Norme du sup d'une approximation aux éléments finis) .

Soit $\psi \in H^{k+1}(\Omega)$, et soit $(\psi_h)_h$ une famille d'approximations dans $(W_h)_h$ de ψ. Alors

$$\|\psi_h - \psi\|_{0,\infty,\Omega} \leq C\left(h^k\,\|\psi\|_{k+1,\Omega} + h^{-d/2}\,\|\psi - \psi_h\|_{0,\Omega}\right),$$

et

$$\|\psi_h - \psi\|_{0,\infty,\Omega} \leq C'\left(h^k[1+\delta(h)]\,\|\psi\|_{k+1,\Omega} + \delta(h)\,\|\psi - \psi_h\|_{1,\Omega}\right).$$

Preuve. En utilisant les résultats de [11, page 109] pour la norme L^∞ de l'erreur d'interpolation et le lemme 2, on obtient :

$$\begin{aligned}
\|\psi - \psi_h\|_{0,\infty,\Omega} &\leq \|\psi - \Pi_h\psi\|_{0,\infty,\Omega} + \|\Pi_h\psi - \psi_h\|_{0,\infty,\Omega} \\
&\leq C''\left(h^k\,\|\psi\|_{k+1,\Omega} + \delta(h)\,\|\Pi_h\psi - \psi_h\|_{1,\Omega}\right) \\
&\leq C''\left(h^k\,\|\psi\|_{k+1,\Omega} + \delta(h)\,\|\psi - \Pi_h\psi\|_{1,\Omega} + \delta(h)\,\|\psi - \psi_h\|_{1,\Omega}\right) \\
&\leq C\left(h^k[1+\delta(h)]\,\|\psi\|_{k+1,\Omega} + \delta(h)\,\|\psi - \psi_h\|_{1,\Omega}\right)
\end{aligned}$$

La preuve de la majoration par la norme L^2 est identique. ■

2 La méthode des caractéristiques

On donne dans ce paragraphe une dérivation plus détaillée de la méthode des caractéristiques, déjà introduite au paragraphe 1 du chapitre II. En particulier, on justifie qu'elle donne un problème bien posé et on s'intéresse à l'ordre de précision de la méthode. Des discrétisations d'ordre supérieur à celles utilisées en pratique dans nos simulations sont également données, afin de situer les perspectives d'amélioration de la méthode.

2.1 Approximation de la dérivée matérielle

Pour un champ de vitesse $\boldsymbol{u}$ suffisamment régulier $\boldsymbol{u} \in C^0([0,T],C^{0,1}(\mathbb{R}^d)^d)$ on peut définir pour tout $\boldsymbol{x} \in \Omega$ et $s \in [0,T]$ les courbes caractéristiques $(\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\})$ de l'opérateur différentiel de dérivée matérielle $\left(\dfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right)$, c'est-à-dire telles que

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{X}}{\partial t}\{\boldsymbol{x},s;t\} & = \boldsymbol{u} \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\} \\ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;s\} & = \boldsymbol{x} \end{cases} \tag{34}$$

où l'on a introduit un abus de notation, $f \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\} = f(\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\},t)$, pour plus de lisibilité. La courbe $t \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\}$ est la trajectoire dans $\Omega \times [0,T]$ de l'élément de fluide localisé en un point $\boldsymbol{x}$ à l'instant s. D'après le thèorème de Cauchy-Lipschitz, le problème (34) admet une unique solution $t \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\}$ sur un intervalle de temps suffisamment petit. L'unicité indique que, si $\delta t = t_{m+1} - t_m$ est assez petit, une seule courbe $t \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}$ passe en un point de $(\boldsymbol{y},s)$ de $\Omega \times [t_m;\, t_{m+1}]$. En particulier, la solution $t \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},t_m;t\}$ de (34) pour l'initialisation $(\boldsymbol{y},s) = (\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},t_m)$ peut ête identifiée à la courbe $t \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}$, puisque celle-ci passe par $(\boldsymbol{y},s)$, et on obtient donc l'identité

$$\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},t_m;t_{m+1}\} = \boldsymbol{x}. \tag{35}$$

On peut ainsi définir une description lagrangienne de l'écoulement, où les quantités sont définies en fonction des coordonnées $(a,b,c)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^3$ des particules fluides à l'instant $t = t_0$. On verra une utilisation de cette description dans la section E du chapitre V, dans le cas d'un écoulement non visqueux.

Les courbes caractéristiques ont la propriété de réduire la dérivée matérielle à une dérivée partielle, c'est-à-dire que

$$\frac{\partial f \circ \boldsymbol{X}}{\partial t}\{\boldsymbol{x},s;t\} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} f\right] \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},s;t\}$$

(ce dont on peut se convaincre aisément en calculant la dérivée composée). Ainsi, si les caractéristiques $\boldsymbol{X}$ sont connues, la discrétisation de cet opérateur est très facile et peu coûteuse, par exemple avec un schéma d'Euler explicite [39], comme on l'a fait dans notre algorithme présenté au chapitre II :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) f(\boldsymbol{x},t_{m+1}) = \frac{f(\boldsymbol{x},t_{m+1}) - f \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{\delta t} + O(\delta t),$$

Il semble naturel de vouloir atteindre l'ordre 2 en temps avec un schéma centré :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} f\right]\left(\frac{\boldsymbol{x} + \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{2},t_{m+1/2}\right) = \frac{f(\boldsymbol{x},t_{m+1}) - f \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{\delta t} + O(\delta t^2)$$

Cette dernière discrétisation, si elle est très naturelle pour des problèmes purement convectifs [7], est plus compliquée à mettre en œuvre lorsque l'on a un problème de convection diffusion [48]. En effet, il faut alors discrétiser les termes diffusifs au point $\dfrac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{2}$. Rui et Tabata [48] proposent la discrétisation suivante,

$$\Delta f\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{2},t_{m+1/2}\right)=\frac{1}{2}\left[\Delta f(\boldsymbol{x},t_{m+1})+(\Delta f)\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}\right],$$

mais l'écriture de la formulation faible du dernier terme du membre de droite n'est pas directe, et ils obtiennent l'écriture, pour $\psi\in H^1_0(\Omega)$,

$$\begin{aligned}&\langle(\Delta f)\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},\psi\rangle\\&\quad=-\left((\boldsymbol{\nabla}f)\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},\boldsymbol{\nabla}\psi\right)\\&\quad-\delta t\left[\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{m+1}(\boldsymbol{\nabla}f)\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},\boldsymbol{\nabla}\psi\right)+\left(\boldsymbol{\nabla}(\nabla\cdot\boldsymbol{u}^{m+1})\cdot\boldsymbol{\nabla}f\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},\psi\right)\right]\\&\quad+O(\delta t^2),\end{aligned}$$

les termes d'ordre supérieur en δt correspondant à la différence entre la Jacobienne de la transformation de remontée des caractéristiques et l'identité.

Pour que ces termes n'apparaissent pas, il faut utiliser soit une discrétisation centrée, soit une méthode à pas liés. La première méthode s'écrit

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}f\right]\left(\boldsymbol{x},t_{m+1/2}\right)=\frac{f\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1/2};t_{m+1}\}-f\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1/2};t_m\}}{2\delta t}+O(\delta t^2),$$

ce qui permet de construire une méthode d'ordre 2 en introduisant l'opérateur linéaire inversible $A^m\,:\,f\mapsto f\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1/2};t_{m+1}\}$. Cependant cet opérateur n'est pas symétrique, et les méthodes pour résoudre le système linéaire discret seront moins efficaces ; et de plus il est probable que cette méthode soit soumise à une condition de stabilité, dont les autres méthodes des caractéristiques sont affranchies. La seconde possibilité peut par exemple s'écrire, en se limitant à l'ordre 2,

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}f\right](\boldsymbol{x},t_m)\\&\quad=\frac{3f(\cdot,t_{m+1})-2f\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}+f\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_{m-1}\}}{2\delta t}+O(\delta t^2).\end{aligned}$$

Ces deux méthodes doivent être amorcées par une méthode d'ordre 1.

2.2 Morphisme des caractéristiques

La courbe $t\mapsto\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}$ associée à tout point $\boldsymbol{x}\in\Omega$ étant unique sur $[t_m;t_{m+1}]$, le point $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ en particulier est défini de façon unique. De plus, pour δt suffisamment petit, on a nécessairement $\boldsymbol{y}\in\Omega$ si $\boldsymbol{u}$ respecte l'une des conditions aux limites d'adhérence (22) ou de glissement parfait (23) : en effet, par l'absurde, une courbe $t\mapsto\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}$ qui franchirait $\partial\Omega$ passerait en un point $\boldsymbol{z}$ de $\partial\Omega$, et par unicité de la solution, cette courbe serait entièrement inscrite sur $\partial\Omega$, car $\boldsymbol{u}$ est soit nulle soit tangente en tout point à $\partial\Omega$. On peut donc restreindre toute notre étude à $\boldsymbol{u} \in C^0([0,T],C^{0,1}(\Omega)^d)$, pour Ω suffisamment régulier.

On peut donc introduire la transformation

$$\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} : \left\{ \begin{array}{lcl} \Omega & \rightarrow & \Omega \\ \boldsymbol{x} & \mapsto & \boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} \end{array} \right.$$

définie par un problème de Cauchy (34) pour chaque point $\boldsymbol{x}$.

On a déjà exhibé dans l'équation (35) son application inverse $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_m;t_{m+1}\}$, la transformation est donc bijective de Ω dans Ω. Elle est également continue par rapport à la variable $\boldsymbol{x}$. En effet si $\varepsilon(t) = \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_1,t_{m+1};t\} - \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_2,t_{m+1};t\}$, on a

$$|\varepsilon(t)| \leq |\varepsilon(t_{m+1})| + \int_{t_{m+1}}^{t} |\boldsymbol{u} \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x_1},t_{m+1};t\} - \boldsymbol{u} \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x_2},t_{m+1};t\}|\mathrm{d}t,$$

et en utilisant la continuité de Lipschitz de $\boldsymbol{u}$,

$$|\varepsilon(t)| \leq |\varepsilon(t_{m+1})| + \left\|\boldsymbol{u}\right\|_{C^0(C^{0,1}(\Omega))} \int_{t_{m+1}}^{t} |\varepsilon(t)|\mathrm{d}t.$$

Le lemme de Gronwall donne donc :

$$|\varepsilon(t^m)| \leq |\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2| \exp\left(\left\|\boldsymbol{u}\right\|_{C^0(C^{0,1}(\Omega))} \delta t\right)$$

De la même façon, son inverse respecte la même inégalité.

Le lemme qui suit a été énoncé par Süli dans [55] pour $\boldsymbol{u}$ dans un espace à divergence nulle. Nous le donnons dans le cas où la divergence est non-nulle égale à une certaine fonction $-\chi$, c'est à dire que $\boldsymbol{u}$ sera pris dans $C^0([0,T],\boldsymbol{V}_0(\chi))$, où $\boldsymbol{V}_0(\chi) = \left\{\boldsymbol{v} \in H_0^1(\Omega)^d, \nabla \cdot \boldsymbol{v} = -\chi\right\}$. Il peut aussi être étendu au cas où on remplace $H_0^1(\Omega)$ par $H^1(\Omega)$ et en introduisant la condition de glissement (23).

Lemme 5 (Morphisme des caractéristiques) .

> *Si* $\boldsymbol{u} \in C(C^{0,1}(\bar{\Omega})^d \cap C(\boldsymbol{V}_0(\chi))$, *et* δt *assez petit, alors la transformation* $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ *est un homéomorphisme quasi-isométrique de* Ω *dans* Ω. *De plus, il existe* $\delta t_0 > 0$ *indépendant de* m, *tel que pour tout* $\delta t < \delta t_0$, *son Jacobien* $J\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}$ *vérifie* $|J\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\} - 1| \leq C\delta t \left\|\nabla \cdot \boldsymbol{u}\right\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}$ *pour tout* $(\boldsymbol{x},t) \in \Omega \times [t_m;t_{m+1}]$.

Preuve. La première partie du résultat est montrée ci-dessus, la preuve de la continuité de $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ et de son inverse donnant de plus la quasi-isométrie de la transformation, puisqu'on peut encadrer $|\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_1,t_{m+1};t_m\} - \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_2,t_{m+1};t_m\}|$ par des multiples de $|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|$.

Les bornes sur le Jacobien sont obtenues par l'identité de Liouville [15, page 9] :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial J}{\partial t}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\} = J\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\} \\ J\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_{m+1}\} = 1 \end{cases}$$

Puisque J est aussi positif, car $\boldsymbol{x}\mapsto\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\}$ est inversible, le lemme de Gronwall donne $J\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\} \leq \exp\Big(\|\nabla\cdot\boldsymbol{u}\|_{L^\infty(t_m,t_{m+1};L^\infty(\Omega))}\,\delta t\Big)$. On obtient ensuite la borne inférieure de la même manière. ■

Ce résultat permet de démontrer une estimation d'erreur correspondant à l'ordre du schéma, donné formellement au paragraphe précédent.

Lemme 6 (Erreur du schéma des caractéristiques)

Si $\dfrac{\mathrm{D}^2 f}{\mathrm{D}t^2} \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$, *alors :*

$$\left\|\frac{\mathrm{D}f}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{f(\cdot,t_{m+1}) - f\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}^2 \leq C\delta t \left\|\frac{\mathrm{D}^2 f}{\mathrm{D}t^2}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}^2$$

Preuve. C'est un résultat de Süli. La preuve s'obtient en appliquant la formule de Taylor à reste intégral à $f\circ X$, l'inégalité de Schwarz et les bornes sur le Jacobien de la transformation $\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}$ permettent d'aboutir. ■

On remarque ici que la majoration fait apparaître seulement δt, alors qu'on attendait δt^2. En effet, on a choisi de prendre $\mathrm{D}^2 f/\mathrm{D}t^2$ dans $L^2(L^2(\Omega))$; alors qu'en prenant $\mathrm{D}^2 f/\mathrm{D}t^2 \in L^\infty(L^2(\Omega))$, on obtient la borne $\delta t^2\left\|\mathrm{D}^2 f/\mathrm{D}t^2\right\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}$. Cependant, la différence est compensée par le fait que la somme de $m=0$ à M de $\left\|\mathrm{D}^2 f/\mathrm{D}t^2\right\|^2_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}$ est indépendante de δt. On utilisera à chaque fois que possible ce type de majoration pour tenter de réduire nos exigences de régularité sur la solution continue.

2.3 Approximation des courbes caractéristiques

Le problème (34) à $(\boldsymbol{x},s=t_{m+1})$ fixé est une équation différentielle ordinaire, et nous cherchons à en approcher la solution exacte au temps t_m par $\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$. Pour une approximation à l'ordre r, c'est-à-dire $\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} + O(\delta t^{r+1})$, on aura

$$\frac{f(\boldsymbol{x},t_{m+1}) - f\circ\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{\delta t} = \frac{f(\boldsymbol{x},t_{m+1}) - f\circ\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}}{\delta t} + O(\delta t^r),$$

et il est donc naturel d'utiliser une méthode du type Runge–Kutta, en choisissant r égal à l'ordre de la méthode de discrétisation de la dérivée temporelle, discutée au paragraphe précédent. Pour une méthode au premier ordre, l'approximation correspondante des courbes caractéristiques serait donc la méthode d'Euler

$$\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t\, \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t_{m+1}),$$

et pour celle du deuxième ordre, une méthode de Runge–Kutta,

$$\boldsymbol{X}^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t\, \boldsymbol{u}\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t_{m+1/2}), t_{m+1}\right).$$

Pour des problèmes non-linéaires où la vitesse de transport est l'une des inconnues, le champ $\boldsymbol{u}$ n'est pas connu aux instants t_{m+1} ni $t_{m+1/2}$ qui apparaissent ci-dessus. Cependant, si l'on remplace ces instants par le temps t_m, on constate facilement pour la méthode d'Euler que l'erreur supplémentaire reste en $O(\delta t^2)$, si $\boldsymbol{u} \in L^\infty(\Omega \times [0,T])$. Il n'en va pas de même pour la méthode de Runge–Kutta d'ordre 2, puisque

$$\begin{aligned}&\left|\boldsymbol{u}\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t_{m+1/2}), t_{m+1}\right) - \boldsymbol{u}\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t_m), t_m\right)\right| \\ &\qquad \leq C\left(\delta t \left\|\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}\right\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} + \delta t^2 \left\|\boldsymbol{\nabla u}(t_m)\right\|_{0,\infty,\Omega} \left\|\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}\right\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}\right).\end{aligned}$$

Il est donc nécessaire d'utiliser, pour ces problèmes non-linéaires, une autre méthode d'ordre 2, qui sera une méthode à pas liés, comme le proposent Bercovier et Pironneau [6].

Pour les applications traitées dans cette thèse, nous nous sommes limités à la discrétisation d'ordre 1 des dérivées temporelles. Nous avons dit plus haut que, en terme d'ordre de convergence, il était alors logique de choisir une méthode d'Euler pour approcher les courbes caractéristiques. En pratique, pour un coût faiblement plus élevé, nous avons opté pour une méthode du deuxième ordre de Runge–Kutta, qui à l'usage apporte un gain appréciable, même si la théorie ne permet pas de le quantifier.

2.4 Caractéristiques discrètes et transport non-linéaire

On définit ici $\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ de la même façon que $\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$, mais pour un champ de vitesse $\boldsymbol{u}_h$ dans un espace d'éléments finis :

$$\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t \boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x}), \tag{36}$$

pour une méthode d'Euler, et

$$\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t \boldsymbol{u}_h^m\left(\boldsymbol{x} - \frac{\delta t}{2}\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})\right), \tag{37}$$

pour une méthode de Runge-Kutta (voir paragraphe 2.3). On notera

$$\frac{\delta f}{\delta t}(\cdot,t_{m+1}) = \frac{f(\cdot,t_{m+1}) - f \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t}.$$

On s'attache à montrer des propriétés similaires à celles du lemme 5 pour cette discrétisation, et à majorer l'erreur commise. En particulier, la majoration fait intervenir l'erreur d'approximation du champ de vitesse $\boldsymbol{u}$ par le champ de vitesse $\boldsymbol{u}_h$.

Ces résultats nous permettront au chapitre IV d'exprimer l'erreur de résolution par la méthode de Lagrange-Galerkin en fonction de l'erreur de projection seulement, grâce à une récurrence sur les instants t_m.

Lemme 7 (Morphisme des caractéristiques approchées) .

> *Si* $\boldsymbol{u} \in C^0([0,T];\, C^{0,1}(\bar\Omega)^d \cap C(\boldsymbol{V}_0(\chi)) \cap L^\infty(H^2(\Omega)^d)$*, et que* $(\boldsymbol{u}_h)_h$ *est une famille d'approximations de* $\boldsymbol{u}$ *telle que* $\|\boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h^m\|_{1,\Omega} \leq C(h^k + \delta t)$*, où* $k \geq 1$*, et que de plus on a* $\delta t = h^r$*, avec* $r > d/4$ *; alors pour* h *suffisamment petit,* $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ *est un homéomorphisme de* Ω *dans* Ω*.*
>
> *De plus, son Jacobien* J_h^m *est tel que*
>
> $$\|J_h^m - 1\|_{0,\infty,\Omega} \leq C' \left[\delta t \left(\|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega} + \|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m)\|_{2,\Omega}\right) + h^{2r-d/2}\right].$$

On remarque ici qu'on ne peut maîtiser l'écart du Jacobien avec 1 que si le pas de temps est un $o(h^{1/2})$ en 2D, et $o(h^{3/4})$ en 3D. Süli [55] donne la même condition. On donne ici une preuve plus simple et plus complète que celle qu'il propose.

Preuve. On donne une preuve écrite dans le cas d'une discrétisation des caractéristiques par la méthode d'Euler (36). Elle s'étend sans difficulté au cas de la méthode de Runge-Kutta (37).

Remarquons tout d'abord que la norme infinie de $\boldsymbol{\nabla u}_h^m$ peut être bornée grâce au lemme 4 :

$$\begin{aligned}
&\delta t\, \|\boldsymbol{\nabla u}_h^m\|_{0,\infty,\Omega} \\
&\quad \leq \delta t\, \|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega} + \delta t\, \|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{\nabla u}_h^m\|_{0,\infty,\Omega} \\
&\quad \leq C\delta t[(\|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega} + \|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m)\|_{1,\Omega}) + h^{-d/2}\, \underbrace{\|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{\nabla u}_h^m\|_{0,\Omega}]}_{\delta t + h^k} \\
&\quad \leq C' \left[\delta t \left(\|\boldsymbol{\nabla u}(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega} + \|\boldsymbol{u}(\cdot,t_m)\|_{2,\Omega}\right) + h^{2r-d/2} + h^{k+r-d/2}\right]
\end{aligned}$$

Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe donc $h_0 > 0$ tel qu'on peut donc borner $\delta t\, \|\boldsymbol{\nabla u}_h^m\|_{0,\infty,\Omega}$ par ε, pour $h < h_0$ (et h_0 est indépendant de m et δt).

Pour $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\} = \boldsymbol{x} - \delta t \boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})$, on peut alors montrer que $\boldsymbol{y} \in \Omega$ en utilisant que $\boldsymbol{u}_h^m$ s'annule sur $\partial\Omega$:

$$\begin{aligned}\operatorname{dist}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x}),\partial\Omega) &= \min_{\boldsymbol{z}\in\partial\Omega} |\boldsymbol{x}-\delta t\boldsymbol{u}_h^m(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{z}| \\ &= \min_{\boldsymbol{z}\in\partial\Omega} \left|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}-\delta t\int_{\boldsymbol{x}}^{\boldsymbol{z}} \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h^m \frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}|}\right| \\ &\geq \min_{\boldsymbol{z}\in\partial\Omega} |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}| \times \left|1-\delta t\,\|\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h\|_{0,\infty,\Omega}\right| \\ &\geq (1-\varepsilon)\operatorname{dist}(\boldsymbol{x},\partial\Omega)\end{aligned}$$

On peut également montrer l'injectivité de $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$:

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_1,t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x}_2,t_{m+1};t_m\}| &= \left|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2+\delta t\int_{\boldsymbol{x}_1}^{\boldsymbol{x}_2} \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h^m \frac{\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\right| \\ &\geq |\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1| \times \left|1-C\delta t\,\|\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h\|_{0,\infty,\Omega}\right| \\ &\geq (1-\varepsilon)|\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1|\end{aligned}$$

On remarque également que l'image de $\partial\Omega$ par $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$ est inchangée. De plus, par continuité de la transformation, autour de tout point intérieur $\boldsymbol{x} \in \Omega$, il existe un voisinage dont l'image est incluse dans l'image de Ω et donc l'image de $\boldsymbol{x}$ n'est pas un point de la frontière de l'image de Ω. Par conséquent, l'image de Ω est un ouvert inclu dans Ω et de même frontière : on a donc égalité entre Ω et son image. Ceci prouve que la transformation est surjective, et on voit facilement alors que son inverse est continue.

La Jacobienne de la transformation s'écrit $\mathbb{I}+\delta t\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h^m$, où $\mathbb{I}$ est l'identité. En prenant le déterminant et en utilisant le lemme 2, on trouve pour h assez petit :

$$\begin{aligned}\|J_h^m-1\|_{0,\infty,\Omega} &\leq \delta t\,\|\nabla\cdot\boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\infty,\Omega}+C(\delta t^2\,\|\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\infty,\Omega}^2+\delta t^3\,\|\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\infty,\Omega}^3) \\ &\leq C'\left[\delta t\left(\|\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega}+\delta t\,\|\boldsymbol{u}(\cdot,t_m)\|_{2,\Omega}\right)+h^{2r-d/2}\right]\end{aligned}$$

■

Lemme 8 (Erreur de la discrétisation des caractéristiques)

Sous les hypothèses du lemme 5,

$$\|\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\|_{0,\Omega}^2 \leq 3\delta t^2\left(\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h\|_{0,\Omega}^2+\delta t M_u^m\right)$$

où $M_u^m = \left\|\dfrac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}^2 + \left(1+C\delta t\,\|\nabla\cdot\boldsymbol{u}\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}\right)\left\|\dfrac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}^2.$

Ce lemme est énoncé par Süli sans le terme en $\dfrac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}$, mais la preuve de la majoration n'est pas donnée.

Preuve. On a :

$$
\begin{aligned}
&\|\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\|_{0,\Omega}^2 \\
&= \left\| \int_{t_m}^{t_{m+1}} (\boldsymbol{u} \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t\} - \boldsymbol{u}_h^m)\mathrm{d}t \right\|_{0,\Omega}^2 \\
&\overset{\text{Schwarz}}{\leq} \delta t \int_{t_m}^{t_{m+1}} \|\boldsymbol{u} \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t\} - \boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\Omega}^2 \,\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \delta t \int_{t_m}^{t_{m+1}} \left\| \boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h^m + \int_{t_m}^{t_{m+1}} \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}\mathrm{d}t + \int_{t_{m+1}}^{t} \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};\tau\}\mathrm{d}\tau \right\|_{0,\Omega}^2 \mathrm{d}t \\
&\leq 3\delta t^2 \left(\|\boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\Omega}^2 + \int_\Omega \left[\int_{t_m}^{t_{m+1}} \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}\mathrm{d}t \right]^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \right) \\
&\quad + 3\delta t \int_{t_m}^{t_{m+1}} \int_\Omega \left[\int_{t_{m+1}}^{t} \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};\tau\}\mathrm{d}\tau \right]^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}t \\
&\overset{2\times\text{Schwarz}}{\leq} 3\delta t^2 \left(\|\boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\Omega}^2 + \delta t \left\| \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} \right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}^2 \right) \\
&\quad + 3\delta t \int_{t_m}^{t_{m+1}} \underbrace{(t_{m+1} - t)}_{\leq \delta t} \int_t^{t_{m+1}} \int_\Omega \left[\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};\tau\} \right]^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\tau\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

On a utilisé que $(a+b+c)^2 \leq 3(a^2+b^2+c^2)$. Le lemme 5 donne

$$
\begin{aligned}
\int_\Omega \left[\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \circ \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\} \right]^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} &= \int_\Omega \left[\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}(\boldsymbol{x},t) \right]^2 J\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t\} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&\leq (1 + C\delta t \,\|\nabla \cdot \boldsymbol{u}\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}) \left\| \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}^2
\end{aligned}
$$

et on obtient ainsi la majoration annoncée. ■

Lemme 9 (Erreur d'approximation des caractéristiques) .

Sous les hypothèses du lemme 5, et si $f \in W^{1,\infty}(\Omega)$, alors

$$
\begin{aligned}
&\|f \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - f \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\|_{0,\Omega}^2 \\
&\quad \leq C \,\|\boldsymbol{\nabla} f(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega}^2 \left(\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{0,\Omega}^2 + \delta t M_u^m \right) \delta t^2
\end{aligned}
$$

Si $f \in H^1(\Omega)$, alors

$$
\begin{aligned}
&\|f \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - f \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\|_{0,1,\Omega}^2 \\
&\quad \leq C \,\|\boldsymbol{\nabla} f(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega}^2 \left(\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{0,\Omega}^2 + \delta t M_u^m \right) \delta t^2
\end{aligned}
$$

où M_u^m est défini au lemme 7.

Preuve. À $\boldsymbol{x}$ fixé, on définit $\boldsymbol{\mu}_x$ le vecteur normalisé de $\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$. Si $f \in W^{1,\infty}(\Omega)$,

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega (f\circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - f\circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\
&\quad= \int_\Omega \left(\int_{[\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}]} \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{\mu}_x\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \|\boldsymbol{\nabla} f(\cdot,t_m)\|^2_{0,\infty,\Omega}\int_\Omega\left(\int_{[\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\},\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}]}\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\
&\leq \|\boldsymbol{\nabla} f(\cdot,t_m)\|^2_{0,\infty,\Omega}\,\|\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}\|^2_{0,\Omega}\,.
\end{aligned}$$

Si $f\in H^1(\Omega)$, en faisant le changement de variable $\boldsymbol{y}=(1-\theta)\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}+\theta\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}=\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(\theta)$,

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega |f\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}-f\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\
&= \int_\Omega\left|\int_0^1 \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(\theta))\cdot\boldsymbol{\mu}_x\mathrm{d}\theta\right| |\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}|\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\
&\overset{2\times\text{Schwarz}}{\leq} \|\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}\|^2_{0,\Omega}\int_\Omega 1\times\int_0^1\left(\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(\theta))\cdot\boldsymbol{\mu}_x\right)^2\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\
&\leq \|\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}\|^2_{0,\Omega}\int_0^1\int_\Omega\left(\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(\theta))\right)^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\theta\\
&\leq C_J\,\|\boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}\|^2_{0,\Omega}\,\|\boldsymbol{\nabla} f(\cdot,t_m)\|^2_{0,\Omega}
\end{aligned}$$

en utilisant les lemmes 5 et 7 pour majorer le Jacobien de la transformation $\boldsymbol{x}\mapsto\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{x}}(\theta)$ par une constante C_J, pour h assez petit. ■

Enfin, on montre un dernier résultat qui concerne les caractéristiques exactes, mais utilise les même techniques que ci-dessus.

Lemme 10 (Majoration de l'advection) .

Sous les conditions du lemme 5, on a

$$\|\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}-\boldsymbol{x}\|^2_{0,\Omega}\leq\delta t^2(1+C\delta t\,\|\nabla\cdot\boldsymbol{u}\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))})\,\|\boldsymbol{u}\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}\,,$$

et donc pour $f\in H^1(\Omega)$,

$$\begin{aligned}
&\|f(\cdot,t_m)-f\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\|^2_{0,1,\Omega}\\
&\quad\leq C'\,\|\boldsymbol{\nabla} f(\cdot,t_m)\|^2_{0,\Omega}\,\delta t^2(1+C\delta t\,\|\nabla\cdot\boldsymbol{u}\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))})\,\|\boldsymbol{u}\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}\,,
\end{aligned}$$

et pour $f \in L^2(\Omega)$,

$$\begin{aligned}&\|f(\cdot,t_m) - f \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\|_{W'}^2 \\ &\quad \leq C' \|f(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega}^2 \,\delta t^2 (1 + C\delta t \|\nabla \cdot \boldsymbol{u}\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}) \|\boldsymbol{u}\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}^2 .\end{aligned}$$

Preuve. La démonstration des deux premières majorations suit exactement les mêmes étapes que les lemmes 9 et 8, dans un cas un peu simplifié.

Le résultat dans W' est donné par Süli [55, page 470] pour une vitesse à divergence nulle, le lemme 5 nous permet de l'étendre directement à notre cas. ■

3 Un problème d'intégration numérique

Une question encore largement ouverte, et qui avait déjà été mentinonnée par Bercovier et Pironneau en 1982 [6], concerne l'erreur en espace induite par la méthode des caractéristiques, due à l'intégration numérique du terme advecté $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ que la méthode des caractéristiques fait apparaître dans le second membre des équations discrétisées.

La régularité de $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ est la même que celle de f_h sur Ω, c'est-à-dire que pour les éléments finis de classe C^0, $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ est continue mais n'est pas partout dérivable : en effet, f_h est de classe C^0 sur Ω et polynomiale par morceaux, mais ses dérivées sont discontinues au passage des frontières des éléments. L'advection nous fait perdre la propriété de régularité supplémentaire qu'ont les restrictions des fonctions éléments finis sur les mailles (voir figure 4). Les dérivées de la fonction $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ présentent donc des discontinuités localisées sur les courbes (et, en 3D, les surfaces) $\boldsymbol{X}_h\{\boldsymbol{e},t_{m+1};t_m\}$, où $\boldsymbol{e}$ parcourt les arêtes (respectivement, les faces) des éléments du maillage (voir la figure 5).

Dans le cas général, ces courbes ou surfaces sont définis par des polynômes de degré ks, pour des champs de vitesse discrets de degré k par morceaux et pour une discrétisation d'ordre s des caractéristiques (pour $s > 1$ ce sont d'ailleurs des polynômes par morceaux, voir figure 6). Le calcul de leurs intersections avec les éléments du maillage, proposée par Prietsley [42], qui serait nécessaire à l'intégration exacte de $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$, est donc difficilement praticable pour $ks > 1$.

On peut donc envisager trois autres approches pour mener cette intégration numérique. Tout d'abord, on peut utiliser malgré le manque de régularité une méthode de quadrature pour intégrer directement $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$. Puisque cette fonction a une dérivée qui n'est pas continue, l'ordre de précision de cette méthode est, en théorie, zéro. La figure 7 illustre ceci. Cela ne correspond pas à la réalité pratique des calculs numériques, parce que les discontinuités des fonctions transportées sont relativement faibles : on peut par exemple vérifier que, pour f dérivable fixée et une famille de maillages $(\mathscr{T}_h)_h$, les discontinuités des dérivées de f_h, la projection de f sur l'espace $P_1(\mathscr{T}_h)$ des fonctions continues affines par morceaux définies sur $\mathscr{T}_h$, tendent vers zéro comme $h \|\boldsymbol{\nabla} f\|_{1,\infty,\Omega}$. Cependant Prietsley [42] montre que cette méthode est en général instable, et le manque de régularité ne permet pas de prouver d'estimation d'erreur par les thérorèmes d'interpolation.

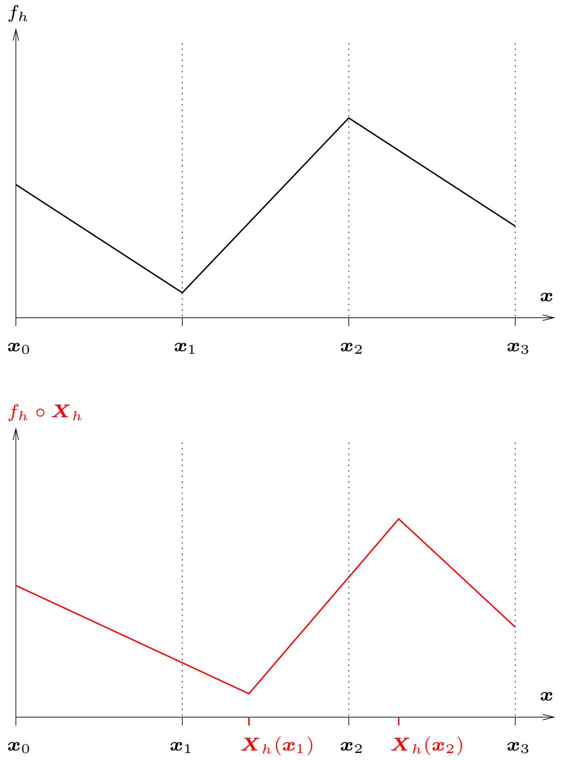


FIG. 4 – *Les dérivées de la fonction* $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ *ont des discontinuités aux points* $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{x}_i)$ *qui ne sont pas des points du maillage, contrairement à la fonction* f_h.

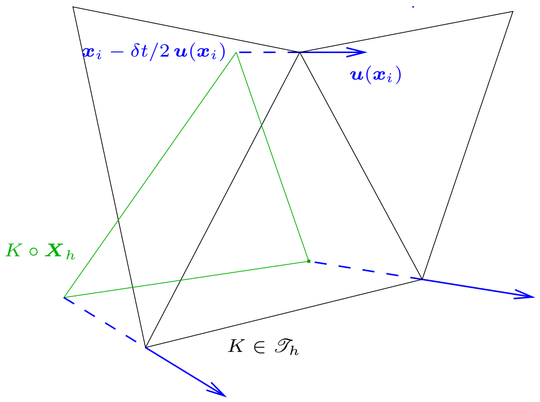

$\boldsymbol{x}_i - \delta t/2\, \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i)$
$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i)$
$K \circ \boldsymbol{X}_h$
$K \in \mathscr{T}_h$

FIG. 5 – *Remontée des caractéristiques approchées pour l'élément* K *de la triangulation* $\mathscr{T}_h$ *par une méthode d'Euler avec un champ de vitesse affine par morceaux. Si* f_h *est définie sur* $P_k(\mathscr{T}_h)$, *sa dérivée n'est pas nécessairement continue sur* ∂K, *et donc les dérivées de* $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ *peuvent être discontinues sur l'image de* ∂K *par* $\boldsymbol{X}_h$.

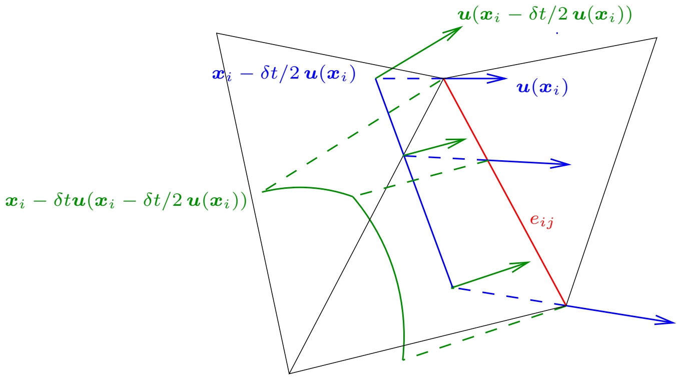

$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i - \delta t/2\,\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i))$
$\boldsymbol{x}_i - \delta t/2\,\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i)$
$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i)$
$\boldsymbol{x}_i - \delta t\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i - \delta t/2\,\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i))$
e_{ij}

FIG. 6 – *Remontée des caractéristiques approchées pour l'arête* $e_{ij} = [\boldsymbol{x}_i;\, \boldsymbol{x}_j]$ *par une méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 avec un champ de vitesse affine par morceaux.*

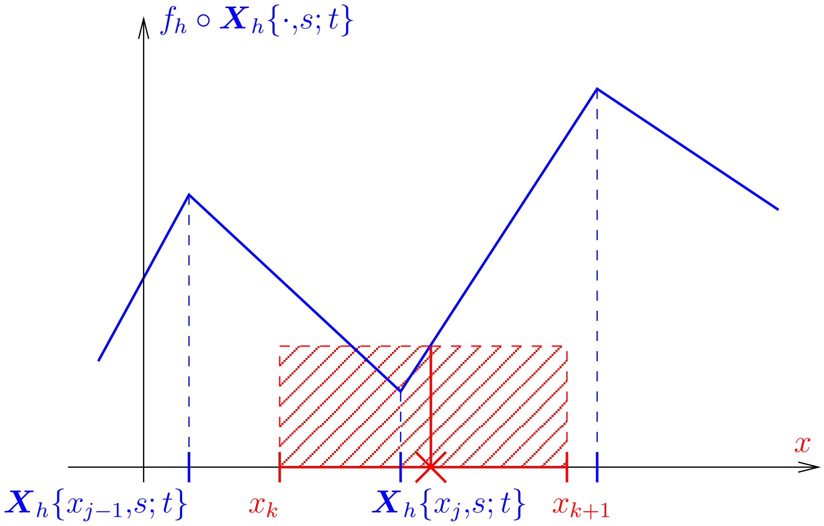

$f_h \circ \boldsymbol{X}_h\{\cdot,s;t\}$
x
$\boldsymbol{X}_h\{x_{j-1},s;t\}$
x_k
$\boldsymbol{X}_h\{x_j,s;t\}$
x_{k+1}

FIG. 7 – *Exemple en dimension 1 de l'intégration par une méthode du point central sur l'élément* $[x_k;x_{k+1}]$ *de la fonction* $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$*, avec* f_h *et un champ de vitesse affines par morceaux, et une méthode d'Euler pour calculer* $\boldsymbol{X}_h$*. (*$f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ *est donc affine par morceaux sur un maillage* $\{\boldsymbol{X}_h(x_1,s;t),...,\boldsymbol{X}_h(x_N,s;t)\}$*).*

Une seconde méthode, que nous avons adoptée dans nos calculs, consiste à insérer une étape de projection de $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ sur l'espace d'éléments finis. On définit $g_h = \Pi_h(f_h \circ \boldsymbol{X}_h)$, et l'intégration numérique est faite par des méthodes de quadrature sur g_h, de façon exacte. Cette méthode ne permet pas non plus de donner d'estimation d'erreur pour $f_h \circ \boldsymbol{X}_h - \Pi_h(f_h \circ \boldsymbol{X}_h)$, puisque $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ n'a pas la régularité requise. Elle ne garantit pas non plus de principe du maximum, car les fonctions de base des éléments que nous employons (P_2) ne sont pas comprises entre 0 et 1. Malgré cela, elle a montré une bonne stabilité pour les problèmes que nous avons abordés, avec des maillages suffisamment fins. On peut voir une illustration de l'écart des résultats au principe du maximum sur la figure 34 page 129.

Enfin, on peut aussi proposer d'augmenter la régularité globale des champs transportés (de f_h dans le présent exemple). Cette direction a été récemment explorée avec succès pour la résolution d'équation hyperboliques par Besse [7]. L'utilisation d'éléments d'Hermite par exemple nous apporterait une erreur d'ordre h pour l'intégration numérique. Cependant, dans notre cas, il faudrait alors aussi résoudre le problème de Stokes avec cet élément.

Ce problème demeure donc ouvert, concernant aussi bien la démonstration de bornes d'erreur expliquant le comportement satisfaisant des méthodes existantes lorsqu'elles sont stables, que la proposition de nouvelles méthodes qui puissent s'accorder avec les méthodes d'éléments finis.

4 Perspectives

La méthode des caractéristiques en éléments finis présente d'indéniables qualités de stabilité et de précision. Les chapitres V et VI montrent qu'elle permet la résolution de cas réels de mécanique avec un coût de calcul raisonnable. Alliée à une technique d'adaptation de maillage automatique, elle permet d'atteindre des valeurs de paramètres qui ne peuvent l'être avec des méthodes plus classiques (paragraphe 2 du chapitre V).

Les estimations données dans le paragraphe 2 montrent qu'il serait possible d'en améliorer les performances en augmentant l'ordre de discrétisation. Cependant, il subsite un important problème concernant l'intégration numérique des champs advectés par la méthode, qui nécessite une étude plus approfondie que celle qui a été possible dans cette thèse. Il apparaît donc que c'est d'abord dans cette direction que les efforts doivent porter.

Chapitre IV

Analyse numérique

1 Énoncé du théorème

Ce chapitre donne pour l'algorithme (32) de la page 38 un résultat de convergence optimal pour la méthode de Lagrange-Galerkin avec des éléments finis de Taylor–Hood, c'est-à-dire que

$$\begin{aligned}\|\Phi - \Phi_h\|_{\ell^\infty(H^1(\Omega))} + \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{\ell^\infty(H^1(\Omega))} + \left\|p - p_h\right\|_{\ell^2(L^2(\Omega))} &= O(\delta t + h^2),\\ \|\Phi - \Phi_h\|_{\ell^\infty(L^2(\Omega))} + \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{\ell^\infty(L^2(\Omega))} &= O(\delta t + h^3).\end{aligned}$$

(On note $\|\psi\|_{\ell^\infty(W^{s,p}(\Omega))} = \sup_{0\le m\le M} \left\|\psi(\cdot,t_m)\right\|_{W^{s,p}(\Omega)}$.) Pour obtenir ce résultat, nous devons supposer qu'il existe, sur l'intervalle $[0,T]$ que nous considérons, une unique solution faible $(\Phi,\chi,\boldsymbol{u},p) \in W \times W \times \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \times Q$ du problème (24) sous sa forme variationnelle :

Problème (38)

Trouver $(\Phi,\chi,\boldsymbol{u},p) \in L^\infty(Q^d) \cap L^2(W) \times L^2(W) \times L^\infty(Q^d) \cap L^2(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{0})) \times L^2(Q)$ tels que

$$\left(\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t}, \psi\right) + \left(\bar{F}(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi, \boldsymbol{\nabla}\psi\right) = -\left(\Phi\chi, \psi\right) \qquad \forall\psi \in W \qquad (38a)$$

$$(\chi, \psi) = \left(\frac{\alpha}{1+\alpha\Phi}\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t}, \psi\right) \qquad \forall\psi \in W \qquad (38b)$$

$$\left((1+\alpha\Phi)\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}, \boldsymbol{v}\right) + a(\Phi;\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) + b(\boldsymbol{v},p) = -\left(\frac{1+\alpha\Phi}{\alpha}\boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{v}\right) \qquad \forall\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \qquad (38c)$$

$$b(\boldsymbol{u},q) = (\chi, q) \qquad \forall q \in Q \qquad (38d)$$

et

$$\Phi(\cdot,0) = \Phi_0 \qquad \boldsymbol{u}(\cdot,0) = \boldsymbol{u}_0 \qquad (38e)$$

Nous devrons aussi supposer qu'elle est suffisamment régulière :

Hypothèse H2 (Régularité de la solution) .

$$\begin{array}{rcl@{\qquad}rcl}
\boldsymbol{u} & \in & L^\infty(H^{k+1}(\Omega)^d) \cap C([0,T]; C^{0,1}(\bar{\Omega})^d \cap \boldsymbol{V}(\chi)) & \dfrac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} & \in & L^2(L^2(\Omega)) \cap L^\infty(L^\infty(\Omega)) \\
\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} & \in & L^2(H^{k+1}(\Omega)^d) \cap L^\infty(L^2(\Omega)) & \dfrac{\mathrm{D}^2\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t^2} & \in & L^2(L^2(\Omega)) \\
p & \in & L^\infty(H^k(\Omega)) \cap L^\infty(L^2_0(\Omega)) & & & \\
\Phi & \in & L^\infty(H^{k+1}(\Omega) \cap W^{2,\infty}(\Omega)) & & & \\
\dfrac{\partial \Phi}{\partial t} & \in & L^2(H^{k+1}(\Omega)) \cap L^\infty(H^1(\Omega)) & \dfrac{\mathrm{D}^2\Phi}{\mathrm{D}t^2} & \in & L^\infty(L^2(\Omega))
\end{array}$$

Cette hypothèse impose la régularité des conditions initiales Φ_0 et $\boldsymbol{u}_0$. De plus, sous cette hypothèse, $\boldsymbol{u}_0 \in \boldsymbol{V}(\chi(t=0))$, et d'après les équations (38a, 38b), $\chi_0 = \dfrac{\alpha}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot [F(\Phi_0)\boldsymbol{\nabla}\Phi_0]$. (voir paragraphe 2.3 du chapitre II). On a cependant besoin d'un peu plus de régularité sur $\boldsymbol{u}_0$:

Hypothèse H3 (Régularité supplémentaire de la condition initiale) .

On suppose que $\nabla \cdot \boldsymbol{u}_0 \in H^{k+1}(\Omega)^d$

Il nous faut aussi imposer des conditions sur les coefficients variables du problème, assez naturelles pour le problème mécanique :

Hypothèse H4 (Loi de rhéologie) .

Λ *est lipschitzienne pour une certaine constante, et de plus il existe* $\varepsilon > 0$ *et une autre constante* $k_\Lambda > 0$*, minorant* Λ *sur* $[-\varepsilon, 1+\varepsilon]$

Hypothèse H5 (Loi de diffusion) .

F *est continue, de dérivée lipschitzienne pour une certaine constante, et de plus il existe* $\varepsilon > 0$ *et une autre constante* $k_F > 0$*, minorant* F *sur* $[-\varepsilon, 1+\varepsilon]$

Pour un maillage $\mathscr{T}_h$, dont le plus grand élément a une taille h, on définit des espaces d'éléments finis $W_h \in W$ et $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0})$ et on considère les approximations $(\Phi_h^m, \chi_h^m, \boldsymbol{u}_h^m, p^m)$ obtenues par l'algorithme (32) et vérifiant donc :

Problème (39)

Avec pour conditions initiales

$$\Phi_h^0 = \Pi\Phi_0 \in W_h, \qquad \boldsymbol{u}_h^0 = \Pi\boldsymbol{u}_0 \in \boldsymbol{X}_h(0), \qquad \chi_h^0 = \Pi\nabla \cdot \boldsymbol{u}_0 \in W_h\,;$$

trouver, pour $0 \leq m < M$, $(\Phi_h^{m+1},\chi_h^{m+1},\boldsymbol{u}_h^{m+1},p^{m+1}) \in W_h \times W_h \times \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \times Q_{0,h}$, tels que

$$\left(\frac{\delta\Phi_h^{m+1}}{\delta t},\psi_h\right) + \left(\bar{F}(\Phi_h^m)\boldsymbol{\nabla}\Phi_h^{m+1},\boldsymbol{\nabla}\psi_h\right) = -\left(\Phi_h^m\chi_h^m,\psi_h\right), \qquad \forall\psi_h \in W_h, \tag{39a}$$

$$\Gamma_h^{m+1} = \frac{\alpha}{1+\alpha\Phi_h^{m+1}}\frac{\delta\Phi_h^{m+1}}{\delta t}, \tag{39b}$$

$$\chi_h^{m+1} = \Gamma_h^{m+1} - \frac{1}{|\Omega|}\left(\int_\Omega \Gamma_h^{m+1}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)\mathbb{1}, \tag{39c}$$

$$\begin{aligned}\left((1+\alpha\Phi_h^{m+1})\frac{\delta\boldsymbol{u}_h^{m+1}}{\delta t},\boldsymbol{v}\right) &+ a(\Phi_h^{m+1};\boldsymbol{u}_h^{m+1},\boldsymbol{v}_h) + b(\boldsymbol{v}_h,p_h^{m+1})\\ &= -\left(\frac{1+\alpha\Phi_h^{m+1}}{\alpha}\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{v}_h\right), \qquad \forall\boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}),\end{aligned} \tag{39d}$$

$$b(\boldsymbol{u}_h^{m+1},q_h) = \left(\chi_h^{m+1},q_h\right) \qquad \forall q_h \in Q_h. \tag{39e}$$

L'opérateur Π représente la projection sur l'espace d'éléments finis. On se donne une famille de maillages $(\mathscr{T}_h)_h$ non-dégénérée, qui nous définit donc une famille d'approximations de la solution exacte.

L'estimation de l'erreur est faite dans un cadre général d'éléments finis conformes vérifiant les propriétés de projection et la condition Inf-Sup de compatibilité des vitesses et des pressions :

Hypothèse H6 (Hypothèses sur la discrétisation) .

On suppose que les espaces $\boldsymbol{X}_h$, W_h et Q_h sont tels que :

$$\begin{aligned}\inf_{\boldsymbol{v}_h\in\boldsymbol{X}_h} \|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_h\|_{m,\Omega} &\leq Ch^{k+1-m}\|\boldsymbol{v}\|_{k+1,\Omega}\\ \inf_{\psi_h\in W_h} \|\psi-\psi_h\|_{m,\Omega} &\leq Ch^{k+1-m}\|\psi\|_{k+1,\Omega}\\ \inf_{q_h\in Q_h} \|q-q_h\|_{0,\Omega} &\leq Ch^{k}\|q\|_{k,\Omega}\\ \inf_{q_h\in Q_h}\sup_{\boldsymbol{v}_h\in\boldsymbol{X}_h}\frac{b(v_h,q_h)}{\|\boldsymbol{v}_h\|_{\boldsymbol{X}_h}\|q_h\|_{Q_h/\mathbb{R}}} &\geq k_1\end{aligned}$$

Ces propriétés sont vérifiées pour l'élément de Taylor–Hood, en particulier, avec $k = 2$.

Enfin, la méthode des caractéristiques ne nous impose pas de condition de stabilité liant les pas de temps et les pas d'espace, mais il subsite, pour cette méthode mais aussi pour majorer des termes non-linéaires de couplage, une condition reliant pas de temps et maillage :

Hypothèse H7 (Choix du pas de temps en dimension 2) .

Si $\bar{F}$ est constante, alors on prendra

$$\delta t = Ch^r, r \in]1/2;\, 2k[,$$

où C est une constante indépendante de h et de la solution exacte. Si $\bar{F}$ n'est pas constante, il faut que $r \in]2;\, 2k[$.

La borne inférieure $1/2$ est due à la nécessité de borner le Jacobien de la transformation des caractéristiques (lemme 7). On discute la borne supérieure en conclusion de ce chapitre. Enfin, dans le cas où $\bar{F}$ n'est pas constante, la restriction provient de l'estimation faite au paragraphe 3.1.2.

L'énoncé du théorème et la preuve sont donnés pour la dimension 2. Elle peut être étendue à la dimension 3 en prenant en compte l'erreur supplémentaire sur les normes du supremum données dans le lemme 2.

Théorème 3 (Convergence de l'algorithme) .

Soit $(\Phi,\boldsymbol{u},p)$ solution du problème continu (38), supposée unique sur un intervalle de temps $[0,T]$ et vérifiant les hypothèses H2.

Sous les hypothèses H4 et H5 sur les coefficients du problème, et pour une discrétisation éléments finis respectant l'hypothèse H6 avec $k \geq 2$, et si de plus le choix du pas de temps δt est lié au maillage par l'hypothèse H7,

alors pour tout ε, $0 < \varepsilon < 1/\alpha$, il existe $h_0 > 0$ tel que pour $h < h_0$, l'algorithme (32) admet une solution unique, qui vérifie les estimations

$$\begin{aligned}
\|\Phi - \Phi_h\|_{\ell^\infty(L^2(\Omega))} &= O(\delta t + h^{k+1}), & \|\Phi - \Phi_h\|_{\ell^\infty(H^1(\Omega))} &= O(\delta t + h^k),\\
\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{\ell^\infty(L^2(\Omega))} &= O(\delta t + h^{k+1}), & \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{\ell^\infty(H^1(\Omega))} &= O(\delta t + h^k),\\
\|p - p_h\|_{\ell^2(L^2(\Omega))} &= O(\delta t + h^k),
\end{aligned}$$

et de plus on a sur Φ_h les bornes

$$-\varepsilon \leq \Phi_h^m(\boldsymbol{x}) \leq 1 + \varepsilon, \qquad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega, 0 \leq m \leq M = \frac{T}{\delta t}.$$

Méthode de preuve. L'existence et l'unicité de la solution discrète ne posent de question que pour le sous problème de Stokes (32e, 32f). Ce sous-problème est équivalent à un problème de minimisation sous contrainte, et il nous faut vérifier que l'espace des solutions admissibles est non-vide. C'est l'objet du paragraphe 2.

La preuve de l'estimation d'erreur suit le même cheminement que celle de Süli pour les équations de Navier–Stokes [55], avec pour nouveauté le couplage de l'équation de convection–diffusion en Φ, qui apparaît par des termes non-linéaires. Également, on a des conditions aux limites de Neumann homogène sur Φ, qui modifient certains aspects de la preuve.

Elle se fait par récurrence sur m, avec pour hypothèses que, pour tout n inférieur ou égal à m, il existe une constante C, indépendante de n, m et h, telle que

$$\begin{aligned} \|\Phi(\cdot,t_n) - \Phi_h^n\|_{0,\Omega} &\leq C(\delta t + h^{k+1}), & \|\Phi(\cdot,t_n) - \Phi_h^n\|_{1,\Omega} &\leq C(\delta t + h^k), \\ \|\boldsymbol{u}(\cdot,t_n) - \boldsymbol{u}_h^n\|_{0,\Omega} &\leq C(\delta t + h^{k+1}), & \|\boldsymbol{u}(\cdot,t_n) - \boldsymbol{u}_h^n\|_{1,\Omega} &\leq C(\delta t + h^k), \\ \|\nabla \cdot \boldsymbol{u}(\cdot,t_n) - \chi_h^n\|_{0,\Omega} &\leq C(\delta t + h^{k+1}). \end{aligned}$$

L'initialisation à $m = 0$ est obtenue par interpolation, et vérifie l'hypothèse de récurrence grâce aux hypothèses de régularité H2 et H3, et à l'hypothèse H6 sur la discrétisation.

On peut alors s'appuyer sur les résultats du chapitre III pour avoir de bonnes propriétés pour la transformation $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{X}_h^m\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}$. On montre d'abord dans la section 3.1 que, sous ces hypothèses,

$$\left\|\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi_h^{m+1}\right\|_{0,\Omega} \leq C(\delta t + h^{k+1}), \qquad \left\|\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi_h^{m+1}\right\|_{1,\Omega} \leq C(\delta t + h^k).$$

Le lemme 4 donne des bornes sur Φ_h^{m+1}, avec C' indépendante de m :

$$-C'(\delta t + h)\delta(h) \leq \Phi_h^{m+1}(\boldsymbol{x}) \leq 1 + C'(\delta t + h)\delta(h)$$

Ceci garantit en particulier que $1 + \alpha\Phi_h^{m+1} \geq 1/2$ pour h assez petit. Puis, au paragraphe 3.2, on obtient alors $\left\|\nabla \cdot \boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}) - \chi_h^{m+1}\right\|_{0,\Omega} \leq C(\delta t + h^k)$, et la récurrence est achevée en estimant $\boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}) - \boldsymbol{u}_h^{m+1}$ au paragraphe 3.3.

À plusieurs reprises, on aura besoin de supposer que h (ou δt) est suffisamment petit, en d'autres termes inférieur à un certain $h_0 > 0$. Ce h_0 est toujours *indépendant de l'itération* m, ce qui permet de passer à la limite $\delta t \to 0$, et donc $M \to \infty$.

La preuve de l'estimation sur la pression est identique à celle de Süli et n'est pas donnée.

2 Existence d'une solution et erreur dans le sous-problème de Stokes

2.1 Conditions d'existence d'une unique solution

2.1.1 Le problème continu

Le sous-problème de Stokes qui apparaît dans l'algorithme (32) est de la forme :

Problème (40)

Étant donnés $\ell \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0})'$ et $\chi \in Q$, trouver $\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0})$ et $p \in Q_0$,

$$a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) + b(\boldsymbol{v},p) = \langle \boldsymbol{\ell}, \boldsymbol{v}\rangle \qquad \forall \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \tag{40a}$$

$$b(\boldsymbol{u},q) = (\chi, q) \qquad \forall q \in Q \tag{40b}$$

où a est une forme bilinéaire symétrique, elliptique sur $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \times \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0})$, et la forme bilinéaire b est définie par :

$$b(\boldsymbol{v},q) = \langle B\boldsymbol{v}, q\rangle_{Q' \times Q} = -\left(\nabla \cdot \boldsymbol{v}, q\right)$$

L'image de l'opérateur B dans $Q' = Q = L^2(\Omega)$ est le fermé $Q_0 = \left\{ q \in Q,\ \int_\Omega q \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0 \right\}$, ce qui est équivalent à la condition Inf-Sup de Babuška–Brezzi :

$$\exists k_0 > 0,\ \inf_{q \in Q} \sup_{\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}} \frac{b(v,q)}{\|\boldsymbol{v}\|_{\boldsymbol{X}} \|q\|_{Q/\ker B^{\mathrm{T}}}} \quad \geq \quad k_0 \tag{41}$$

Sous ces conditions, on a équivalence [23, page 42] entre $\boldsymbol{u}$ solution du problème (40) et solution du problème :

Problème (42)

Trouver $\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(\chi)$,

$$a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \langle \boldsymbol{\ell}, \boldsymbol{v} \rangle \qquad\qquad \forall \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(0) \tag{42}$$

L'existence et l'unicité de $\boldsymbol{u}$, qui permettra de déduire celle de p dans Q_0, peut donc être prouvée par le théorème de Lax-Milgram si et seulement si $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(\chi)$ est non vide ; on pourra alors exhiber un élément $\boldsymbol{w} \in \boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(\chi)$, qui permettra de définir un relèvement de l'espace vectoriel $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(0)$.

Si $\boldsymbol{w}$ existe, alors on a, par le théorème de la divergence,

$$-\int_\Omega \chi \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \nabla \cdot \boldsymbol{w} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega} \,\mathrm{d}s = 0$$

et il y a donc une condition nécessaire $\chi \in Q_0$. Girault et Raviart [23] montrent que, si Ω est suffisamment régulier, cette condition est également suffisante.

2.1.2 Le problème discret

On écrit le problème discret pour un champ $\chi_h \in Q_h$,

Problème (43)

Trouver $\boldsymbol{u}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$, $p_h \in Q_{0,h}$,

$$a(\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v}_h) + b(\boldsymbol{v}_h,p_h) = \langle \boldsymbol{\ell},\boldsymbol{v}_h \rangle \qquad \forall \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \tag{43a}$$

$$b(\boldsymbol{u}_h,q_h) = (\chi_h, q_h) \qquad \forall q_h \in Q_h \tag{43b}$$

Pour simplifier l'écriture, on introduit les opérateurs A_h et B_h, ainsi que la matrice de masse M_h sur Q_h, définis par :

$$\begin{aligned}
(A_h \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) &= a(\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v}_h) & \forall \boldsymbol{u_h},\boldsymbol{v_h} &\in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}),\\
(B_h \boldsymbol{u}_h, q_h) &= b(\boldsymbol{u}_h,q_h) & \forall \boldsymbol{u}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}), q_h &\in Q_h,\\
(M_h p_h, q_h) &= (p_h, q_h) & \forall p_h,q_h &\in Q_h,
\end{aligned}$$

et on écrit le problème discret matriciel, équivalent au problème (43) :

$$\left\{\begin{aligned} A_h\boldsymbol{u}_h + B_h^{\mathrm{T}}p_h &= \ell_h \\ B_h\boldsymbol{v}_h &= M_h\chi_h \end{aligned}\right.$$

De la même façon que pour le problème continu, on voit clairement que l'existence d'une solution sera conditionnelle : il faudra que l'ensemble

$$\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}_h(\chi_h) = \{\boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}),\, B_h\boldsymbol{v}_h = M_h\chi_h\}$$

soit non-vide. On doit donc avoir $M_h\chi_h \in \mathrm{Im}B_h$ pour que le problème admette une solution. Il faut donc caractériser l'image de B_h, qui dépend de la discrétisation éléments finis choisie.

On a $(\mathrm{Im}B_h)^{\perp} = \ker B_h^{\mathrm{T}}$, et B_h^{T} est l'opérateur discret correspondant au gradient. On peut donc s'attendre à ce que, pour une bonne discrétisation, $\ker B_h^{\mathrm{T}}$ soit l'espace des constantes $\mathrm{Vect}\{\mathbb{1}\} \subset Q_h$. En fait, cette propriété implique la condition Inf-Sup discrète, mais la réciproque n'est pas vraie. Cependant, l'élément de Taylor-Hood et la discrétisation dite « P1-bulle P1 » avec un mini-élément pour les vitesses respectent cette condition, comme on le montre dans le paragraphe 2.2.

Dans ces cas, on a $\mathrm{Im}B_h = Q_{0,h}$, ce qui signifie que la condition d'existence de la solution s'écrit

$$0 = \langle M_h\chi_h, \mathbb{1}\rangle = (\chi_h, \mathbb{1}) = \int_\Omega \chi_h \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

2.2 Noyau de l'opérateur discret du gradient

Soit $q_h \in \ker B_h^{\mathrm{T}}$, on a

$$b(\boldsymbol{v}_h,q_h) = \int_\Omega \boldsymbol{v}_h \cdot \boldsymbol{\nabla} q_h \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0, \qquad \forall \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}).$$

On montre dans le cas de deux discrétisations que cela implique que q_h est constant. Les démonstrations sont valables en toutes dimensions.

2.2.1 Cas des mini-éléments

Dans ce cas, les pressions sont discrétisées par des fonctions P_1, continues et affines par élément $K \in \mathscr{T}_h$ et les vitesses dans l'espace P_1^+ des éléments affines P_1 enrichis du mini-élément [13, page 213], dont la fonction de base ψ_b, appelée fonction bulle, est positive et s'annule sur les frontières de K.

Le champ $\boldsymbol{\nabla} q_h$ est donc constant par élément, et discontinu à leurs frontières : $\boldsymbol{\nabla} q_h = \sum_K \boldsymbol{c}_K \mathbb{1}_K$.

Pour tout $K_0 \in \mathscr{T}_h$, prenons $\boldsymbol{v}_{K_0} \in P_1^+(\mathscr{T}_h)$, avec tous ses degrés de liberté nuls sauf celui de la

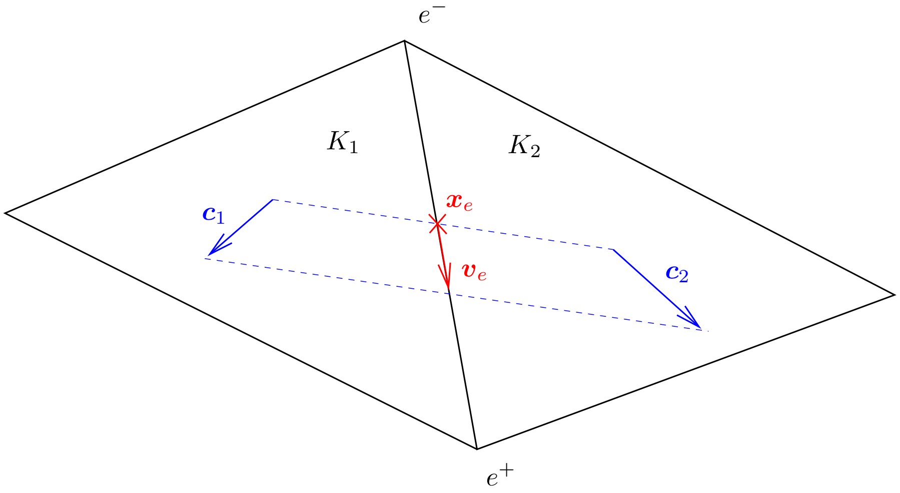


FIG. 8 – *Choix de* $\boldsymbol{v}_e$. *Nécessairement, par continuité de* q_h, *on a* $\boldsymbol{c}_1 \cdot \dfrac{e^+ - e^-}{|e|} = \boldsymbol{c}_2 \cdot \dfrac{e^+ - e^-}{|e|}$.

fonction bulle de l'élément K_0, qu'on prend égal à $\boldsymbol{c}_{K_0}$. On a alors

$$0 = \int_\Omega \boldsymbol{v}_{K_0} \cdot \boldsymbol{\nabla} q_h \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = |\boldsymbol{c}_{K_0}|^2 \int_{K_0} \psi_b \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

et $\boldsymbol{c}_{K_0}$ est donc nul.

Par conséquent, $\boldsymbol{\nabla} q_h$ est identiquement nulle sur Ω, donc q_h est constante par élément. Par continuité de q_h, elle est constante sur tout Ω.

2.2.2 Cas de l'élément de Taylor–Hood

Cette fois, les vitesses sont décrites par des polynômes de degré 2 sur les éléments, avec des degrés de liberté situés aux sommets et au milieu des arêtes du maillage.

Ici l'idée de la preuve vient de la démonstration de la condition Inf-Sup pour cet élément [5]. Soit e une arête d'un élément de $\mathscr{T}_h$, et $\boldsymbol{x}_e$ le degré de liberté situé au milieu de cette arête. On prend $\boldsymbol{v}_e \in P_2(\mathscr{T}_h)$, avec tous ses degrés de liberté nuls sauf celui en $\boldsymbol{x}_e$, où on prend $\boldsymbol{v}_e(\boldsymbol{x}_e) = [q_h(e^+) - q_h(e^-)]\dfrac{e^+ - e^-}{|e|}$ où e^+ et e^- sont les extrémités de e. Pour tout élément $K \in \mathscr{T}_h$ tel que $e \subset \partial K$, on a $\boldsymbol{c}_K \cdot (e^+ - e^-) = |e|(q_h(e^+) - q_h(e^-))$ (voir figure 8). Donc

$$\begin{aligned}
0 &= \int_\Omega \boldsymbol{v}_e \cdot \boldsymbol{\nabla} q_h \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= \sum_{K,\, e\subset\partial K} (q_h(e^+) - q_h(e^-))\frac{e^+ - e^-}{|e|} \cdot c_K \int_K \psi_{K,\boldsymbol{x}_e} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= (q_h(e^+) - q_h(e^-))^2 \sum_{K,\, e\subset\partial K} \int_K \psi_{K,\boldsymbol{x}_e} \mathrm{d}\boldsymbol{x}
\end{aligned}$$

où les fonctions de base $\psi_{K,\boldsymbol{x}_e}$ associées au degré de liberté $\boldsymbol{x}_e$ de K sont positives. Donc $q_h(e^+) = q_h(e^-)$ pour toute arête e du maillage, et q_h est constante sur Ω.

2.3 Estimation d'erreur

L'intérêt de cette partie est de donner une estimation de l'erreur commise dans la résolution par éléments finis du problème de Stokes, lorsque la donnée de χ est remplacée par une approximation χ_h. Ce résultat est ensuite utilisé pour faire l'estimation d'erreur du problème de Navier–Stokes discrétisé par la méthode de Lagrange–Galerkin, au paragraphe 3.3.

Théorème 4 (Erreur sur le problème de Stokes généralisé)

Si $(\boldsymbol{u},p)$ est la solution du problème (40) pour $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$ et vérifie l'hypothèse H2 de régularité, et si de plus χ_h vérifie $\|\chi - \chi_h\|_{0,\Omega} \leq C(h^{k+1} + \delta t)$ alors si les espaces discrets vérifient l'hypothèse H6, la solution $(\boldsymbol{u}_h,p_h)$ du problème (43) est telle que :

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{0,\Omega} &\leq C(h^{k+1} + \delta t) \\ \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{1,\Omega} &\leq C(h^{k} + \delta t) \end{aligned}$$

Pour alléger les notations de la preuve, on note $\mathscr{V}_h(\chi) = \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(\chi)$.

De façon similaire à Pironneau [39, page 118], on soustrait (43a) à (40a) pour $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{V}_h(0)$:

$$\begin{array}{rll} & a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v}_h) = -b(\boldsymbol{v}_h,p - p_h) & \forall \boldsymbol{v}_h \in \mathscr{V}_h(0) \\ \overset{\text{Déf. de } \boldsymbol{V}_h(0)}{\Leftrightarrow} & a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v}_h) = -b(\boldsymbol{v}_h,p - q_h) & \forall \boldsymbol{v}_h, q_h \in \mathscr{V}_h(0) \times Q_h \\ \Leftrightarrow & a(\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v}_h) = -a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{w}_h,\boldsymbol{v}_h) - b(\boldsymbol{v}_h,p - q_h) & \\ & & \forall \boldsymbol{w}_h,\boldsymbol{v}_h,q_h \in \mathscr{V}_h(\chi_h) \times \mathscr{V}_h(0) \times Q_h \end{array}$$

La coercivité de a sur $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{0}) \supset \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$ et la continuité de a et b permettent de déduire la majoration

$$\|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}_h\|_{1,\Omega} \leq C_a \|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} + C_{a,b} \|p - q_h\|_{0,\Omega} \qquad \forall \boldsymbol{w}_h, q_h \in \mathscr{V}_h(\chi_h) \times Q_h,$$

où les constantes ne dépendent que des formes bilinéaires a et b, et donc :

$$\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_{1,\Omega} \leq \inf_{\substack{\boldsymbol{w}_h \in \mathscr{V}_h(\chi_h) \\ q_h \in Q_h}} \left\{(1 + C_a) \|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} + C_{a,b} \|p - q_h\|_{0,\Omega}\right\} \tag{44}$$

À la différence du cas solénoïdal traîté par Pironneau, se cache ici la différence entre χ et χ_h dans le terme $\|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega}$: il y a donc plus qu'une erreur de projection dans la majoration ci-dessus.

On va utiliser différentes variables intermédiaires dans les différents espaces, comme illustré en figure 9. On décompose donc ce terme à l'aide d'un champ $\boldsymbol{v}_h$ pris arbitrairement dans $\mathscr{V}_h(\chi)$,

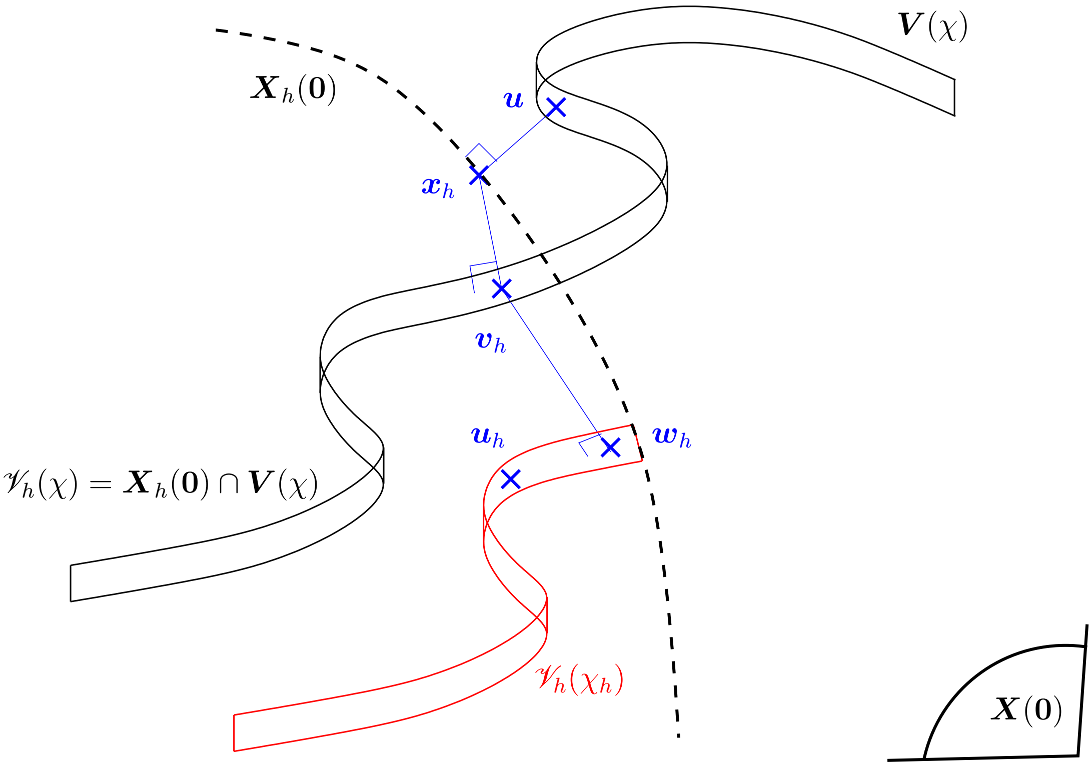

$\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$
$\boldsymbol{V}(\chi)$
$\boldsymbol{u}$
$\boldsymbol{x}_h$
$\boldsymbol{v}_h$
$\boldsymbol{u}_h$
$\boldsymbol{w}_h$
$\mathscr{V}_h(\chi) = \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \cap \boldsymbol{V}(\chi)$
$\mathscr{V}_h(\chi_h)$
$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{0})$

FIG. 9 – *Variables intermédiaires utilisées. (Les espaces représentés sont des espaces vectoriels ou affines, mais par souci de lisibilité cette représentation en fait abstraction).*

on a donc

$$\|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} \leq \|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{v}_h\|_{1,\Omega} + \|\boldsymbol{v}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} \,. \tag{45}$$

Nous fixerons d'abord $\boldsymbol{v}_h$ pour majorer le second terme (qui cette fois est bien une erreur de projection), puis nous fixerons $\boldsymbol{w}_h$ pour majorer le premier, qui contient l'écart entre χ et χ_h.

Pironneau montre que pour tout $\boldsymbol{z}_h$ dans $\mathscr{V}_h(0)^{\perp}$, l'orthogonal de $\mathscr{V}_h(0)$ dans $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$, la condition inf-sup de Babuška–Brezzi implique $k_b \|\boldsymbol{z}_h\|_{1,\Omega} \|q_h\|_{L^2(\Omega)/\mathbb{R}} \leq b(\boldsymbol{z}_h,q_h)$ pour tout $q_h \in Q_h$. Si l'on prend $\boldsymbol{x}_h$ arbitrairement dans $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$, il existe $\boldsymbol{v}_h \in \mathscr{V}_h(\chi)$ et $\boldsymbol{z}_h \in \mathscr{V}_h(0)^{\perp}$ tels que $\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{v}_h + \boldsymbol{z}_h$. Alors :

$$b(\boldsymbol{z}_h,q_h) = b(\boldsymbol{x}_h,q) - (\chi, q_h) = b(\boldsymbol{x}_h - \boldsymbol{u},q_h)$$

et donc par continuité de b, $\|\boldsymbol{z}_h\|_{1,\Omega} \leq C_b \|\boldsymbol{x}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega}$. On en déduit que pour ce choix de $\boldsymbol{v}_h$, on a pour tout $\boldsymbol{x}_h$ dans $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$,

$$\|\boldsymbol{v}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} \leq \|\boldsymbol{x}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} + \|\boldsymbol{z}_h\|_{1,\Omega} \leq (1 + C_b) \|\boldsymbol{x}_h - \boldsymbol{u}\|_{1,\Omega} \,. \tag{46}$$

Fixons maintenant $\boldsymbol{w}_h \in \mathscr{V}_h(\chi_h)$ comme la projection orthogonale de $\boldsymbol{v}_h$ sur ce sous-espace, c'est-à-dire tel que $(\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{r}_h) = 0$ pour tout $\boldsymbol{r}_h \in \mathscr{V}_h(\chi_h) = \boldsymbol{r}_{0,h} + \mathscr{V}_h(0)$. Cela implique donc que $\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{v}_h \in \mathscr{V}_h(0)^{\perp}$, et on peut appliquer le résultat de Pironneau déjà utilisé ci-dessus :

$$\begin{aligned} k_b \left\|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{v}_h\right\|_{1,\Omega} &\leq \frac{b(\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{v}_h, q_h)}{\left\|q_h\right\|_{L^2(\Omega)/\mathbb{R}}} = \frac{(\chi_h - \chi, q_h)}{\left\|q_h\right\|_{L^2(\Omega)/\mathbb{R}}} \qquad \forall q_h \in Q_h \\ &\overset{\text{Schwarz}}{\leq} \left\|\chi_h - \chi\right\|_{0,\Omega} \end{aligned} \tag{47}$$

On a ainsi dans (45) pour tout $\boldsymbol{x}_h$ dans $\boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0})$, avec (46) et (47),

$$\inf_{\boldsymbol{w}_h \in \mathscr{V}_h(\chi_h)} \left\|\boldsymbol{w}_h - \boldsymbol{u}\right\|_{1,\Omega} \leq C'_b \left\|\chi_h - \chi\right\|_{0,\Omega} + C''_b \left\|\boldsymbol{x}_h - \boldsymbol{u}\right\|_{1,\Omega},$$

ce qui donne dans (44) une estimation d'erreur en terme de l'erreur de projection et de l'erreur sur χ :

$$\left\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\right\|_{1,\Omega} \leq C'_{a,b} \left\|\chi_h - \chi\right\|_{0,\Omega} + \inf_{\substack{\boldsymbol{x}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \\ q_h \in Q_h}} \Big(C''_{a,b} \left\|\boldsymbol{x}_h - \boldsymbol{u}\right\|_{1,\Omega} + C_{a,b} \left\|p - q_h\right\|_{0,\Omega} \Big)$$

■

3 Démonstration du théorème

On démontre dans ce paragraphe que les hypothèses de récurrence du théorème 3, page 64, permettent de montrer les inégalités en l'instant t_{m+1}.

Lemme 11 (Technique pour les termes croisés en temps) .

On utilisera à plusieurs reprises le théorème de Pythagore généralisé, écrit sous la forme :

$$2\,(a - b, a) = \|a\|^2 - \|b\|^2 + \|a - b\|^2$$

Preuve. En effet,

$$2\,(a - b, a) = \|a\|^2 - (b, a) + \|a - b\|^2 + (a - b, b) = \|a\|^2 + \|a - b\|^2 - \|b\|^2$$

■

3.1 Estimation d'erreur du problème de convection-diffusion

On pose $\epsilon = \Phi - \Phi_h$, et on soustrait (39a) à (38a) :

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\delta \Phi_h^{m+1}}{\delta t}, \psi_h \right) + \left(\bar{F}(\Phi(\cdot,t_{m+1})) \boldsymbol{\nabla} \Phi(\cdot,t_{m+1}) - \bar{F}(\Phi_h^m) \boldsymbol{\nabla} \Phi_h^{m+1}, \boldsymbol{\nabla} \psi_h \right) \\ &= (\epsilon(\cdot,t_m) \chi_h^m, \psi_h) - (\Phi(\cdot,t_{m+1}) \chi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi(\cdot,t_m) \chi_h^m, \psi_h) \end{aligned}$$

Ou de façon équivalente, et en notant $\xi = \chi - \chi_h$:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\delta\epsilon}{\delta t}(\cdot,t_{m+1}),\psi_h\right) + \left(\bar{F}(\Phi_h^m)\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{\nabla}\psi_h\right) \\
&\quad = \left(\left(\frac{\delta}{\delta t} - \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}\right)\Phi(\cdot,t_{m+1}),\psi_h\right) - \left(\left[\bar{F}(\Phi(\cdot,t_{m+1})) - \bar{F}(\Phi_h^m)\right]\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{\nabla}\psi_h\right) \\
&\quad + (\epsilon(\cdot,t_m)\chi_h^m,\psi_h) + ([\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi(\cdot,t_m)]\chi(\cdot,t_{m+1}),\psi_h) \\
&\quad + (\Phi(\cdot,t_m)[\chi(\cdot,t_{m+1}) - \chi(\cdot,t_m)],\psi_h) + (\Phi(\cdot,t_m)\xi(\cdot,t_m),\psi_h)
\end{aligned} \tag{48}$$

3.1.1 Estimation L^2

On peut décomposer

$$\begin{aligned}
\delta t\frac{\delta\epsilon}{\delta t}(\cdot,t_{m+1}) =& \epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m) \ + \epsilon(\cdot,t_m) - \epsilon\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} \\
&+ \epsilon\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \epsilon\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}
\end{aligned}$$

(on a utilisé ici l'abus de notation de composition introduit page 48), on obtient alors, en prenant $\psi_h = \epsilon(\cdot,t_{m+1})$ et en appliquant le lemme 11 au terme $(\epsilon(\cdot,t_m),\epsilon(\cdot,t_{m+1}))$:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2\delta t}\left(\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\Omega}^2 - \|\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega}^2\right) + \left(\bar{F}(\Phi_h^m)\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right) \\
&\quad \leq \left|\left(\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\frac{\Phi\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \Phi\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\frac{\epsilon(\cdot,t_m) - \epsilon\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\frac{\epsilon\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \epsilon\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\left[\bar{F}(\Phi(\cdot,t_m)) - \bar{F}(\Phi_h^m)\right]\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\left[\bar{F}(\Phi(\cdot,t_{m+1})) - \bar{F}(\Phi(\cdot,t_m))\right]\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\epsilon(\cdot,t_m)\chi_h^m,\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| + \left|\left([\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi(\cdot,t_m)]\,\chi(\cdot,t_{m+1}),\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad + \left|\left(\Phi(\cdot,t_m)[\chi(\cdot,t_{m+1}) - \chi(\cdot,t_m)],\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| + \left|\left(\Phi(\cdot,t_m)\xi(\cdot,t_m),\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right)\right| \\
&\quad = F_1 + F_2 + \ldots + F_{10}
\end{aligned} \tag{49}$$

Dans les majorations qui suivent, on utilise beaucoup l'identité remarquable $2ab \leq \beta a^2 + \frac{1}{\beta}b^2$, où β est une constante arbitraire positive. Les constantes notées β_i pourront donc être fixées ultérieurement, contrairement aux constantes notées C_i, qui sont fixées par le choix de β_i. Toutes ces constantes sont bien sûr indépendantes de h et δt.

F_1 – D'après le lemme 6, on a :

$$F_1 \leq \beta_0 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{0,\Omega}^2 + C_1 \delta t \left\| \frac{\mathrm{D}^2\Phi}{\mathrm{D}t^2} \right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}$$

F_2 – D'après le lemme 9, on a :

$$\begin{aligned} F_2 &\leq \beta_0 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{0,\Omega}^2 + C_2 \left\| \boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_m) \right\|_{0,\infty,\Omega}^2 \\ &\qquad \left(\left\| \boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h(\cdot,t_m) \right\|_{0,\Omega}^2 + \delta t M_u^m \right) \\ &\leq \beta_0 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{0,\Omega}^2 + C_2' \left([\delta t + h^{k+1}]^2 + \delta t M_u^m \right) \end{aligned}$$

F_3 – On a par définition de la norme dans $W'(\Omega)$:

$$F_3 \leq \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{1,\Omega} \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_m) - \epsilon \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t} \right\|_{W'(\Omega)}$$

et en appliquant le lemme 10, on trouve :

$$F_3 \leq \beta_2 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{1,\Omega}^2 + C_3 (1 + C\delta t \left\| \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}) \left\| \epsilon(\cdot,t_m) \right\|_{0,\Omega}^2$$

F_4 – En utilisant l'inégalité de Hölder puis le lemme 4 :

$$\begin{aligned} F_4 &\leq C_4 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{0,\infty,\Omega} \left\| \frac{\epsilon \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \epsilon \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t} \right\|_{0,1,\Omega} \\ &\leq C_4' \left(\delta(h) \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{1,\Omega} + h^k [1 + \delta(h)] \left\| \Phi(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{k+1,\Omega} \right) \\ &\qquad \times \left\| \frac{\epsilon \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \epsilon \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t} \right\|_{0,1,\Omega} \end{aligned}$$

Donc d'après le lemme 9, et en utilisant l'hypothèse de récurrence pour majorer par une constante $\delta(h) \left\| \boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m) \right\|_{0,\Omega}$ (pour h assez petit) et avec l'hypothèse H7 sur δt :

$$\begin{aligned} F_4 &\leq \beta_2 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{1,\Omega}^2 + C_4'' \left(\left[\delta(h) \left\| \boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m) \right\|_{0,\Omega} \right]^2 + 1 \right) \\ &\qquad \times \left(\left\| \boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h(\cdot,t_m) \right\|_{0,\Omega}^2 + \delta t M_u^m \right) \\ &\qquad + C_4'' \Big(\underbrace{h^{k-1}[1 + \delta(h)]}_{\leq C} \left\| \Phi(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{k+1,\Omega} \Big)^2 h^2 \underbrace{\left\| \boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m) \right\|_{0,\Omega}^2}_{\leq (h^k + \delta t)^2} \\ &\leq \beta_2 \left\| \epsilon(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{1,\Omega}^2 + C_4''' \left\| \Phi(\cdot,t_{m+1}) \right\|_{k+1,\Omega} \left([\delta t + h^{k+1}]^2 + \delta t M_u^m \right) \end{aligned}$$

Ce terme exige donc $k \geq 2$.

F_5 – En utilisant que $\bar{F}$ est lipschitzienne, on trouve :

$$F_5 \leq \beta_1 \left\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\Omega} + C_5 \left\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\infty,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_m)\right\|^2_{0,\Omega}$$

F_6 – En utilisant l'hypothèse H5 et en remarquant que

$$\begin{aligned}\int_\Omega \left(\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi(\cdot,t_m)\right)^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} &= \int_\Omega \left(\int_{t_m}^{t_{m+1}} \frac{\partial\Phi}{\partial t}\mathrm{d}t\right)^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ &\overset{\text{Schwarz}}{\leq} \int_\Omega \int_{t_m}^{t_{m+1}} \mathrm{d}t \int_{t_m}^{t_{m+1}} \left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 \mathrm{d}t \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \leq \delta t \left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|^2_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}\end{aligned}$$

on trouve par l'inégalité de Hölder :

$$F_6 \quad \leq \quad \beta_1 \left\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\Omega} + C_6\delta t \left\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\infty,\Omega} \left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|^2_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}$$

F_7 – En introduisant $\xi = \chi - \chi_h$,

$$\begin{aligned}F_7 \quad &\leq \quad \left|(\epsilon(\cdot,t_m)\chi(\cdot,t_m), \epsilon(\cdot,t_{m+1}))\right| + \left|(\epsilon(\cdot,t_m)\xi(\cdot,t_m), \epsilon(\cdot,t_{m+1}))\right| \\ &\leq \quad \left\|\chi(\cdot,t_m)\right\|_{0,\infty,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_m)\right\|_{0,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega} \\ &\qquad + \left\|\xi(\cdot,t_m)\right\|_{0,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_m)\right\|_{0,\infty,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}\end{aligned}$$

Par le lemme 4, et l'hypothèse de récurrence, $\left\|\epsilon(\cdot,t_m)\right\|_{0,\infty,\Omega} \leq \delta(h) \left\|\epsilon(\cdot,t_m)\right\|_{1,\Omega} \leq \delta(h)[\delta t + h^k]$, et peut donc être borné pour h assez petit (et ce indépendamment de m), sous l'hypothèse H7.

$$F_7 \leq \beta_0 \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\Omega} + \left\|\nabla \cdot \boldsymbol{u}(\cdot,t_m)\right\|_{0,\infty,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_m)\right\|_{0,\Omega} + C_7' \left\|\chi_h^m - \chi(\cdot,t_m)\right\|^2_{0,\Omega}$$

F_8 – En procédant de même que pour F_6 :

$$F_8 \leq \beta_0 \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\Omega} + C_8\delta t \left\|\nabla \cdot \boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\infty,\Omega} \left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|^2_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}$$

F_9 – De même :

$$F_9 \leq \beta_0 \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\Omega} + C_9\delta t \left\|\Phi(\cdot,t_m)\right\|^2_{0,\infty,\Omega} \left\|\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t}\right\|^2_{L^2(t_m,t_{m+1};H^1(\Omega))}$$

F_{10} – Enfin :

$$\begin{aligned}F_{10} \quad &= \quad \left|(\xi(\cdot,t_m), \Phi(\cdot,t_m)\epsilon(\cdot,t_{m+1}))\right| \\ &\leq \quad \left\|\xi(\cdot,t_m)\right\|_{0,\Omega} \left\|\Phi(\cdot,t_m)\right\|_{0,\infty,\Omega} \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega} \\ &\leq \quad \beta_0 \left\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{0,\Omega} + C_{10} \left\|\Phi(\cdot,t_m)\right\|^2_{0,\infty,\Omega} \left\|\xi(\cdot,t_m)\right\|^2_{0,\Omega}\end{aligned}$$

■

En minorant $\bar{F}$ dans le membre de gauche de (49) par $k_{\bar{F}}$ grâce aux hypothèses de récurrence et H5, et en choisissant $\beta_2 = \min\left\{\frac{1}{8}; \frac{k_{\bar{F}}}{4}\right\}$, $6\beta_0 = \frac{1}{2} - 2\beta_2$ et $2\beta_1 = k_{\bar{F}} - 2\beta_2$, on obtient :

$$(1 - \delta t)\, \|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\|^2_{0,\Omega} \leq (1 + C_{11}\delta t)\, \|\epsilon(\cdot,t_m)\|^2_{0,\Omega} + C_{12}\delta t[\delta t + h^{k+1}]^2 + C_{13}\delta t^2 p_m$$

Ce résultat étant également vrai pour tout $m' \leq m$, on peut appliquer le lemme de Gronwall discret et obtenir :

$$\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\|^2_{0,\Omega} \leq \left(\|\epsilon(\cdot,t_0)\|^2_{0,\Omega} + \frac{C_{12}T}{1-\delta t}[\delta t + h^{k+1}] + C_{13}\frac{\delta t^2}{1-\delta t}\sum_{i=0}^{M} p_i \right) \exp\left(T\frac{1+C_{11}}{1-\delta t} \right)$$

et on remarque que $\sum_{m=0}^{M} p_m$ ne dépend pas de δt, en écrivant par exemple

$$\sum_{m=0}^{M} \left\| \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} \right\|^2_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))} = \left\| \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} \right\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))},$$

d'où le résultat pour $\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\Omega}$, pour δt suffisamment petit. Notons que nous avons utilisé pour majorer F_4 l'hypothèse de récurrence sur $\|\epsilon(\cdot,t_m)\|_{1,\Omega}$.

3.1.2 Estimation H^1

On repart de (48), et on prend cette fois-ci $\psi_h = \dfrac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}$. En notant $\bar{f}_h^m = \sqrt{\bar{F}(\Phi_h^m)}$, qui est bien définie, pour h assez petit, grâce aux hypothèses de récurrence et H5, on trouve par application du lemme 11 :

$$
\begin{aligned}
&\left\|\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}^2 + \frac{1}{2\delta t}\Big(\left\|\bar{f}_h^{m+1}\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2 - \left\|\bar{f}_h^{m}\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m})\right\|_{0,\Omega}^2\\
&\quad + \left\|\bar{f}_h^{m}\boldsymbol{\nabla}\left[\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)\right]\right\|_{0,\Omega}^2\Big)\\
&\le \left|\left(\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\Phi(\cdot,t_{m+1})-\Phi\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t}, \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\frac{\Phi\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}-\Phi\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t}, \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\frac{\epsilon(\cdot,t_m)-\epsilon\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t}, \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\frac{\epsilon\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}-\epsilon\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t}, \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\left[\bar{F}(\Phi(\cdot,t_m))-\bar{F}(\Phi_h^m)\right]\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1}), \boldsymbol{\nabla}\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\left[\bar{F}(\Phi(\cdot,t_{m+1}))-\bar{F}(\Phi(\cdot,t_m))\right]\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1}), \boldsymbol{\nabla}\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\epsilon(\cdot,t_m)\chi_h^m, \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\left[\Phi(\cdot,t_{m+1})-\Phi(\cdot,t_m)\right]\chi(\cdot,t_{m+1}), \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\Phi(\cdot,t_m)[\chi(\cdot,t_{m+1})-\chi(\cdot,t_m)], \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \left|\left(\Phi(\cdot,t_m)[\chi(\cdot,t_m)-\chi_h^m], \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right)\right|\\
&\quad + \frac{1}{2\delta t}\left\|(\bar{f}_h^{m+1}-\bar{f}_h^m)\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2\\
&= F_1' + F_2' + \ldots + F_{11}'
\end{aligned}
\tag{50}
$$

Les termes F_1', F_2' et F_7' à F_{10}' se majorent de la même façon que les termes F_i correspondants, faisant apparaître chacun une fois le terme

$$\beta_0'\left\|\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}^2.$$

Losrque la norme 1 de $\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)$ apparaît, on veut cependant faire apparaître des termes de la forme

$$\beta_1'\left\|\frac{1}{\sqrt{\delta t}}\boldsymbol{\nabla}[\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)]\right\|_{0,\Omega}^2$$

pour pouvoir les éliminer ensuite à l'aide du membre de gauche.

F'_3 – On a, en utilisant la démonstration de Süli [55, page 470] :

$$\begin{aligned}
F'_3 &\leq \beta'_0 \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} + C_3 \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_m) - \epsilon \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} \\
&\leq \beta'_0 \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} + \frac{C'_3}{\delta t^2} \sup_{\boldsymbol{x}\in\Omega} |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}\{\boldsymbol{x},t_{m+1};t_m\}|^2 \, \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|^2_{0,\Omega} \\
&\leq \beta'_0 \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} + C'_3 \, \|\boldsymbol{u}\|^2_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} \, \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|^2_{0,\Omega}
\end{aligned}$$

F'_4 – Par le lemme 9 :

$$\begin{aligned}
F'_4 &\leq \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\infty,\Omega} \left\| \frac{\epsilon \circ \boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \epsilon \circ \boldsymbol{X}^m_h\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t} \right\|_{0,1,\Omega} \\
&\leq C_4 \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\infty,\Omega} \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega} \left([h^{k+1} + \delta t]^2 + \delta t M^m_u \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

La technique employée par Süli [55] pour aboutir consiste à ne pas utiliser la même inégalité inverse du lemme 2 pour majorer la norme L^∞ selon que l'on multiplie par le h^{k+1} ou le δt du dernier terme. On commence par remarquer que pour $a, b, c \in \mathbb{R}^+$, on a $\sqrt{a + (b+c)^2} \leq \sqrt{a + b^2} + c$ pour réarranger ce dernier terme en $h^{k+1} + \left(\delta t^2 + \delta t M^m_u\right)^{\frac{1}{2}}$. Puis, en utilisant chacune des majorations de notre lemme 4 pour la norme L^∞, on obtient deux termes F'_{41} et F'_{42}, le premier faisant intervenir $\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)$ et le second $\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi(\cdot,t_m)$.

Le premier se majore comme chez Süli :

$$\begin{aligned}
F'_{41} &\leq C_{41} \frac{\delta(h)}{\delta t} \|\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)\|_{1,\Omega} \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega} \left(\delta t M^m_u + \delta t^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + C'_{41} h^k \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega} \\
&\leq C_{41} \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega} \, \delta(h) \left(\delta t M^m_u + \delta t^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + \frac{C_{41}}{\sqrt{\delta t}} \|\boldsymbol{\nabla}[\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)]\|_{1,\Omega} \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega} \, \delta(h) \left(M^m_u + \delta t\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + C'_{41} h^k \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|_{0,\Omega} \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega} \\
&\leq \beta'_0 \left\| \frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t} \right\|^2_{0,\Omega} + \frac{\beta'_1}{\delta t} \|\boldsymbol{\nabla}[\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)]\|^2_{0,\Omega} \\
&\quad + C''_{41} \left[h^{2k} + \delta(h)^2 (1 + \delta t) \left(M^m_u + \delta t\right) \right] \|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|^2_{0,\Omega}
\end{aligned}$$

Le second se majore comme dans F_4 (mais sans nécessité de récupérer un h puisque nous ne demandons qu'un ordre h^k pour l'estimation H^1), avec h suffisamment petit :

$$\begin{aligned}
F'_{42} &= C_{42}\left(h^k[2+\delta(h)]\right)\left\|\frac{\Phi(\cdot,t_{m+1})-\Phi(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{k+1,\Omega}\\
&\quad\times\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega}\left[\left(\delta t M_u^m+\delta t^2\right)^{\frac{1}{2}}+h^{k+1}\right]\\
&\leq C'_{42}\underbrace{(h^k[2+\delta(h)])}_{\leq C}\left[\left(\delta t M_u^m+\delta t^2\right)^{\frac{1}{2}}+h^{k+1}\right]\left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};H^{k+1}(\Omega))}\\
&\quad+C''_{42}\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega}
\end{aligned}$$

F'_5 – On a par la formule de Green, en utilisant la condition de Neumann homogène pour Φ :

$$\begin{aligned}
F'_5 &\leq \int_\Omega\left(\boldsymbol{\nabla}[\bar F(\Phi(\cdot,t_m))-\bar F(\Phi_h^m)]\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})+[\bar F(\Phi(\cdot,t_m))-\bar F(\Phi_h^m)]\Delta\Phi(\cdot,t_{m+1})\right)\\
&\qquad\times\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\
&\leq\Big(\left\|\bar F'(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_m)-\bar F'(\Phi_h^m)\boldsymbol{\nabla}\Phi_h^m\right\|_{0,\Omega}\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}\\
&\quad+\left\|\bar F(\Phi(\cdot,t_m))-\bar F(\Phi_h^m)\right\|_{0,\Omega}\|\Delta\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}\Big)\left\|\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}\\
&\leq\beta'_0\left\|\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}^2\\
&\quad+C_5\left(\left\|\bar F'(\Phi_h^m)\right\|_{0,\infty,\Omega}\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\|_{0,\Omega}+\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_m)\|_{0,\infty,\Omega}\left\|\bar F'(\Phi(\cdot,t_m))-\bar F'(\Phi_h^m)\right\|_{0,\Omega}\right)^2\\
&\qquad\times\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}^2+C_5\left\|\bar F(\Phi(\cdot,t_m))-\bar F(\Phi_h^m)\right\|_{0,\Omega}^2\|\Delta\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}^2
\end{aligned}$$

L'hypothèse H5 que $\bar F$ est de dérivée lipschitzienne permet donc d'utiliser l'hypothèse de récurrence pour majorer les deux derniers termes. Notons que c'est dans ce terme qu'apparaît la nécessité $\Phi\in W^{2,\infty}(\Omega)$, cette hypothèse peut donc être réduite à $W^{1,\infty}(\Omega)$ si $\bar F$ est une constante.

F'_6 – De même que pour F'_5, on obtient :

$$\begin{aligned}
F'_6 &\leq\beta'_0\left\|\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1})-\epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}^2\\
&\quad+C_6\delta t\left(\left\|\frac{\partial\boldsymbol{\nabla}\Phi}{\partial t}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}\left\|\bar F'(\Phi)\right\|_{0,\infty,\Omega}+\left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}\right)^2\\
&\qquad\times\|\boldsymbol{\nabla}\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}^2+C'_6\delta t\left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|_{L^2(t_m,t_{m+1};L^2(\Omega))}^2\|\Delta\Phi(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\infty,\Omega}^2
\end{aligned}$$

F'_{11} – Ce terme est non-nul seulement si $\bar F$ n'est pas constante.

On sait par l'hypothèse de récurrence que Φ_h^m est loin de zéro, en particulier on peut choisir, indépendamment de m, tel que $\Phi_h^m > -1/(2\alpha)$. L'hypothèse H5 nous assure donc

que $\bar{F}$ est minorée par une constante, et donc $x \to \sqrt{F(x)}$ est une fonction lipschitzienne pour une constante k_ε sur les valeurs que prend Φ_h^m. Donc $\left\|\bar{f}_h^{m+1} - \bar{f}_h^m\right\|_{0,\infty,\Omega} \leq k_\varepsilon \left\|\Phi_h^{m+1} - \Phi_h^m\right\|_{0,\infty,\Omega}$.
Par l'inégalité de Hölder, et le lemme 2 :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\delta t}\int_\Omega (\bar{f}_h^{m+1} - \bar{f}_h^m)^2 \boldsymbol{\nabla}\epsilon^2(\boldsymbol{x},t_{m+1})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} &\leq \frac{k_\varepsilon^2}{2\delta t}\left\|\Phi_h^{m+1} - \Phi_h^m\right\|_{0,\infty,\Omega}^2 \left\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2 \\ &\leq \frac{k_\varepsilon^2}{2h^2\delta t}\left\|\Phi_h^{m+1} - \Phi_h^m\right\|_{0,\Omega}^2 \left\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2 \\ &\leq \beta_5 \left\|\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2 \end{aligned}$$

pour tout $\beta_5 > 0$, avec h inférieur à h_0 suffisamment petit mais indépendant de m, et δt respectant l'hypothèse H7. En effet on peut majorer $\frac{k_\varepsilon^2}{2h^2\delta t}\left\|\Phi_h^{m+1} - \Phi_h^m\right\|_{0,\Omega}^2$ en utilisant les résultats déjà obtenus pour la norme L^2 :

$$\begin{aligned} &\frac{k_\varepsilon^2}{2h^2\delta t}\left\|\Phi_h^{m+1} - \Phi_h^m\right\|_{0,\Omega}^2 \\ &\quad\leq \frac{k_\varepsilon^2}{2h^2\delta t}\left(\left\|\Phi_h^{m+1} - \Phi(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2 + \left\|\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi(\cdot,t_m)\right\|_{0,\Omega}^2 + \left\|\Phi(\cdot,t_m) - \Phi_h^m\right\|_{0,\Omega}^2\right) \\ &\quad\leq C'_{11}\left(\frac{h^{2k}}{\delta t} + h^{k-1} + \frac{\delta t}{h^2}\right)\left(1 + \left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|_{L^\infty(L^2(\Omega))}^2\right) \end{aligned}$$

et, sous l'hypothèse H7, pour tout $\beta'_5 > 0$ il existe h_0 indépendant de m tel que pour tout $h < h_0$, $h^{2k-r} + h^{k-1} + h^{r-2} \leq \beta'_5$. ■

Dans (50), on peut minorer $\left\|\bar{f}_h^m \boldsymbol{\nabla}[\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)]\right\|_{0,\Omega}^2$ par $k_{\bar{F}}\left\|\boldsymbol{\nabla}[\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)]\right\|_{0,\Omega}^2$. Puis, on prend $\beta'_0 = 1/10$ et $\beta'_1 = k_{\bar{F}}/2$ afin d'annuler les termes

$$\left\|\frac{\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)}{\delta t}\right\|_{0,\Omega}^2, \qquad \frac{k_{\bar{F}}}{2\delta t}\left\|\boldsymbol{\nabla}\left[\epsilon(\cdot,t_{m+1}) - \epsilon(\cdot,t_m)\right]\right\|_{0,\Omega}^2$$

de part et d'autre de l'inégalité (50), et enfin $\beta_5 = 1/2$. Cela nous donne, en utilisant l'hypothèse de récurrence :

$$\begin{aligned} (1-\delta t)\left\|\bar{f}_h^{m+1}\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_{m+1})\right\|_{0,\Omega}^2 - \left\|\bar{f}_h^m\boldsymbol{\nabla}\epsilon(\cdot,t_m)\right\|_{0,\Omega}^2 \\ \leq C'_{12}[\delta t + h^k]^2\left[\delta t + \delta(h)^2\delta t\,(M_u^m + \delta t)\right] + C'_{13}\delta t^2 p_m \end{aligned}$$

Pour appliquer le lemme de Gronwall discret, en plus de remarquer que, comme précédemment, $\sum_{m=0}^M p_m$ est indépendante de δt, et de la même façon on utilise le fait que $(M_u^m + \delta t)$ a une somme de $m = 0$ à $M-1$ indépendante de δt, et que le facteur $\delta(h)^2\delta t$ est borné par hypothèse H7. Finalement, la minoration de $\left(\bar{f}_h^m\right)_m$ nous donne le résultat.

3.1.3 Estimation L^∞

Elle suit grâce au lemme 2. Le lemme 3 nous donne de plus les bornes exigées par l'hypothèse de récurrence, avec une constante indépendante de m. Par conséquent, pour tout ε, il existe $h_0 > 0$ tel que si $h < h_0$, on a $\left\|\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi_h^{m+1}\right\|_{0,\infty,\Omega} < \varepsilon$. En particulier, on peut prendre ε tel que $\varepsilon\alpha < 1$, et donc, puisque $\Phi(\boldsymbol{x}) \leq 1$ presque partout, $1 + \alpha\Phi_h^{m+1}(\boldsymbol{x}) \geq 1 - \varepsilon\alpha > 0$ pour tout $\boldsymbol{x}$. Cette propriété est essentielle pour poursuivre la démonstration, puisque $1 + \alpha\Phi_h^{m+1}$ apparaît en facteur de plusieurs termes pour lesquels on cherche une estimation d'erreur.

3.2 Erreur sur χ

On pose $\zeta = \chi - \Gamma_h$, on a alors par soustraction des équations (38b) et (39b) de la page 61 :

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1+\alpha\Phi_h^{m+1}}{\alpha}\zeta(\cdot,t_{m+1}), \psi_h\right)\\ &\quad= \left(\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\delta\Phi_h^{m+1}}{\delta t}, \psi_h\right) - \left([\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi_h^{m+1}]\chi(\cdot,t_{m+1}), \psi_h\right)\end{aligned}$$

Donc si l'on a les bornes données sur Φ par le paragraphe 3.1 avec $\varepsilon\alpha < 1$, on obtient de façon similaire aux lemmes 6 et 9, pour $\psi_h = \zeta(\cdot,t_{m+1})$ et quelque soit β positif :

$$\begin{aligned}\|\zeta(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\Omega}^2 \leq &\beta\,\|\zeta(\cdot,t_{m+1})\|_{0,\Omega}^2 + C_1\left(\left\|\frac{\mathrm{D}^2\Phi}{\mathrm{D}t^2}\right\|_{L^\infty(L^2(\Omega))}^2 + \left\|\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}\right\|_{L^\infty(L^2(\Omega))}^2\right)\delta t^2\\ &+ C_2\,\|\boldsymbol{u}(\cdot,t_m) - \boldsymbol{u}_h^m\|_{0,\Omega}^2\end{aligned}$$

On a ici besoin de la régularité L^∞ en temps de $\dfrac{\mathrm{D}^2\Phi}{\mathrm{D}t^2}$ et $\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}$, ce qu'on avait réussi à éviter auparavant. L'hypothèse de récurrence permet alors de conclure que $\left\|\chi - \Gamma_h^{m+1}\right\|_{0,\Omega} \leq C\left[\delta t + h^{k+1}\right]$.

L'équation (39c) est la projection de Γ_h^{m+1} sur $L_0^2(\Omega)$,

$$\chi_h^{m+1} = \Gamma_h^{m+1} - \frac{1}{|\Omega|}\left(\int_\Omega \Gamma_h^{m+1}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)\mathbb{1}$$

(le champ unité $\mathbb{1}$ étant bien contenu dans W_h), or, $\chi(\cdot,t_{m+1})$ étant dans $L_0^2(\Omega)$, on voit que

$$\begin{aligned}\left|\int_\Omega \Gamma_h^{m+1}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right| = \left|\int_\Omega \Gamma_h^{m+1} - \chi(\cdot,t_{m+1})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right| &\leq \left(\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_\Omega (\chi - \Gamma_h^{m+1})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)^{\frac{1}{2}}\\ &\leq C[\delta t + h^{k+1}]\end{aligned}$$

On conclut que $\left\|\chi_h^{m+1} - \chi\right\|_{0,\Omega} \leq \left\|\chi_h^{m+1} - \Gamma_h^{m+1}\right\|_{0,\Omega} + \left\|\Gamma_h^{m+1} - \chi\right\|_{0,\Omega} \leq C'[\delta t + h^{k+1}]$.

3.3 Estimation d’erreur du problème de Navier-Stokes

On procède à l’identique de Süli [55], avec quelques problèmes supplémentaires provenant des termes non-linéaires de Navier-Stokes non-homogène, et notre second membre non nul de l’équation de continuité.

Süli introduit une inconnue intermédiaire $\boldsymbol{w}_h$, qui est une « projection » de $\boldsymbol{u}$ sur $\boldsymbol{X}_h(0)$ au sens du problème de Stokes. À la différence de Süli, nous glissons ici de surcroît notre erreur sur le second membre de l’équation de continuité, ce qui va nous libérer dans la suite de cette particularité de nos équations.

Soient $(\boldsymbol{w}_h,s_h) \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \times Q_{0,h}$ tels que:

$$\big(2\bar{\Lambda}(\Phi_h^{m+1})\mathbb{D}(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{w}_h), \mathbb{D}\boldsymbol{v}_h\big) - (p - s_h, \nabla\cdot\boldsymbol{v}_h) = 0 \qquad \forall \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{X}_h(\boldsymbol{0}) \tag{51a}$$

$$(\nabla\cdot(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{w}_h), q_h) = (\chi - \chi_h, q_h) \qquad \forall q_h \in Q_h \tag{51b}$$

La proposition 4 nous garantit alors la petitesse de $\boldsymbol{u}-\boldsymbol{w}_h$.

Pour obtenir une équation sur l’erreur sur le problème complet, il nous reste à soustraire (39d) à (38c), en faisant le choix de tester $\Phi(\cdot,t_{m+1}) - \Phi_h^{m+1}$ contre des vitesses continues:

$$\begin{aligned} a_0\{\Phi(\cdot,t_{m+1}),\Phi_h^{m+1};\ \boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{v}_h\} + a_1\{\Phi_h^{m+1};\ \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\delta \boldsymbol{u}_h^{m+1}}{\delta t},\boldsymbol{v}_h\} & \\ + a_2\{\Phi_h^{m+1};\ \boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}) - \boldsymbol{u}_h^{m+1},\boldsymbol{v}_h\} - \big(p_h(\cdot,t_{m+1}) - p_h^{m+1}, \nabla\cdot\boldsymbol{v}_h\big) &= 0 \end{aligned}$$

où :

$$\begin{aligned} a_0\{\psi_1,\psi_2;\ \boldsymbol{v},\boldsymbol{v}'\} &= \alpha\left([\psi_1-\psi_2]\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{v}}{\mathrm{D}t},\boldsymbol{v}'\right) + \big(2[\Lambda(\psi_1)-\Lambda(\psi_2)]\mathbb{D}\boldsymbol{v},\mathbb{D}\boldsymbol{v}'\big) \\ &\quad -\frac{2}{3}\big([\Lambda(\psi_1)-\Lambda(\psi_2)]\nabla\cdot\boldsymbol{v},\nabla\cdot\boldsymbol{v}'\big) + \big([\psi_1-\psi_2]\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{v}'\big) \qquad (52) \\ a_1\{\psi;\ \boldsymbol{v},\boldsymbol{v}'\} &= \big((1+\alpha\psi)\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}'\big) \qquad (53) \\ a_2\{\psi;\ \boldsymbol{v},\boldsymbol{v}'\} &= \big(2\bar{\Lambda}(\psi)\mathbb{D}\boldsymbol{v},\mathbb{D}\boldsymbol{v}'\big) - \frac{2}{3}\big(\bar{\Lambda}(\psi)\nabla\cdot\boldsymbol{v},\nabla\cdot\boldsymbol{v}'\big) \qquad (54) \end{aligned}$$

On peut également extraire une information intéressante de la soustraction de (39e) à (38d) :

$$\big(\nabla\cdot(\boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}) - \boldsymbol{u}_h^{m+1}), q_h\big) = -\big(\chi(\cdot,t_{m+1}) - \chi_h^{m+1}, q_h\big) \qquad \forall q_h \in Q_h$$

En introduisant les notations

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h, \quad \boldsymbol{e}_\pi = \boldsymbol{u} - \boldsymbol{w}_h, \quad \boldsymbol{e}_h = \boldsymbol{u}_h - \boldsymbol{w}_h,$$

et en utilisant (51b), on obtient que

$$\nabla\cdot\boldsymbol{e}_h^{m+1} = 0 \tag{55}$$

ce qui en fait une fonction test rêvée.

En introduisant $\boldsymbol{w}_h$ dans a_1 et a_2, et s_h dans le terme de pression :

$$\begin{aligned} & a_1\{\Phi_h^{m+1};\ \frac{\delta \boldsymbol{e}_h^{m+1}}{\delta t},\boldsymbol{v}_h\} + a_2\{\Phi_h^{m+1};\ \boldsymbol{e}_h^{m+1},\boldsymbol{v}_h\} \\ & \quad = a_1\{\Phi_h^{m+1};\ \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\delta \boldsymbol{u}}{\delta t}(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{v}_h\} + a_1\{\Phi_h^{m+1};\ \frac{\delta \boldsymbol{e}_\pi}{\delta t}(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{v}_h\} \\ & \quad + \big(s_h(\cdot,t_{m+1}) - p_h^{m+1}, \nabla\cdot\boldsymbol{v}_h\big) - a_0\{\Phi(\cdot,t_{m+1}),\Phi_h^{m+1};\ \boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{v}_h\} \end{aligned}$$

3.3.1 Estimation L^2

Comme annoncé, on prend $\boldsymbol{v}_h = \boldsymbol{e}_h^{m+1}$. Le premier terme se dissèque ainsi :

$$\begin{aligned} \delta t\left(\Phi_h^{m+1}\frac{\delta \boldsymbol{e}_h^{m+1}}{\delta t},\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right) &= \int_\Omega \Phi_h^{m+1}(\boldsymbol{e}_h^{m+1})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} - \int_\Omega \Phi_h^{m+1}\boldsymbol{e}_h^{m}\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ &= \int_\Omega \Phi_h^{m+1}(\boldsymbol{e}_h^{m+1})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} - \int_\Omega \Phi_h^{m+1}\boldsymbol{e}_h^{m}\boldsymbol{e}_h^{m+1}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ & \quad \underbrace{+\int_\Omega \Phi_h^{m+1}(\boldsymbol{e}_h^{m} - \boldsymbol{e}_h^{m}\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\})\boldsymbol{e}_h^{m+1}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}}_{A_6+A_7} \end{aligned}$$

En posant $\varphi_h^m = \sqrt{1+\alpha\Phi_h^m}$ et en utilisant le lemme 11 :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t}\left(\|\varphi_h^{m+1}\boldsymbol{e}_h^{m+1}\|_{0,\Omega}^2 - \|\varphi_h^{m}\boldsymbol{e}_h^{m}\|_{0,\Omega}^2\right) + a_2\{\Phi_h^{m+1},\boldsymbol{e}_h^{m+1},\boldsymbol{e}_h^{m+1}\} \\ & \quad \le \left|\left(\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}(\cdot,t_{m+1}) - \frac{\boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}) - \boldsymbol{u}\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|\left(\frac{\boldsymbol{u}\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \boldsymbol{u}\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|\left(\frac{\boldsymbol{e}_\pi(\cdot,t_{m+1}) - \boldsymbol{e}_\pi(\cdot,t_m)}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|\left(\frac{\boldsymbol{e}_\pi(\cdot,t_m) - \boldsymbol{e}_\pi\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|\left(\frac{\boldsymbol{e}_\pi\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \boldsymbol{e}_\pi\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|\left(\frac{\boldsymbol{e}_h^m - \boldsymbol{e}_h^m\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|\left(\frac{\boldsymbol{e}_h^m\circ\boldsymbol{X}\{\cdot,t_{m+1};t_m\} - \boldsymbol{e}_h^m\circ\boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}}{\delta t},(\varphi_h^{m+1})^2\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right)\right| \\ & \quad + \left|a_0\{\epsilon(\cdot,t_{m+1});\ \boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1}),\boldsymbol{e}_h^{m+1}\}\right| + \frac{1}{2\delta t}\left\|(\varphi_h^{m+1} - \varphi_h^m)\boldsymbol{e}_h^m\right\|_{0,\Omega}^2 \\ & \quad = A_1 + A_2 + \dots + A_7 + B_1 + B_2 \end{aligned}$$

À l'exception de la présence de $(\varphi_h^{m+1})^2$, qui est borné dans L^∞, les termes A_i sont les mêmes que ceux rencontrés par Süli [55, page 469]. On ne détaillera donc pas leur majoration.

B_1 – On bénéficie de l'estimation d'erreur sur l'approximation de Φ, en profitant de la régularité supposée de $\boldsymbol{u}$ (hypothèse H2).

$$\begin{aligned}B_1 \le{}& \beta_0'' \left\|\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right\|_{0,\Omega} + \beta_1'' \left\|\mathbb{D}\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right\|_{0,\Omega}\\ &+ C_1\left(1+\left\|\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1})}{\mathrm{D}t}\right\|^2_{0,\infty,\Omega} + \|\mathbb{D}\boldsymbol{u}(\cdot,t_{m+1})\|^2_{0,\infty,\Omega}\right)\|\epsilon(\cdot,t_{m+1})\|^2_{0,\Omega}\end{aligned}$$

L'inégalité de Korn nous permet de conclure.

B_2 – Ce terme présente une difficulté supplémentaire, similaire à celle du terme F_{11}' :

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\delta t}\left\|(\varphi_h^{m+1}-\varphi_h^m)\boldsymbol{e}_h^m\right\|^2_{0,\Omega}\\ &\le \frac{k_\varepsilon'^2}{2\delta t}\left\|\Phi_h^{m+1}-\Phi_h^m\right\|^2_{0,\infty,\Omega}\|\boldsymbol{e}_h^m\|^2_{0,\Omega}\\ &\le \frac{k_\varepsilon'^2\delta(h)^2}{2\delta t}\left\|\Phi_h^{m+1}-\Phi_h^m\right\|^2_{1,\Omega}\|\boldsymbol{e}_h^m\|^2_{0,\Omega}\\ &\le \frac{3k_\varepsilon'^2\delta(h)^2}{2\delta t}\Big(\left\|\Phi_h^{m+1}-\Phi(\cdot,t_{m+1})\right\|^2_{1,\Omega} + \|\Phi(\cdot,t_{m+1})-\Phi(\cdot,t_m)\|^2_{1,\Omega}\\ &\quad + \|\Phi(\cdot,t_m)-\Phi_h^m\|^2_{1,\Omega}\Big)\|\boldsymbol{e}_h^m\|^2_{0,\Omega}\\ &\le C_2\left(\frac{h^{2k}\delta(h)^2}{\delta t} + h^k\delta(h)^2 + \delta t\delta(h)^2\right)\left(1+\left\|\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right\|^2_{L^\infty(H^1(\Omega))}\right)\|\boldsymbol{e}_h^m\|^2_{0,\Omega}\end{aligned}$$

et par l'hypothèse H7, ces termes sont bornés par une constante indépendante de h et m si $h < h_0$, où h_0 est indépendante de m. C'est ce terme qui impose la borne supérieure sur r dans l'hypothèse H7. ■

Le terme a_2 dans le membre de gauche permet, pour un bon choix des constantes β_i'' (voir Süli [55, page 473]), d'absorber les termes en $\boldsymbol{e}_h^{m+1}$. Le lemme de Gronwall discret s'applique donc à $\left\|\varphi_h^{m+1}\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right\|^2_{0,\Omega}$, et la minoration de $1+\alpha\Phi_h^{m+1}$ par $1-\alpha\varepsilon$ permet de conclure pour h (et donc ε) suffisamment petit.

Enfin, $\|\boldsymbol{e}(\cdot,t_{m+1})\|^2_{0,\Omega} \le \|\boldsymbol{e}_\pi(\cdot,t_{m+1})\|^2_{0,\Omega} + \left\|\boldsymbol{e}_h^{m+1}\right\|^2_{0,\Omega}$ nous donne le résultat souhaité, grâce au théorème 4 d'estimation d'erreur pour le problème de type Stokes (51).

3.3.2 Estimation H^1

Elle est très proche de celle de Süli, en faisant intervenir les mêmes arguments que pour l'estimation H^1 de Φ, paragraphe 3.1.2. Outre les termes de couplage en $\sqrt{\Lambda(\Phi_h^m)}$ et φ_h^m, on a à estimer les termes

$$B_1' = \left|a_0\left\{\epsilon(\cdot,t_{m+1});\ \boldsymbol{u},\frac{\boldsymbol{e}_h^{m+1}-\boldsymbol{e}_h^m}{\delta t}\right\}\right| \quad \text{et} \quad B_2' = \frac{1}{\delta t}\left\|2[\sqrt{\Lambda(\Phi_h^{m+1})}-\sqrt{\Lambda(\Phi_h^m)}]\mathbb{D}\boldsymbol{e}_h^m\right\|^2_{0,\Omega}.$$

On procède comme pour B_1 et B_2 ci-dessus. La preuve aboutit de la même façon qu'en L^2.

4 Conclusion

Le théorème 3 donne un résultat d'existence de la solution discrète (non trivial) et d'estimation d'erreur qui s'applique aux simulations effectuées avec l'élément de Taylor-Hood, qui vérifie les hypothèses sur les espaces d'éléments finis de H6. En 2D et pour $\bar{F}$ constante, comme c'est le cas dans les simulations présentées dans cette thèse, il impose une restriction sur le choix du pas de temps $\delta t = o(h^{1/2})$ (hypothèse H7). Cette restriction avait déjà été donnée par Süli pour le problème de Navier–Stokes homogène. La restriction pour $\bar{F}$ non constant, $\delta t = o(h^2)$, est par contre très sévère. Les tentatives de calcul avec cet algorithme s'étaient d'ailleurs soldées par des échecs (apparition d'instabilités). Un algorithme de point fixe sur Φ_h^{m+1} permettrait de résoudre le problème, en supprimant ce terme de l'estimation d'erreur.

De la même façon, δt ne doit pas être trop petit. Cette condition[1] vient de la discrétisation en temps de $(1+\alpha\Phi)\dfrac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}$ en l'instant t_{m+1} par

$$\frac{1}{\delta t}(1+\alpha\Phi_h^{m+1})[\boldsymbol{u}_h^{m+1} - \boldsymbol{u}_h^m \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}].$$

C'est cette discrétisation que nous avons prise dans les simulations. Cependant, à la lumière de l'estimation d'erreur, on voit que cette condition disparaît pour la discrétisation

$$\frac{1}{\delta t}(1+\alpha\Phi_h^{m+1})\boldsymbol{u}_h^{m+1} - (1+\alpha\Phi_h^m)\boldsymbol{u}_h^m \circ \boldsymbol{X}_h^m\{\cdot,t_{m+1};t_m\}.$$

La preuve ne prévoit pas que le maillage puisse varier d'une itération en temps à l'autre. Pour prendre en compte cette possibilité, il faut prouver[2] les inégalités inverses du lemme 2 pour des fonctions $f_{h_1} - g_{h_2}$, prises dans des espaces d'éléments finis définis sur deux maillages différents $\mathscr{T}_{h_1}$ et $\mathscr{T}_{h_2}$. Il faudrait alors montrer, soit que l'intersection de ces maillages ne génère pas une famille dégénérée de maillages (ce qui n'est probablement pas vrai si les maillages sont indépendants), soit que cette dégénérescence n'est pas problématique grâce à la bonne régularité de $f_{h_1} - g_{h_2}$. Par ailleurs, même alors, cette preuve ne donnerait pas de résultat pour des maillages adaptatifs, les estimations sont données pour la taille de la plus grande maille.

Cette preuve suppose également que l'intégration numérique des fonctions advectées par les caractéristiques $f_h \circ \boldsymbol{X}_h$ est faite de façon exacte. Cela est théoriquement possible, mais difficile en pratique (voir paragraphe 3 du chapitre III).

Le schéma de la preuve est essentiellement dû à Süli [55], qui l'a faite dans le cas du problème de Navier–Stokes homogène. Ainsi, le choix des fonctions tests et la technique de majoration de l'erreur des caractéristiques a été calqué sur cette preuve. Cependant, certaines démonstrations y sont inexactes (lemme 5) ou manquantes (lemme 8), et on a donc donné de nouvelles démonstrations de ces résultats (que l'on a faites, pour notre problème, dans le cadre généralisé d'une vitesse à divergence prescrite).

---

[1] Qui apparaît dans le terme B_2, paragraphe 3.3.

[2] Pour les termes F'_4 et F'_{11} du paragraphe 3.1.2.

Le problème de Navier–Stokes non-homogène avec diffusion de masse apporte par ailleurs de nouvelles difficultés. Tout d'abord, la résolution d'un problème de convection–diffusion en utilisant une approximation de la vitesse semble nécessiter des éléments finis de degré supérieur à 1 : le terme F_4 au paragraphe 3.1.1 réclame $k \geq 2$ dans notre estimation. Ensuite, puisque la densité n'est qu'approchée, nous devons nous assurer qu'elle reste loin de zéro, et donc donner une estimation L^∞ de l'erreur sur Φ. De la même façon, les nombreux termes non-linéaires de couplage entre Φ et $\boldsymbol{u}$ nécessitent des majorations en norme L^∞, qui font appel à des techniques de preuve peu usuelles.

Chapitre V

Simulation et validation pour les écoulements d'échange

1 Introduction

Les écoulements d'échange, ou *lock-exchange* en anglais, constituent une expérience classique d'écoulements gravitaires. Le dispositif est très simple : on divise un canal fermé en deux compartiments par une vanne verticale. Chaque compartiment est rempli avec un fluide de densité différente. Lorsque la vanne est ouverte à l'instant initial, les deux fluides s'échangent : une intrusion de fluide dense se propage en bas du compartiment qui contient le fluide léger, et réciproquement, une intrusion de fluide léger se propage en haut du compartiment de fluide dense (voir figure 10).

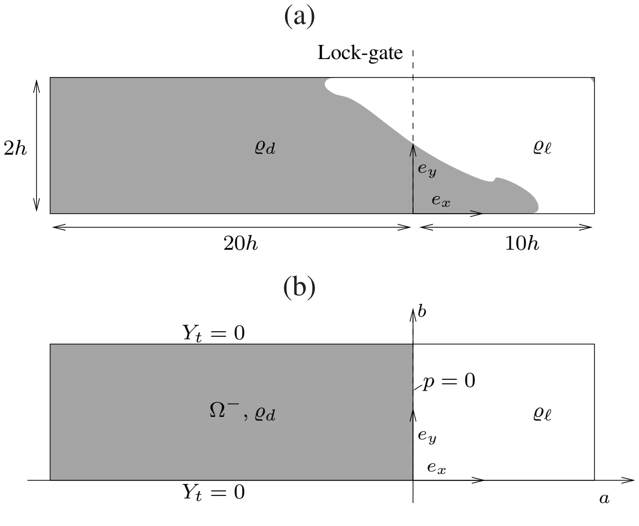


FIG. 10 – *Écoulement d'échange: (a) dispositif expérimental employé par Gröbelbauer* et al. *[24], avec* $h = 0.15$ *m ; (b) conditions aux limites utilisées dans l'analyse asymptotique (section E).*

L'élégante simplicité du dispositif a fait de ces écoulements un sujet classique de l'étude théorique des écoulements gravitaires (voir en particulier Benjamin [4]), et de plus, ils sont représentatifs de problèmes importants en sûreté industrielle, en cas de rupture d'une paroi séparant un fluide très dense ou très léger du reste des installations, dans le cas de stockage de gaz lourd par exemple.

Des études expérimentales se sont également intéressées à ces écoulements, mais se sont heurtées à des difficultés pratiques concernant les valeurs des paramètres accessibles en laboratoire. Les deux cas-limites des très faibles différences de densité (mélanges de gaz ou de liquides) et des très fortes différences (écoulement eau/air) sont en effet assez accessibles, mais entre ces extrêmes, une seule série d'expériences présentant des mesures pour les fronts d'intrusion dense pour $\alpha > 2.5$ est publiée, à notre connaissance. Il s'agit du travail de Gröbelbauer *et al.* [24], qui ont employé à cette fin des gaz de très fortes différences de densité, l'Hélium et le Fréon 22 (un gaz utilisé pour la réfrigération), atteignant $\alpha = 20.6$. Cet écart reste cependant encore relativement faible, comparé au rapport de densité entre l'eau et l'air ($\alpha = 10^3$), qui correspond au cas asymptotique où l'influence du fluide léger est négligeable. Même si l'on s'en tient aux gaz, le plus fort ratio à température ambiante est de l'ordre de 200 (hydrogène et radon). De nombreuses questions demeurent donc sur le comportement des fronts d'intrusion pour des écarts de densité intermédiaires, auxquelles ce chapitre propose d'apporter de premiers éléments de réponse au moyen de simulations numériques.

2 Simulations antérieures

2.1 Simulations de Gröbelbauer *et al.*

Dans le contexte de fortes différences de densité, les expériences de laboratoire sont d'une mise en place difficile, et plus encore les mesures et visualisations possibles restent limitées. C'est pourquoi, dès leur article de 1993, Gröbelbauer *et al.* [24] ont vu l'intérêt de compléter par des résultats numériques leurs résultats expérimentaux, qui donnaient les premières mesures sur des fronts d'intrusion denses.

Ces simulations ont été faites avec un logiciel commercial de volumes finis, *Phoenics*. Les équations utilisées, en particulier concernant l'équation de conservation des constituants, ne sont pas précisées dans l'article. On sait seulement qu'elles sont faites en 2D, qu'un modèle de turbulence $k - \epsilon$ a été employé et que la diffusion mutuelle des gaz a été fixée à une valeur importante, mais il est difficile de déduire un nombre de Schmidt équivalent d'après le texte de l'article :

> *The rate of mass transfer across the cell boundaries is here given as* $C\varrho_1 n_1 n_2 V$ *(*$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{s}^{-1}$*), where* n_i *are the volumetric fractions of species* i*,* ϱ_1 *and* V *the cell density and volume respectively* [avec les notations de cette thèse, $C\varrho\Phi(1-\Phi)\mathscr{V}$]. *To neglect mass transfer by letting* $C = 0$ *would be acceptable for the purpose of the present investigations, but it leads to serious convergence problems. The value* $C = 100$ *has been used in all our calculations (Converged solutions could not be obtained for C smaller than this value.)*

Les visualisations des résultats confirment que la diffusion de l'interface était très importante, y compris au niveau du front léger, où l'absence de turbulence ne justifie pas de mélange (voir paragraphe F).

Quelques précisions supplémentaires sont données sur les difficultés rencontrées, qui mettent en lumière différents aspects des simulations. Les maillages de volumes finis utilisés étaient cartésiens et uniformes, allant jusqu'à des résolutions de 76 par 30 cellules. Cependant, des maillages beaucoup plus grossiers (19 par 10) ont dû être utilisés quand le rapport de densité α augmentait à cause de problèmes de *« convergence numérique »* (*« The coarse grid was needed to obtain convergence for the highest density ratio* [c'est-à-dire $\alpha = 20.6$]. *»*) Un autre problème, également décrit comme un problème de *« convergence numérique »*, a amené les auteurs à prescrire, pour conditions initiales, $\Phi(t = 0) \in [0.001\,;\ 0.999]$. Il est probable que le schéma utilisé vérifiait un principe du maximum et permettait de conserver ensuite cette condition, mais l'origine de sa nécessité n'est pas donnée.

Concernant la vitesse du front d'intrusion de fluide léger dans le fluide dense, les résultats numériques de Gröbelbauer *et al.* approchent bien les expériences et la régression qu'ils proposent pour le nombre de Froude, y compris pour les rapports de densité les plus élevés ($\alpha = 20.6$). Les variations autour de la ligne $\mathrm{Fr}_\ell = \dfrac{\varrho^*}{\sqrt{2}}$ (cf. paragraphe F et figure 15), constatées pour les résultats expérimentaux (et aussi les résultats numériques de cette thèse) ne sont cependant pas observées. Par contre, la vitesse du front d'intrusion dense n'est approchée que pour des conditions proches des conditions de Boussinesq ($\alpha \leq 1.18$), elle est ensuite radicalement sous-évaluée.

Du fait de la diffusion importante dans les simulations, Gröbelbauer *et al.* concluent que celles-ci ont une certaine pertinence pour le calcul de la vitesse des fronts, mais que les autres quantités et les aspects qualitatifs des résultats de calcul ne sont pas réellement exploitables.

2.2 Simulations de Härtel *et al.*

Dans leur article de 2000, Härtel, Meigurg et Necker [25] présentent des simulations d'écoulements d'échange dans les conditions de Boussinesq ($\alpha \ll 1$). Ils utilisent des techniques spectrales et présentent des simulations en 2D avec des nombre de Reynolds jusqu'à $\mathrm{Re} = 3 \cdot 10^4$, et une simulation en 3D pour $\mathrm{Re} = 750$. Une conclusion intéressante issue de cette comparaison, est que les simulations bidimensionnelles peuvent prédire de façon fiable, non seulement des quantités globales comme le nombre de Froude (i.e., la vitesse du front), mais aussi des aspects plus *« subtils »* de l'écoulement, comme la structure du front d'intrusion.

La validation concerne principalement l'aspect du front de l'intrusion, qui est comparée à des résultats théoriques et expérimentaux. Un graphique valide également la dépendance entre la vitesse du front et le nombre de Reynolds (ou de Grashof dans leur cas), par comparaison à des données expérimentales.

2.3 Simulations de Birman *et al.*

Dans un article soumis au printemps 2004, Birman, Martin et Meiburg [8] étendent les simulations de Härtel *et al.* au cas de fortes différences de densité. Ils utilisent un modèle basé sur une moyenne volumique des vitesses des phases, du type (17), page 26, en négligeant de plus dans l'équation de la quantité de mouvement tous les termes en $1/(\mathrm{ReSc})$. La raison de cette hypothèse n'est pas donnée. Les méthodes numériques employées sont les mêmes que dans l'article de Härtel *et al.* [25], mais seuls des calculs bidimensionnels sont présentés.

Ces simulations ont été réalisées pour $\alpha \leq 4$, avec $\mathrm{Re} \simeq 1400$ et $\mathrm{Sc} = 1$, avec des conditions de glissement parfait aux parois et en supposant la viscosité cinématique constante (indépendante de la densité). Les vitesses présentent dans cette gamme de paramètres un assez bon accord avec les résultats expérimentaux de Gröbelbauer *et al.*. Pour $\alpha = 1.5$, des simulations sont faites pour différents nombres de Reynolds jusqu'à $\mathrm{Re} = 4200$, et montrent une invariance des vitesses de front pour $\mathrm{Re} \gtrsim 1400$, avec des conditions aux limites de glissement. Pour $\mathrm{Re} = 1400$ et $\alpha = 1.5$, un résultat de calcul avec des conditions d'adhérence à la paroi est montré, avec des vitesses de front significativement différentes de celles obtenues avec condition de glissement ; ce qui est en accord avec nos résultats (figure 18). Cependant, Birman *et al.* n'obtiennent, dans ce cas, pas de vitesse asymptotique du front dense : sur l'intervalle de temps présenté, la vitesse du front dense s'infléchit fortement.

Sur la plage de paramètres de cet article, les résultats numériques de Birman *et al.*sont en accord, tant qualitativement que quantitativement, avec les résultats présentés dans ce chapitre. Il semble cependant que notre approche numérique permette d'atteindre des valeurs plus grandes des paramètres, tant pour le nombre de Reynolds que pour la différence de densité, ce qui nous permet de reproduire de plus près les résultats expérimentaux et d'explorer le cas-limite des fortes différences de densité.

3 Article soumis à *Physics of Fluids*

Les simulations numériques présentées dans l'article qui suit sont donc les premières, à notre connaissance, qui traitent avec succès les écoulements d'échange avec une forte différence de densité.

Après avoir présenté succintement la dérivation du modèle (chapitre I) et la méthode numérique (chapitre IV), nous donnons deux validations des calculs effectués, par comparaison, d'une part, avec une analyse asymptotique du problème des écoulements d'échange pour les petits temps, et d'autre part, avec des mesures expérimentales de la vitesse du front dans la phase d'écoulement quasi-permanent du problème.

Pour les particularités et l'aspect pratique de la mise en œuvre des simulations numériques, on renvoie au paragraphe 2 du chapitre VI, étant donné que les difficultés sont du même ordre pour les écoulements d'échange et les avalanches.

NUMERICAL SIMULATIONS
OF HIGH DENSITY RATIO LOCK-EXCHANGE FLOWS

J. Étienne, E. J. Hopfinger and P. Saramito

(soumis à *Physics of Fluids* en mai 2004, version révisée: septembre 2004)

Abstract. In this paper direct numerical simulations of exchange flows of large density ratios are presented and are compared with experiments by Gröbelbauer *et al.* [J. Fluid Mech. **250**, 669 (1993)]. These simulations, which make use of a dynamic mesh adaptation technique, cover the whole density ratio range of the experiments and very good agreement with the experimental front velocities and the Froude number variations is obtained. Moreover, in order to establish more definitely the Froude number dependency on density ratio, the simulations were carried up to ratios of 100 compared with 21.6 accessible in experiments. An empirical law for the dense front Froude number as a function of the density parameter is proposed. The mathematical difficulty of the problem is discussed. This difficulty arises because, when the density ratio is large, the existence of a solution is dependent on a compatibility condition between the diffusion and viscous terms model. Moreover, a specific numerical technique is required to treat the finite, non-uniform divergence of the mass-averaged velocity field described by the continuity equation.

A Introduction

Numerical simulations of gravity driven flows are relatively rare compared with the number of experiments which considered various aspects of gravity currents and of density intrusions [53]. Recent numerical simulation [25, 38] of gravity currents are limited to small density differences where the Boussinesq approximation is applicable[8]. In certain geophysical flows, such as avalanches or pyroclastic flows, and in industrial applications related with heavy gases, the density change across the current fronts is, however, no longer small. Since theoretical models or experimental results which hold for small density ratios can, in general, not be extrapolated to these flows, large density ratio flows need specific attention.

Direct numerical simulations of gravity currents of large density ratios seem to be inexistent. Most of the experiments are also limited to low density ratios because these were mostly performed with liquids where it is difficult to establish large density ratios. Gröbelbauer *et al.* [24] conducted lock-exchange flow experiments with gases of density ratios up to 21.6. These flows exhibit some interesting behaviours. In the Boussinesq limit the flow is symmetric and the Froude number varies[61] like $\mathrm{Fr} = U_F/\sqrt{gh} = \varrho^*/\sqrt{2}$, where h is half the channel depth, U_F the front velocity, $\varrho^* = \sqrt{(\varrho_d - \varrho_\ell)/(\varrho_d + \varrho_\ell)}$ and ϱ_ℓ and ϱ_d are the densities of the light and dense fluids respectively. For large density ratios the exchange flow is asymmetric and asymptotic theories (for $\varrho_\ell \to 0$) give for the light front[4] $\mathrm{Fr}_\ell^\infty = 1/\sqrt{2}$ and for the dense front [54] $\mathrm{Fr}_d^\infty = 2\sqrt{2}$. The experimental results of Gröbelbauer *et al.* clearly show this divergence in the respective Froude number values and the results seem to approach the asymptotic limits. In the lock-exchange experiments of Keller and Chyou [33] which cover density ratios up to 10^3 (water/air) for the light front, the Froude number limit $1/\sqrt{2}$ is not reached. The reason for this are most likely viscous effects due to the small channel dimensions used in these experiments.

Lock-exchange flows are a good test for direct numerical simulations of flows of miscible, large density difference fluids. Numerical simulations can reach larger values of the density ratio than accessible in experiments, except for the limit-case of non-miscible liquid-gas exchange flows where density ratios of order 10^3 are reached, and can give additional information about the variation of the Froude number and the structure of the intrusion fronts. However, the existence of a solution of the Navier-Stokes equations in these conditions is subject to a condition either on the density ratio compared with Schmidt number, or on the form of the viscous and diffusion terms. Furthermore, due to the unusual condition of a finite, non-uniform divergence of the mass-averaged velocity field, a specific technique is needed in order to preserve this existence result when the equations are discretized. Finally, dynamic mesh adaptation is necessary when the density ratio is large. This was accomplished by using a finite element method.

In Section B the flow conditions, corresponding to the experiments of Gröbelbauer *et al.* are presented. The governing equations for large density ratio flows are derived in Section C and the numerical algorithm is presented in Section D. The initial behaviour of the front in the asymptotic limit of negligible ϱ_ℓ is derived in Section E and compared with numerical results. The numerical results of the front velocities and the variations of the Froude number are presented in Section F and compared with experiments.

B Lock-exchange flow conditions

When a horizontal channel is divided into two parts by a vertical splitter-plate and each chamber is filled with a fluid of different density, an intruding, gravity-driven flow occurs when the splitter-plate is removed (see Figure 10). It consists in the spread of a dense current of the heavier fluid under the lighter fluid, and of a lighter fluid current above the heavier fluid. This is referred to as lock-exchange flow. In the experiments by Gröbelbauer *et al.*, gases with a density ratio of up to 21.6 were released in an unevenly divided horizontal channel of half-height $h = 0.15$ m, as shown in Figure 10. The lock gate could be placed at a distance $20h$ from the right or left wall, and $10h$ from the other one. The passage time of either the light or dense front was measured at fixed positions on the horizontal walls of the larger chamber and the Froude number of each front for the various gas pairs was calculated. Table 1 lists the pairs of gases used and the range of the numerical simulations conducted. The dynamic viscosity μ of these gases lies between $12.57 \cdot 10^{-6}$ Pa·s (Freon 22), $18.64 \cdot 10^{-6}$ Pa·s (Helium) and $21 \cdot 10^{-6}$ Pa·s (Argon), while the kinematic viscosity ν ranges from $3.43 \cdot 10^{-6}$ m^2·s^{-1} (Freon 22) to $1.10 \cdot 10^{-4}$ m^2·s^{-1} (Helium). Thus, it is natural to keep the dynamic viscosity constant in the attempt to reproduce these experiments by numerical simulation. This might be different for liquids. The theoretical formulation below is sufficiently general to include liquids provided the physical properties are known.

In a lock-exchange flow, instabilities could develop in the wall boundary-layers at the top and the bottom, at the interface between the dense and light fluids and at the intrusion fronts.

Concerning the wall boundary-layer, it is well known[52] that for a flow past a flat plate, the boundary-layer becomes turbulent for $\mathrm{Re}_x \gtrsim 3.5 \cdot 10^5$. The Reynolds numbers of the two fronts based on distance $x \simeq Ut$ are $\mathrm{Re}_{x,d} = \varrho_d U^2 t/\mu$ and $\mathrm{Re}_{x,\ell} = \varrho_\ell U^2 t/\mu$. Assuming that both fronts have a velocity U of the same order of magnitude, the Reynolds numbers differ by the density ratio, $\mathrm{Re}_{x,d}/\mathrm{Re}_{x,\ell} = \varrho_d/\varrho_\ell$. The dense front boundary layer might reach the critical value, for instance at $x \simeq 8h$ for a density ratio of 9.93. For larger density ratios turbulence or at least instabilities could develop at even shorter distances. A transition to turbulence would cause a decrease of the front progression because of an increased wall shear-stress. In the experiments by Gröbelbauer *et al.* this is not clearly observed.

At the interface between the dense and light fluids, shear-layer instabilities develop which give rise to Kelvin–Helmholtz billows. The smoke visualization by Gröbelbauer *et al.* indicate some instability on the interface especially close to the dense front when the density ratio is large. The essential features of this instability is captured by the two-dimensional simulations.

C Governing equations

Let us consider an isothermal flow of local density ϱ and velocity $\tilde{\boldsymbol{u}}$ in a domain Ω over a time span $[0,T]$ (the symbol $\tilde{}$ denotes dimensional counterparts of quantities and operators otherwise used in non-dimensional form). For a perfect mixture of two incompressible fluids, of density ϱ_d (the heavier one) and of density ϱ_ℓ (the lighter one), the local density is $\varrho = \varrho_d \Phi_d + \varrho_\ell \Phi_\ell$ where Φ_d, Φ_ℓ are the volumic fraction of the constituents, $\Phi_d + \Phi_\ell = 1$ and both, ϱ_d and ϱ_ℓ, are constants. The characteristic density ratio is $\alpha = (\varrho_d - \varrho_\ell)/\varrho_\ell$.

Our main concern in this section is to take into account the mutual diffusion of the fluids in the non-homogeneous, incompressible Navier-Stokes equations.

C.1 Mass and constituent conservation equations

The mass conservation of constituent i across the surface $\mathscr{S}$ of a fixed volume $\mathscr{V}$ can be written as:

$$-\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \int_{\mathscr{V}} \varrho_i \Phi_i \mathrm{d}\mathscr{V} = \int_{\mathscr{S}} \varrho_i \Phi_i \tilde{\boldsymbol{u}}_i \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}\mathscr{S} + \int_{\mathscr{S}} \varrho_i \tilde{\boldsymbol{q}}_i \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}\mathscr{S}$$

where $\tilde{\boldsymbol{q}}_i$ is the part of the mass flux which is due to diffusion. Thus Φ_d and Φ_ℓ obey the equations:

$$\frac{\mathrm{D}\Phi_d}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \Phi_d \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = -\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{q}}_d \tag{56a}$$

$$\frac{\mathrm{D}\Phi_\ell}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \Phi_\ell \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = -\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{q}}_\ell \tag{56b}$$

Fick's law governs the diffusive fluxes of one fluid into the other with $\tilde{\boldsymbol{q}}_d = -\mathscr{D}_{d\ell}(\Phi_d)\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi_d$ and $\tilde{\boldsymbol{q}}_\ell = -\mathscr{D}_{\ell d}(\Phi_d)\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi_\ell = \mathscr{D}_{\ell d}(\Phi_d)\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\Phi_d$, where the $\mathscr{D}_{ij}$ coefficients may depend on the local composition Φ_d of the mixture. Since $\Phi_d + \Phi_\ell = 1$ we can use only one volume fraction $\Phi = \Phi_d$.

Now, if we sum (56a) and (56b) multiplied respectively by ϱ_d and ϱ_ℓ, we get:

$$\frac{\mathrm{D}\varrho}{\mathrm{D}\tilde{t}} + \varrho\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = \tilde{\nabla} \cdot \left[(\varrho_d \mathscr{D}_{d\ell} - \varrho_\ell \mathscr{D}_{\ell d}) \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi \right] \tag{57}$$

Because of mass conservation, the left hand side of equation (57) is necessarily zero. Now, in order for the right hand side to be zero for arbitrary distributions of the constituents, we need to have $\varrho_d \mathscr{D}_{d\ell} = \varrho_\ell \mathscr{D}_{\ell d} = \varrho_d \mathscr{D} F(\Phi)$, where $\mathscr{D}$ is a reference diffusivity and F is some function of the local composition, as suggested by Joseph and Renardy[31].

In non-dimensional form, when using these specific fluxes in (57) and (56a), the continuity equation and the corresponding equation of the volume fractions are:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = -\frac{\alpha}{1+\alpha\Phi} \frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t} \tag{58}$$

$$\frac{\mathrm{D}\Phi}{\mathrm{D}t} + \Phi \nabla \cdot \boldsymbol{u} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot (F(\Phi) \boldsymbol{\nabla} \Phi) \tag{59}$$

where $\mathrm{ReSc} = Uh/\mathscr{D}$ is the product of the Reynolds and Schmidt numbers, with $U = \sqrt{\alpha g h}$ the terminal velocity of a dense fluid parcel in the light fluid. The variables are non-dimensionalized by $x = \tilde{x}/h$, $u = \tilde{u}/U$ and $t = \tilde{t}U/h$.

Equation (58), $\nabla \cdot \boldsymbol{u} \neq 0$, is unusual. It arises because of the diffusion between the two species. It is readily seen from equations (58, 59) that when Sc tends to infinity, $\nabla \cdot \boldsymbol{u}$ goes to zero. Otherwise, diffusion will result in equal and opposite mass fluxes of constituents d and ℓ across the boundary of any small volume $\mathscr{V}(t)$ entrained by the flow velocity. As a result, since both constituents are incompressible and of different densities, the volume $\mathscr{V}(t)$ will vary; giving $\nabla \cdot \boldsymbol{u} \neq 0$. Note that diffusion effects are obviously negligible for Boussinesq conditions, $\alpha \ll 1$.

C.2 Momentum equation

We can assume that the mixture behaves like a Newtonian fluid, with a dynamic viscosity μ that may depend on the local composition of the mixture Φ. Therefore, we write $\mu(\Phi) = \eta\Lambda(\Phi)$, where η is a constant reference dynamic viscosity, and Λ a non-dimensional function of the composition of the mixture. Denoting $\mathbb{D}\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{\nabla u} + \boldsymbol{\nabla u}^{\mathrm{T}})/2$, the momentum equation[1] is:

$$(1+\alpha\Phi)\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} = -\boldsymbol{\nabla} p + \frac{1}{\mathrm{Re}} \nabla \cdot \left[\Lambda(\Phi) \left(2\mathbb{D}\boldsymbol{u} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \, \mathbb{I} \right) \right] - \frac{1+\alpha\Phi}{\alpha} \boldsymbol{e}_y \tag{60}$$

and here $\mathrm{Re} = \varrho_\ell U h / \eta$. For lock-exchange flows and most gravity-driven flows, the boundary condition for $\boldsymbol{u}$ is either $\boldsymbol{u}\,|_{\partial\Omega} = 0$ (no inflow, no slip condition) or $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0$ and a zero wall friction $\sigma \cdot \boldsymbol{n} - [(\sigma \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{n}]\boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}$, where $\boldsymbol{n}$ is the wall normal and $\sigma = 2\mathbb{D}\boldsymbol{u} - \frac{2}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u}\,\mathbb{I}$ (no inflow, slip condition). Then, for both mechanical and mathematical reasons, the boundary condition for Φ will be $\boldsymbol{\nabla}\Phi \cdot \boldsymbol{n} = 0$.

---

[1] Note that the choice of the reference velocity $U = \sqrt{\alpha g L}$ implies that the Froude is simply $\sqrt{\alpha}$ in the equations.

In Section B we have argued that for gases, $\Lambda(\Phi) \cong 1$. However, in this case, proofs of existence of a global weak solution [1] are subject to the condition that $2\mathrm{Sc} > \alpha$, which means that as far as we know the model may be ill-posed in other situations. There is no physical reason for the Schmidt number to behave this way when α varies; indeed, its value remains of order 1 for common gases. In practice, a blow-up of the numerical solution occured within the relevant time-range for lock-exchange flows for $\alpha \gtrsim 60$.

Bresch *et al.* [12], on the contrary, show that if the relation

$$\boldsymbol{\nabla}\Lambda(\Phi) = \frac{\alpha}{2\mathrm{Sc}}(1+\alpha\Phi)F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi \tag{61}$$

holds, then the unconditional existence of global weak solutions can be proved. This condition is never satisfied if we choose $\Lambda(\Phi) = 1$. If we take a constant kinematic viscosity $\nu = \mu/\varrho$, that is, if $\Lambda(\Phi) = 1+\alpha\Phi$, then the relation is matched for $\mathrm{Sc} = 1/2$, which is close to the actual Schmidt number for gas mixtures, and a diffusivity of the form $F(\Phi) = 1/(1+\alpha\Phi)$. This form of the mass diffusivity is a common choice, and can be shown to correspond to the case when the molecular diffusivity of species are equal and independent of the local composition of the mixture[14].

In numerical simulations, a non-constant F is nevertheless an additional difficulty, which requires a specific and computationally expensive treatment [see section 4]. Thus the numerical simulations presented here were all performed with a constant mass diffusivity ($F = 1$). This means that condition (61) was not satisfied in most numerical simulations, but nevertheless the solutions for constant kinematic viscosity ($\Lambda(\Phi) = 1+\alpha\Phi$) and $F(\Phi) = 1$ were stable in all cases (α up to 100 was tested). Tests were conducted for $\alpha = 20.6$, with $\Lambda = 1$ and $\Lambda = 1+\alpha\Phi$. The results showed that the choice of F has no effect on the front velocities.

It should be kept in mind that, when α is large, the meaning of the Reynolds number is very different in cases of $\Lambda(\Phi) = 1$ and $\Lambda(\Phi) = 1+\alpha\Phi$. Indeed, suppose two solutions of (60), one for each choice of Λ. The actual Reynolds number of the light front (i.e., that could be calculated *a posteriori* from measurements of the light front velocity) will be the same for both solutions, while the actual Reynolds number of the dense front is $\alpha+1$ times larger in the case of constant Λ than in the case of constant kinematic viscosity. This is because the kinematic viscosity of the dense fluid is $\alpha+1$ times smaller. The dilemna is that one model is not able to treat density ratios of $\alpha \gtrsim 60$, and the other does, strictly speaking, not conform to the conditions of the experiments considered, but remains stable.

Note also that numerical simulations can be found in literature (e.g. Ref. [10]) which are based on the volume-averaged velocity $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} + (\alpha/\mathrm{ReSc})F(\Phi)\boldsymbol{\nabla}\Phi$, because this vector field is solenoidal: $\nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0$. Nevertheless, this choice introduces additional inertial terms[14] of higher order in the transformed momentum equation, which cannot be neglected when α is large. The problem is not simplified in doing this.

D Numerical approach

The large density difference flows considered are composed of intrusion fronts[2], where density and velocity gradients are locally steep, and of large areas away from these fronts which have a uniform density and small velocity gradients away from the walls. This calls for a method capable of automatic and unconstrained mesh adaptation, since the location of the interface between dense and light parts of the flow is unknown. However, refining the mesh in areas of steep density gradients makes it difficult to control numerical stability conditions such as $\|\boldsymbol{u}\|\Delta t < \Delta x$, where Δt and Δx are the time-step and a local mesh-resolution indicator. Thus we use the method of characteristics for the time-discretisation of the convective part of the equations, which is not subject to such a condition [40]. For the space discretisation, we have used a finite elements method, for which mesh adaptation based on the error control is well developped and which allows to use the method of characteritics because the approximation of the velocity is a continuous function. A classical choice for solving the Stokes problem is obtained with the Taylor-Hood finite element [28], which is a piecewise quadratic approximation of the velocity and a piecewise linear one for the pressure. The volume fraction Φ is also discretised in a piecewise quadratic functional space.

The discretisation we have used is given in more detail in the Appendix, but one technical difficulty specific to high-density ratio Navier-Stokes equations needs to be pointed out here. The continuity equation (58) is $\nabla \cdot \boldsymbol{u} = -\chi$ for some function χ which is one of the unknowns of the problem. Now if there is no inflow at the boundary[3], it is clear from the divergence theorem that $-\int_\Omega \chi \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \nabla \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0$. In general, this is not true anymore for the numerical approximation χ_h of χ (where h denotes the diameter of the largest element in the mesh), and we have $\int_\Omega \chi_h \mathrm{d}\boldsymbol{x}$ of the same order like the numerical error. This is not sufficiently small to guarantee that an approximation $\boldsymbol{u}_h$ of $\boldsymbol{u}$ exists such that $\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h = -\chi_h$, and thus the numerical method will break down. In the Appendix we propose an additional projection step which resolves this problem without reducing the quality of approximation, and we show [see chapter IV] that this is optimal in the sense of a finite elements approximation.

The mesh adaptation is an iterative process : a first guess of the solution at time t^{n+1} is calculated on a uniform coarse mesh, and is used to generate a new mesh on which a better approximation of the solution can be calculated. When iterated, this procedure reaches a fixed point corresponding to the best approximation space of a given dimension for the solution [9]. This process is handled by the mesh generator BAMG [26] for both Φ and $\boldsymbol{u}$, using refinement ratios of order 10^3 between the coarsest triangle size and the finest one. Figure 11 shows the mesh refined around the vorticity-sheets of a dense intruding front. The whole of the finite elements resolution is embedded in the open-source C++ environment `rheolef` [50].

---

[2] Note that the sharpness of this front will only be governed by convection, and that away from the intrusion area, in shear-flow areas, the interface will be diffuse.

[3] If there is some inflow, a similar condition arises which yields the same problem.

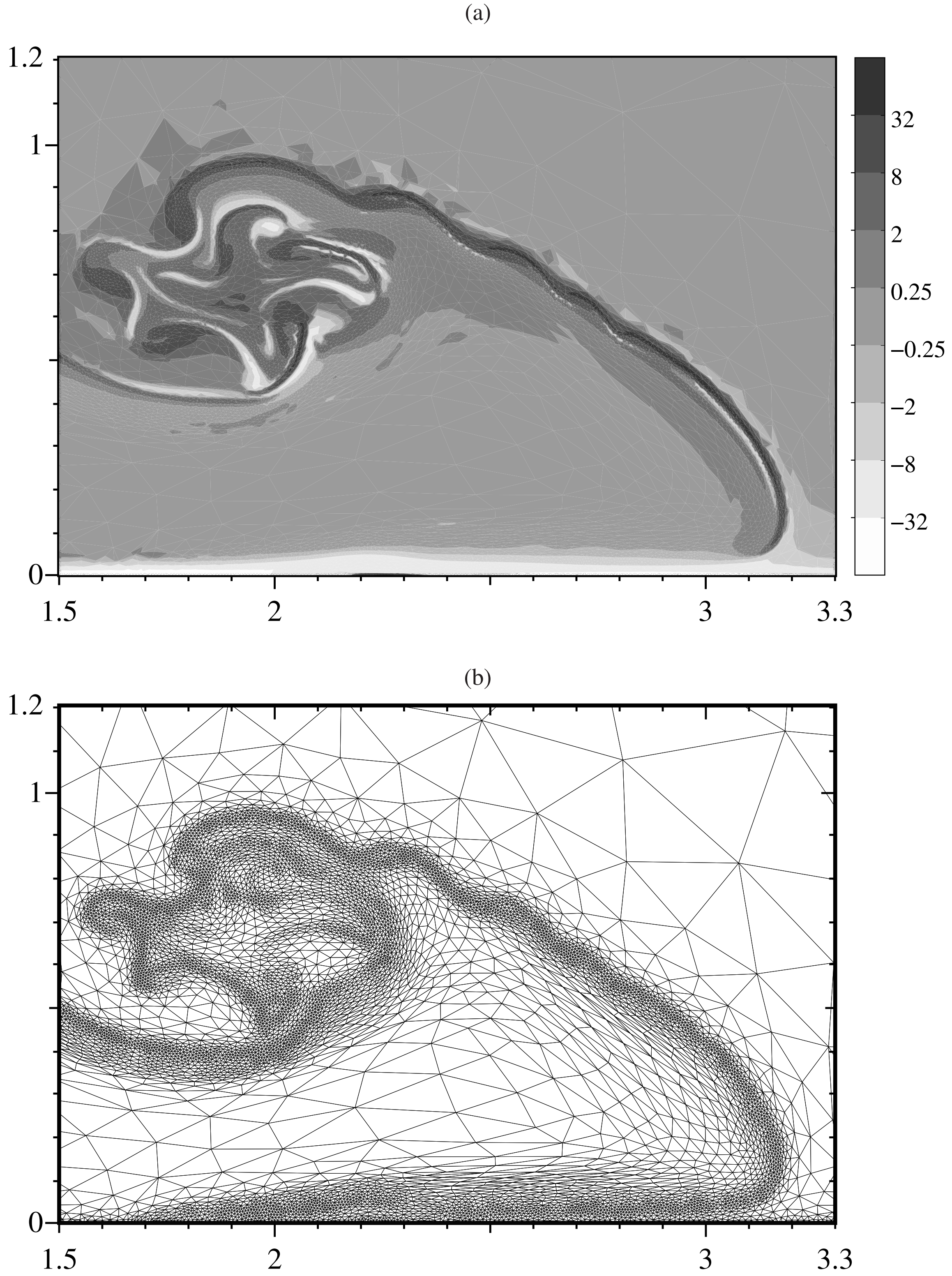


FIG. 11 – *Local zoom in domain Ω showing (a) the non-dimensional vorticity and (b) the mesh used for its calculation ; dense intruding front for $\alpha = 1.99$ at non-dimensional time $t = 6$.*

E Asymptotic behaviour at the release

Following Stoker[54], who obtained an asymptotic solution for the dam-break flow, we have conducted an analytical study of the onset of the lock-exchange flow in the case when α tends to infinity, noting that, away from the walls, viscous effects are negligible in the limit $t \to 0$. The boundary conditions are shown in Figure 10b, and in addition we suppose that the left boundary is at the infinity. Also, we suppose that the side walls of the channel allow a perfect slip and thus that the solution is spanwise-invariant (in z direction). Note that since we neglect ϱ_ℓ, only the left part of the domain Ω^- is considered in the calculation. Because α is then infinity, we do not use the same non-dimensional form as in Section C, but we use $U' = \sqrt{gh}$. Thus, in Lagrange representation with (a,b) the coordinates corresponding to the initial positions of the particles, if we denote $X(a,b;t)$ and $Y(a,b;t)$ the displacement of the particles and $p(a,b;t)$ the pressure, the Euler equations can be rearranged such that:

$$X_{tt}X_a + (Y_{tt} + 1)Y_a + \beta p_a = 0 \tag{62a}$$

$$X_{tt}X_b + (Y_{tt} + 1)Y_b + \beta p_b = 0 \tag{62b}$$

$$X_a Y_b - X_b Y_a = 1, \tag{62c}$$

in which the only dimensional quantities are the pressure and $\beta = h/\varrho_d {U'}^2$.

The initial conditions correspond to the gate in Figure 10 with the fluid at rest, so that a Taylor expansion of the displacements around $t = 0$ gives $X(a,b;t) = a + \gamma t^2 + o(t^2)$ and $Y(a,b;t) = b + \delta t^2 + o(t^2)$, and keeping the $O(t^2)$ terms in (62):

$$2\gamma(1 + \gamma_a t^2) + (2\delta + 1)\delta_a t^2 + \beta p_a = 0 \tag{63a}$$

$$2\gamma\gamma_b t^2 + (2\delta + 1)(1 + \delta_b t^2) + \beta p_b = 0 \tag{63b}$$

$$\gamma_a + \delta_b = 0 \tag{63c}$$

Summing equations (63a) and (63b), and taking the derivates with respect to b and a respectively, yields

$$\gamma_b - \delta_a = 0. \tag{64}$$

We recognize in equations (63c,64) the Cauchy-Riemann conditions, thus, it is necessary and sufficient that the complex function $\delta + i\gamma$ be an analytic function of $a + ib$ in its domain so that γ, δ are solutions of the problem.

Now we make use of the boundary conditions. Obviously, δ vanishes for $b = 0$ and $b = 2$. For $a = 0$, using the free surface condition $p = 0$, the first order term in (63b) gives $\delta = -1/2$, and for $a \to -\infty$ we have $\delta \to 0$. From equations (63c,64), we infer that $\boldsymbol{\nabla}\gamma \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega^-} = 0$.

Since the system (63c,64) implies that $\Delta\gamma = \Delta\delta = 0$ in Ω^-, there cannot be more than one solution for δ, and γ is unique up to a constant. This constant is easy to determine, since there must be no influx from infinity, so $\int_0^2 \gamma(a,b)\mathrm{d}b$ tends to 0 when a tends to infinity.

Using the mapping $\bar{w} = \cosh[\pi(-a + ib)/2]$, Stoker exhibits an analytic function which enforces the boundary conditions:

$$\delta + i\gamma = -\frac{i}{2\pi}\log\frac{\bar{w}-1}{\bar{w}+1}$$

Finally we obtain the initial acceleration:

$$2\gamma(a,b) = \frac{1}{\pi}\ln\left(\frac{\cos^2\frac{\pi b}{4} + \sinh^2\frac{\pi a}{4}}{\sin^2\frac{\pi b}{4} + \sinh^2\frac{\pi a}{4}}\right) \tag{65}$$

$$2\delta(a,b) = -\frac{2}{\pi}\arctan\left(\frac{\sin\frac{\pi b}{2}}{\sinh\frac{\pi a}{2}}\right) \tag{66}$$

The acceleration is independent of ϱ_d, but depends only on $U'^2/h = g$. There is a singularity in the acceleration at the junction points between the free surface and the walls. This of course would be damped by viscous forces, nevertheless we can expect a strong boundary layer at these points. Moreover, since the viscous effects propagate as νt, we can compare the velocity profile of the solution of a viscous model with the analytical results outside the boundary-layer.

In Figure 12 we have plotted the velocity obtained from asymptotic theory of the $a = 0$ particles at time t. For comparison, we have included the velocity of the particles at $x = 0$ at the same instant[4] obtained from a numerical simulation with $\alpha = 79$. Figure 12 shows that the numerical error is small.

F Comparison with experimental results

F.1 Evolution of front positions

In order to validate the numerical simulations presented in this paper, the conditions of the experiments of Gröbelbauer *et al.* were reproduced as closely as possible. No-slip boundary conditions, which are known to be the relevant conditions for gas-solid interfaces, were used for all boundaries, except when specified otherwise (see Figure 18). The parameters of seven of these experiments reproduced by numerical simulation are shown in Table 1. The characteristic Reynolds number of these flows was calculated with the viscosity μ_ℓ and density ϱ_ℓ of the lighter gas, $\mathrm{Re} = \varrho_\ell U h/\mu_\ell$. Since the dynamic viscosity is nearly invariant, the Reynolds number for a given density ratio α is directly proportional to ϱ_ℓ and, therefore, differs by nearly an order of magnitude, depending on whether the light gas is air or helium. It was found that for the large density ratio flows presented here, the influence of the characteristic Reynolds number on the front progression remains noticeable up to large values of Re. This is seen in Figure 13, where the Froude number

---

[4] Therefore, because the Eulerian coordinates of particles at $a = 0$ are $(x,\, y)^{\mathrm{T}} = t^2\,(\gamma(0,b),\, \delta(0,b))^{\mathrm{T}}$, the comparison is only valid up to the first order in t.

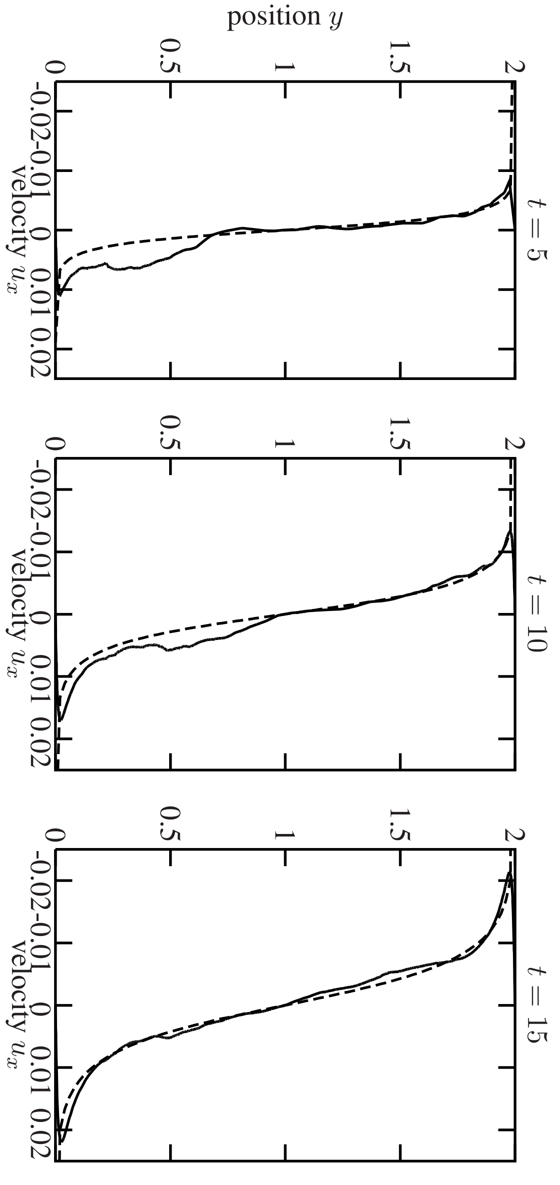


FIG. 12 – *Velocity profile at* $x = 0$ *and different instants of time. —, numerical results; −−, analytical asymptotic approximation (non-dimensional values)*

α	ϱ^*	U	Re		ν_ℓ
99.0	0.990	$12.1\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$1.20\cdot10^5$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
79.0	0.988	$10.8\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$1.07\cdot10^5$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
59.0	0.984	$9.32\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$9.25\cdot10^5$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
39.0	0.975	$7.58\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$7.53\cdot10^4$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
20.6	0.955	$5.51\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$7.49\cdot10^3$	R22 and Helium	$1.10\cdot10^{-4}$
			$5.47\cdot10^4$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
8.93	0.904	$3.63\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$4.93\cdot10^3$	Argon and Helium	$1.10\cdot10^{-4}$
			$2.92\cdot10^4$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
6.23	0.870	$3.03\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$4.12\cdot10^3$	Air and Helium	$1.10\cdot10^{-4}$
			$2.44\cdot10^4$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
1.99	0.706	$1.71\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$1.70\cdot10^4$	R22 and Air	$1.51\cdot10^{-5}$
1.18	0.609	$1.32\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$1.57\cdot10^4$	R22 and Argon	$1.26\cdot10^{-5}$
			$1.31\cdot10^4$	*no experiment*	$1.51\cdot10^{-5}$
0.38	0.400	$0.75\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$7.42\cdot10^3$	Argon and Air	$1.51\cdot10^{-5}$
0.11	0.228	$0.40\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	$4.80\cdot10^3$	CO_2 and Argon	$1.26\cdot10^{-5}$

TAB. 1 – *Values of the density parameter* ϱ^* *and Reynolds numbers in the experiments of Gröbelbauer* et al. *[24] and in the numerical simulations presented here.* $\alpha = (\varrho_d - \varrho_\ell)/\varrho_\ell$, $\varrho^* = \sqrt{(\varrho_d - \varrho_\ell)/(\varrho_d + \varrho_\ell)}$, $U = \sqrt{\alpha g h}$, $\mathrm{Re} = \varrho_\ell U h/\mu_\ell$, $\nu_\ell = \mu_\ell/\varrho_\ell$.

variation with Reynolds number is shown for two density ratios α ($\alpha = 6.23$ and $\alpha = 20.6$) for the light and dense fronts. Values obtained by Birman *et al.*[8] for $\alpha = 1.5$ are included for comparison. For this reason, additional numerical simulations were carried out for different values of α, keeping the kinematic viscosity of the light fluid unchanged (equal to the kinematic viscosity of air), so that the characteristic Reynolds number in these simulations varies like $\sqrt{\alpha}$.

The flow is two-dimensional except for the instability at the leading edge, giving rise to the so-called lobe-and-cleft structure, and, possibly, for the boundary layer instability of the dense intrusion when α is large. The Kelvin-Helmholtz instability at the interface is mainly a two-dimensional process but three-dimensional structures at a smaller scale are known to develop as well. All these three-dimensional motions resulting from instabilities can be assumed to have a negligible effect on the exchange flow and the simulations using the Boussinesq approximation conducted by Härtel *et al.* [25] support this assumption. This justifies to restrict our Direct Numerical Simulations to two-dimensions. The advantage of this restriction is its much lower computational cost, thus enabling us to use much finer meshes than in a three-dimensional simulation.

In Figure 14, we compare the numerical results obtained with the constant dynamic viscosity model ($\Lambda = 1$) with the experimental results of Gröbelbauer *et al.* For the light front the agreement between the arrivals of the simulated and the experimental fronts is very good. For the dense front, however, a nearly constant shift in time between the calculated and measured front arrivals is observed (Fig. 14b). Possible explanations for this time shift are either a large numerical inconsistency in time around $t = 0$ or a time lag in the measurements. The first hypothesis is eliminated by the asymptotic study of the onset of the lock-exchange carried out in section E, showing that the numerical solution does fit the analytical prediction. Thus, we are left to suppose that there is

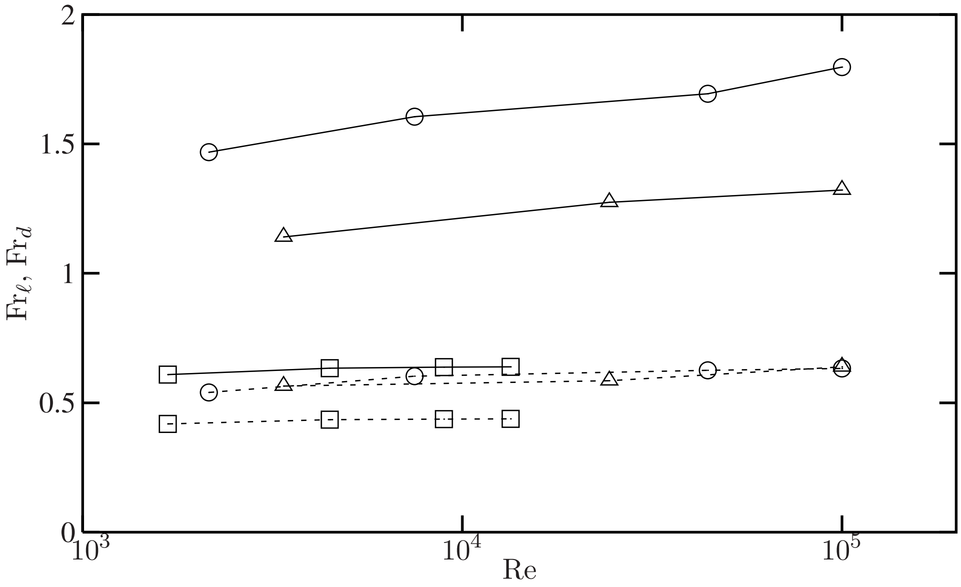


FIG. 13 – *Froude number dependance on the Reynolds number of the light and dense fronts. Froude number of the light front* Fr_ℓ*: - ○ -,* $\alpha = 20.6$ *and* $\Lambda = 1$*; - △ -,* $\alpha = 6.23$ *and* $\Lambda = 1$*; - □ -, Birman* et al. *[8],* $\alpha = 1.5$ *and* $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$*. Froude number of the dense front* Fr_d*: —○—,* $\alpha = 20.6$ *and* $\Lambda = 1$*; —△—,* $\alpha = 6.23$ *and* $\Lambda = 1$*; —□—, Birman* et al. *[8],* $\alpha = 1.5$ *and* $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$.

either a uniform time lag in the measured arrival time of the front, which may be due to a detection problem, or that the time shift is due to the opening of the gate. Gröbelbauer *et al.* claim that its manual opening was fast enough and did not induce a large scatter in their measurements, but their chief concern was the established front velocity and not the initial acceleration. One referee pointed out that the front detection probes were located at a distance from the floor or the ceiling amounting to 25% of the total height. The foremost front considered in the numerical results may, therefore, have a consistent lead over the front position detected by the probes. This may not explain the whole difference but would account for part of it.

F.2 Variation of Froude number with density ratio

In Figures 15 and 16, we compare experimental and numerical Froude numbers, $\mathrm{Fr}_\ell = U_\ell/\sqrt{gh}$ and $\mathrm{Fr}_d = U_d/\sqrt{gh}$, of both the light and dense fronts for different density ratios. We use the same density parameter as the one introduced by Gröbelbauer *et al.*, that is

$$\varrho^* = \sqrt{\frac{\varrho_d - \varrho_\ell}{\varrho_d + \varrho_\ell}}.$$

Since the Froude number only accounts for the established velocity of the front, the shift in front arrival between numerical and experimental results has no effect.

It is seen in Figure 15 that, for the light front, the constant dynamic viscosity model ($\Lambda = 1$) is in close agreement with the experiments of Gröbelbauer *et al.*. It is interesting to note that both the

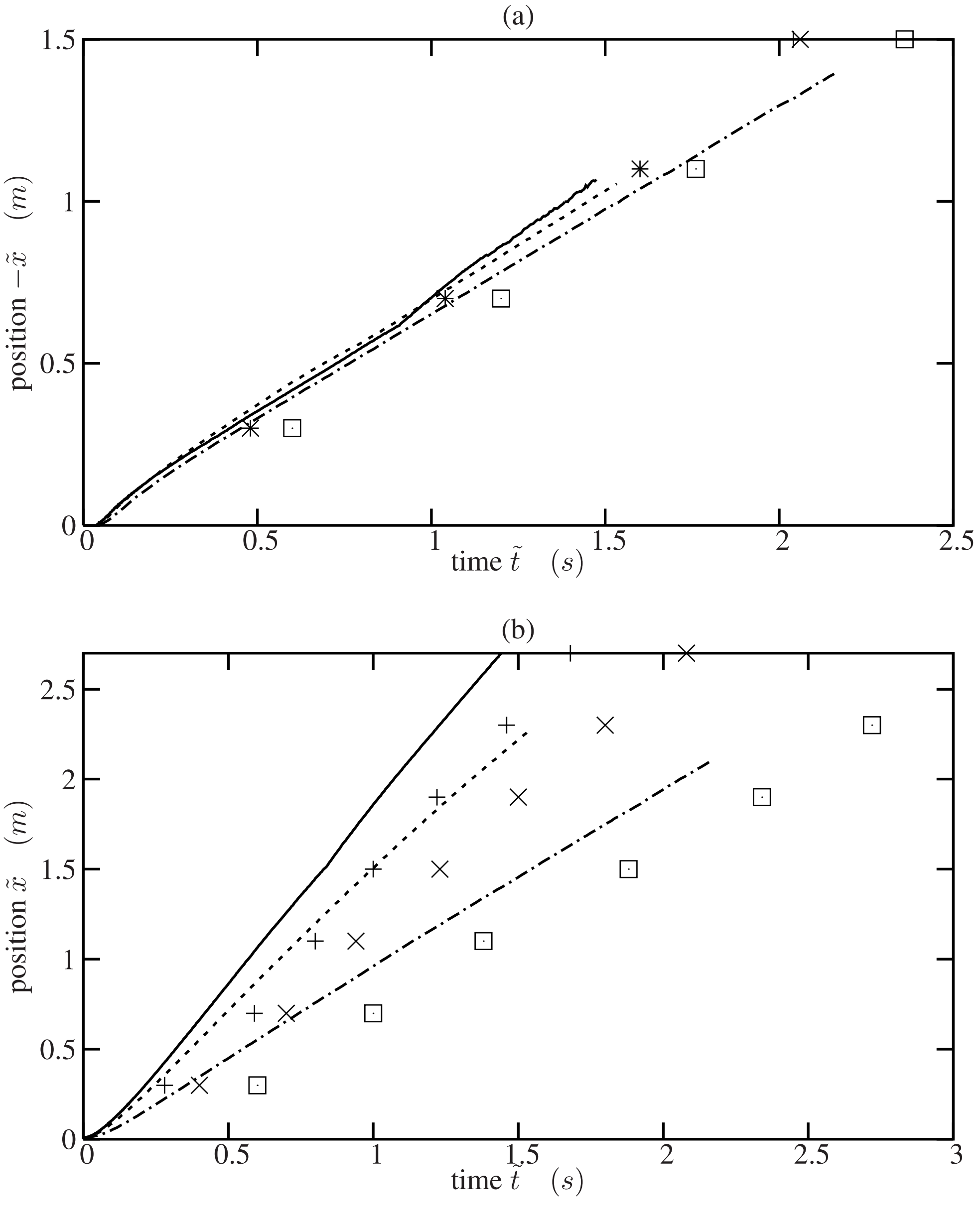


FIG. 14 – *Comparison of the numerical and experimental results (in dimensional units). Plot (a) light front, plot (b) dense front.* —, *numerical results for* $\alpha = 20.6$, *and* $+$, *experimental values.* - - -, *numerical results for* $\alpha = 8.93$, *and* $\times$, *experimental values.* $- \cdot -$, *numerical results for* $\alpha = 1.99$, *and* $\square$, *experimental values. The Reynolds number in the simulations is the same as in the experiments.*

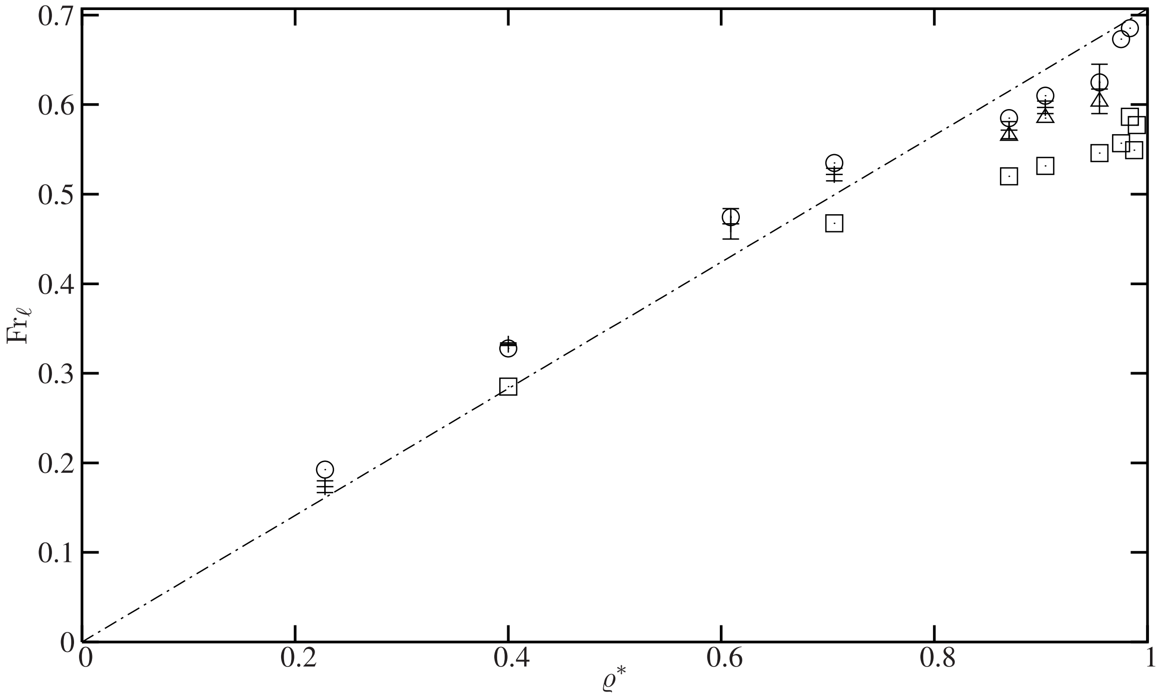


FIG. 15 – *Froude number of the light front* Fr_ℓ *versus* ϱ^* *in experiments and numerical simulations for both viscosity models.* $+$, *experimental values;* $\circ$, *numerical simulations with constant dynamic viscosity model (*$\Lambda = 1$*) and* $\mathrm{Re} = \varrho_{air} h\sqrt{\alpha g h}/\mu_{air}$*;* $\square$, *numerical simulations with constant kinematic viscosity model (*$\Lambda = 1 + \alpha\Phi$*) and* $\mathrm{Re} = \varrho_{air} h\sqrt{\alpha g h}/\mu_{air}$*;* $\triangle$, *numerical simulations with constant dynamic viscosity model (*$\Lambda = 1$*) and* $\mathrm{Re} = \varrho_{He} h\sqrt{\alpha g h}/\mu_{He}$*. Error bars for the experimental values represent the discrepancies found between Figures 2 and 6 in the article by Gröbelbauer* et al. *[24]* $- \cdot -$, *joins the theoretical limits for* $\varrho^* = 0$ *and* $\varrho^* = 1$ *according to* $\mathrm{Fr}_\ell = \dfrac{\varrho^*}{\sqrt{2}}$.

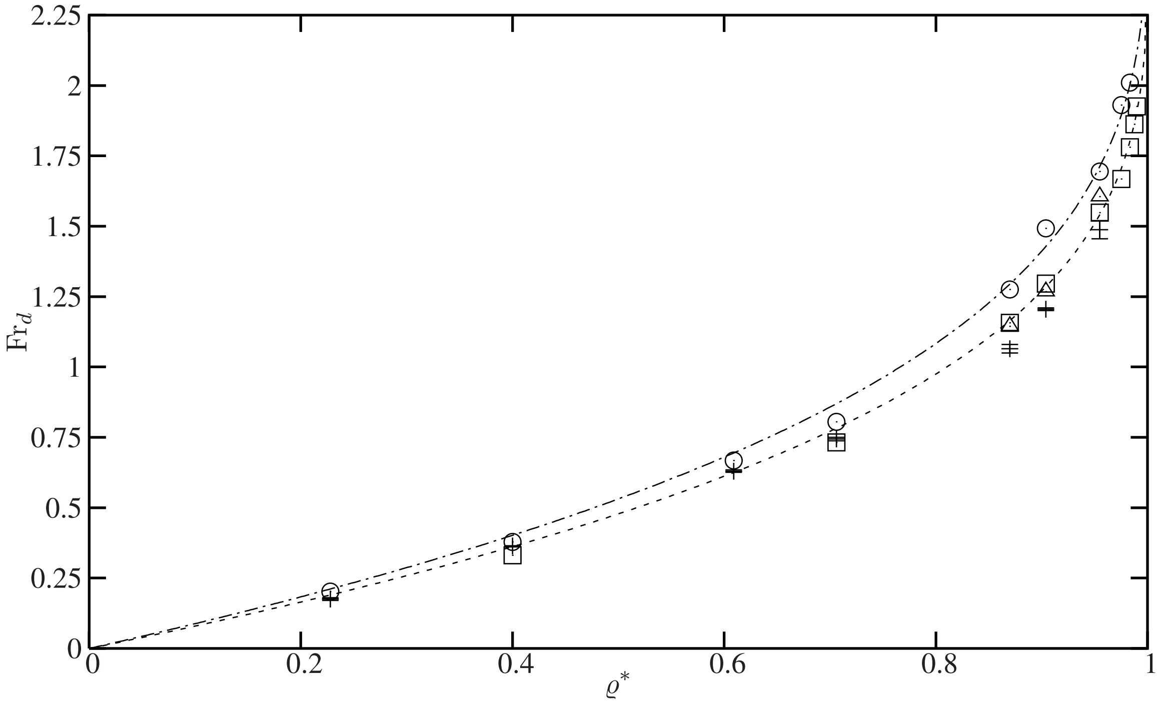


FIG. 16 – *Froude number of the dense front* Fr_d *versus* ϱ^* *in experiments and numerical simulations for both viscosity models. For symbols see Figure 15;* $- \cdot -$, $2\sqrt{2}\left(1-(1-\varrho^*)^{0.3}\right)$*;* - - -, $1.8\sqrt{2}\left(1-(1-\varrho^*)^{0.3}\right)$.

numerical and experimental results concerning Fr_ℓ deviate from the straight line $\varrho^*/\sqrt{2}$. Nevertheless, the numerical results carried to $\alpha = 59$ show that when Re is large, $\mathrm{Re} = (\varrho_{\text{air}}\sqrt{gh}/\mu_{\text{air}})\sqrt{\alpha}$ (that is keeping the same light fluid), the non-dissipative limit $\mathrm{Fr}_\ell^\infty = 1/\sqrt{2}$ is approached. The Froude number values obtained for large α and for Reynolds numbers corresponding to experiments are only slightly lower. In the same figure, we show the results obtained with the constant kinematic viscosity model ($\Lambda = 1 + \alpha\Phi$); this increases the dense fluid viscosity by the density ratio $\alpha + 1$. The results indicate that this model is clearly not consistent with the experiments by Gröbelbauer *et al.* and neither approaches the asymptotic limit; the velocity is strongly reduced by the increase of viscosity of the dense fluid. The results come actually closer to the experimental observations of Keller and Chyou [33] where viscous effects are important.

Figure 16 shows that for the dense front the constant kinematic viscosity model ($\Lambda = 1 + \alpha\Phi$) as well as the dynamic viscosity model ($\Lambda = 1$) for Reynolds numbers corresponding to the experiments of Gröbelbauer *et al.*fit closely the experiments. The simulations with larger Re ($\varrho_\ell = \varrho_{\text{air}}$) and constant dynamic viscosity give slightly higher values of Fr_d when α is large. The data points can be closely fitted by a power law of the form

$$\mathrm{Fr}_d = \mathrm{Fr}_d^\infty \left[1 - (1-\varrho^*)^n\right].$$

From the logarithmic plot shown in Figure 17a, it is seen that the high Reynolds number results

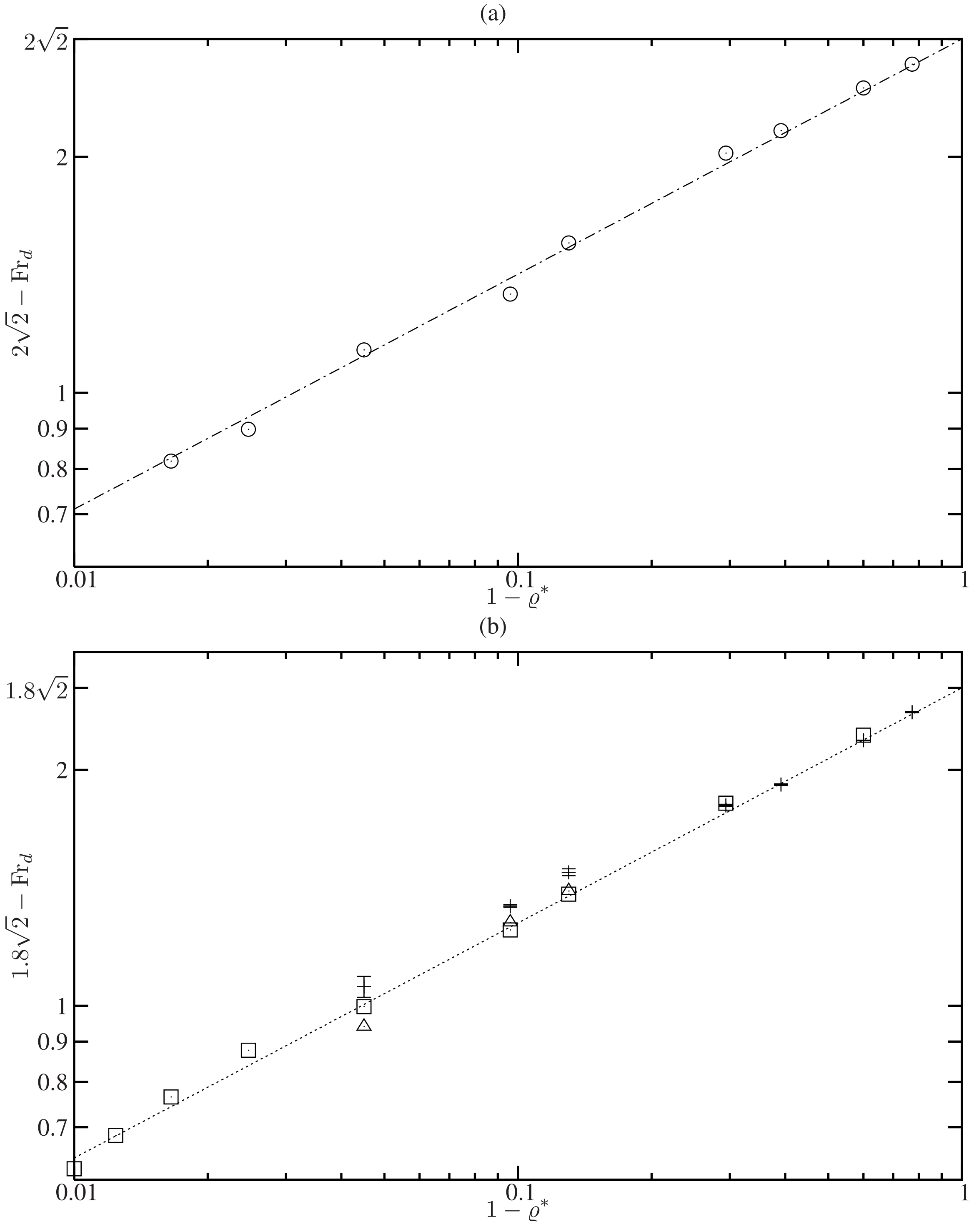


FIG. 17 – *Correlation law between Froude number of the dense front* Fr_d *and* $1-\varrho^*$. *(a),* $\circ$, *numerical simulations with constant dynamic viscosity model (*$\Lambda = 1$*) and* $\mathrm{Re} = \varrho_{air} h\sqrt{\alpha g h}/\mu_{air}$; $- \cdot -$, $2\sqrt{2}\left(1-(1-\varrho^*)^{0.3}\right)$. *(b),* $+$, *experimental values;* $\square$, *numerical simulations with constant kinematic viscosity model (*$\Lambda = 1+\alpha\Phi$*) and* $\mathrm{Re} = \varrho_{air} h\sqrt{\alpha g h}/\mu_{air}$; $\triangle$, *numerical simulations with constant dynamic viscosity model (*$\Lambda = 1$*) and* $\mathrm{Re} = \varrho_{He} h\sqrt{\alpha g h}/\mu_{He}$. - - -, $1.8\sqrt{2}\left(1-(1-\varrho^*)^{0.3}\right)$.

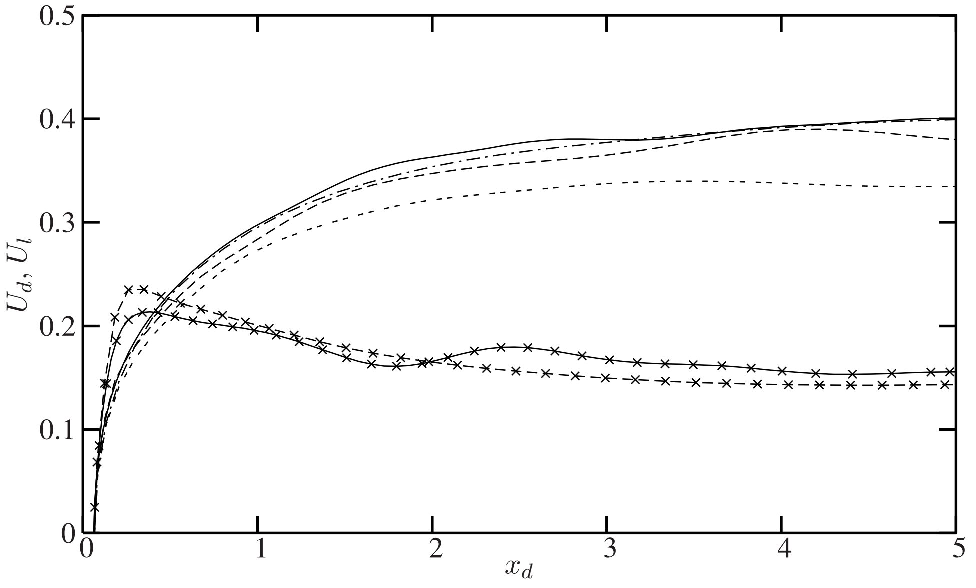


FIG. 18 – *Non-dimensional velocities of the dense and light fronts respectively U_d and U_ℓ as functions of the non-dimensional dense front position x_d for $\alpha = 20.6$ and $\mathrm{Re} = \varrho_{air} h \sqrt{\alpha g h}/\mu_{air}$. Velocity U_d (upper curves): $-\ -$, no-slip boundary condition and $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$ (constant kinematic viscosity); $--$, no-slip condition and $\Lambda = 1$ (constant dynamic viscosity); $- \cdot -$, free slip condition and $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$; —, free slip condition and $\Lambda = 1$. Velocity U_ℓ (lower curves): $- \times -$, no-slip condition and $\Lambda = 1$; $\times$, free slip condition and $\Lambda = 1$.*

fall on a straight line over nearly two decades when $\mathrm{Fr}_d^\infty = 2\sqrt{2}$ and $n = 0.3$. The lower Reynolds number results, including the experimental points, are better approximated by $\mathrm{Fr}_d^\infty = 1.8\sqrt{2}$ and $n = 0.3$. These results imply that when the Reynolds number is sufficiently large, the dense front can be considered to be non-dissipative in the sense of Stoker[54]. Therefore, at large Reynolds number friction in the boundary layer must remain negligibly small.

In order to clarify the importance of the wall boundary layers at the top and bottom of the channel we performed calculations for the same density ratio ($\alpha = 20.6$) with slip boundary conditions on the channel walls. The results are presented in Figure 18 where the non-dimensional dense and light front velocities are plotted as function of non-dimensional distance x_d. It is seen from this Figure that when there is a free slip on the wall the established dense front velocity is found to be practically the same for both viscous models $\Lambda = 1$ and $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$. Furthermore, a no-slip wall boundary condition has practically no effect on the dense front velocity in the case of the constant dynamic viscosity model ($\Lambda = 1$). On the contrary, for the constant kinematic viscosity model ($\Lambda = 1 + \alpha\Phi$), the dense front progression is reduced by friction in the wall boundary layer. The constant kinematic viscosity model increases the effective dynamic viscosity, hence decreases the effective Reynolds number, in the dense intrusion boundary layer by $\mu_d = (\alpha + 1)\mu_\ell$. Consequently, the wall shear-stress increases from $\tau_\mu = 1/\mathrm{Re}\,\partial u_x/\partial y$ when $\Lambda = 1$ to $\tau_\nu = (\alpha + 1)/\mathrm{Re}\,\partial u_x/\partial y$ if $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$. Thus, it can be concluded that the experimental results of Gröbelbauer *et al.* are probably affected by non-negligible wall friction when $\alpha \gtrsim 10$. In the calculations with the constant dynamic viscosity model and Reynolds number larger than the experimental values, wall friction is negligible.

For the light intrusion front Figure 18 shows that for the constant dynamic viscosity model the wall boundary-condition has practically no effect on the front velocity; the velocity is nearly the same with and without wall slip. The constant kinematic viscosity model does not change the wall conditions but increases the viscosity of the displaced dense fluid.

An interesting feature of the flow is the interfacial instability behind the two fronts exhibited by the numerical results. Images of the intrusions are shown in Figure 19 for three different dense front positions and four density ratios. These images show that in the Boussinesq limit ($\alpha = 0.11$) the flow is practically symmetric and the interfacial instability is located in the central part of the flow. The start-up rolls are also clearly visible. With increasing density ratio, the instability moves more and more to the dense side and even up to the front (see images for $\alpha = 20.6$ and 39), which is in agreement with the stability analysis of Benjamin[4]; the light front gets more stable with increasing density ratio. The decrease of the thickness of the unstable interface (decrease in size of the Kelvin-Helmholtz billows as well as of the start-up rolls) with increasing density ratio is most likely the reason why the limit of $\mathrm{Fr}_d = 2\sqrt{2}$ is approached in spite of dissipation at the interface; as the density ratio goes to infinity, the ratio of energy dissipation rate to the kinetic energy flux of the dense intrusion goes to zero. For this limit to be reached, the dissipation in the wall boundary layer must also be negligible, which is the case for large Reynolds number (Figure 18) and as long as the boundary layer remains laminar.

G Conclusions

The direct numerical simulations presented in this paper are, to our knowledge, the first simulations of exchange flows of miscible fluids of very large density ratios. The difficulty of the numerical simulation of such flows are exposed and an appropriate numerical scheme is designed. A finite elements discretization is used, allowing a dynamic mesh adaptation which is an essential feature in the simulations of this type of flow. The results concerning front velocities and the related Froude number variation with density ratio are in good agreement with the experiments by Gröbelbauer *et al.* [24] which covered density ratios $\varrho_d/\varrho_\ell \leq 21.6$. In addition, the numerical simulations were extended to density ratios of 100 and allowed to establish more definitely the dependency of the Froude numbers Fr_d and Fr_ℓ on the density parameter ϱ^*. A new, empirical law for the variation of the Froude number of the dense front with the density parameter is proposed.

It is found that the two fronts have a different sensitivity with respect to the viscosity model used. While the light front requires a constant dynamic viscosity model which corresponds to the physical properties of the fluids, the dense front is also fairly well simulated with a constant kinematic viscosity model. An explanation for this behaviour is proposed which relies on the wall boundary-layer in the case of the dense front and on the effective viscosity of the displaced dense fluid by the light front.

In order to see why the interface of the light intrusion is more stable, it is of interest to eva-

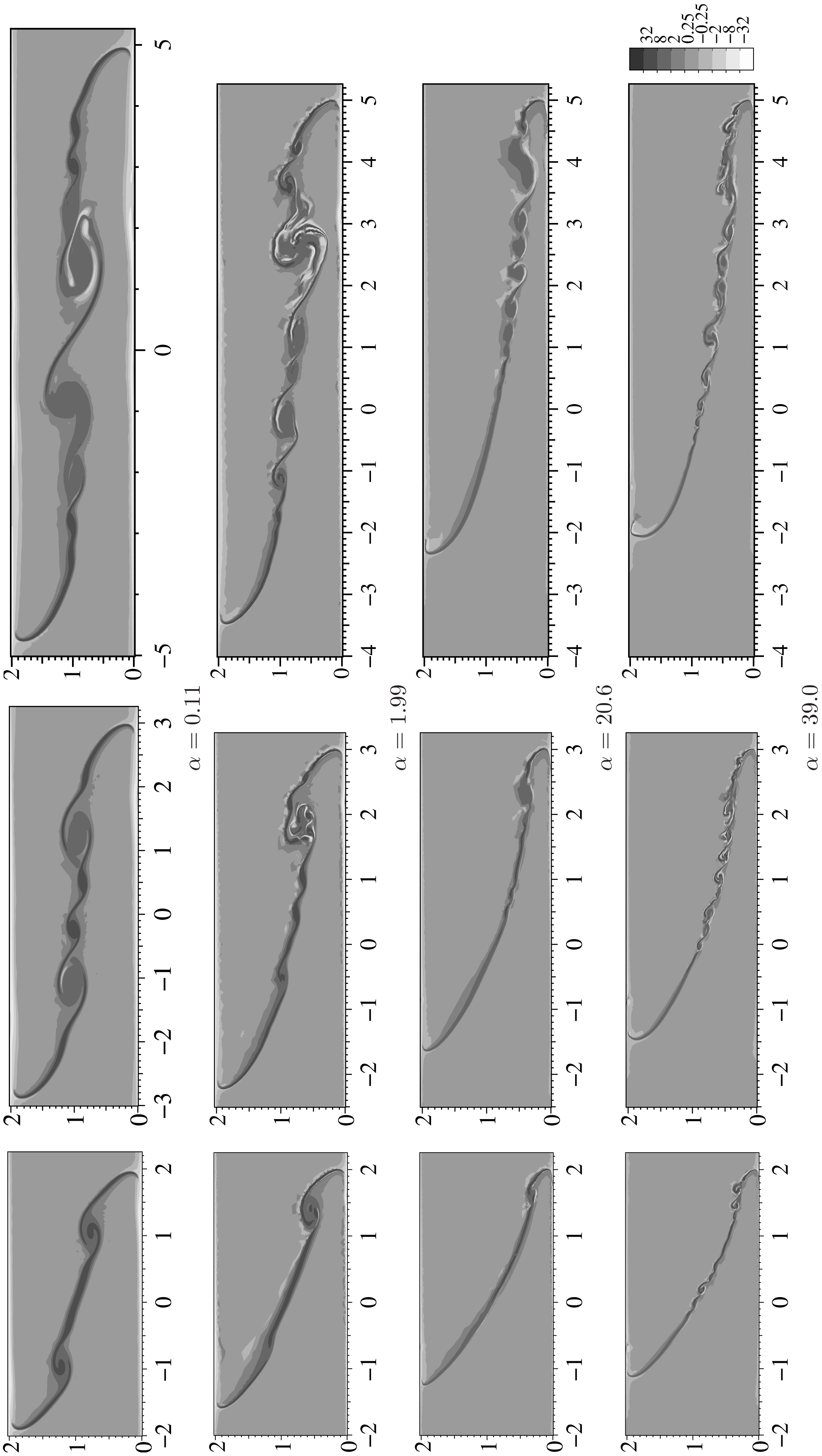


FIG. 19 – *Non-dimensional vorticity maps for different density ratios and at different stages in the flow development for the constant dynamic viscosity model* $\Lambda(\Phi) = 1$. *The dense front positions are taken the same for the three density ratios.*

luate the interfacial Richardson number $\mathrm{Ri} = g\Delta_i\varrho/\varrho_i \ \delta_i/(\Delta_i U)^2$, where δ_i is the interfacial shear layer thickness, $\Delta_i U$ and $\Delta_i\varrho$ are respectively the velocity and density changes across the shear layer and ϱ_i is the mean interfacial density. Behind the light front, $\Delta_i U = C_1 U_\ell \simeq C_1\sqrt{gh/2} \ \ \varrho^*$ and $\Delta_i\varrho/\varrho_i \simeq 2(\varrho^*)^2$, which gives $\mathrm{Ri}_\ell \sim \delta_i/h$ when $C_1 \sim 2$. Since δ_i/h is of order 10^{-1}, with δ_i increasing somewhat with the density ratio, Ri_ℓ is of order 10^{-1} or less. The light intrusion interface should, therefore, be weakly unstable but gets more stable with increasing ϱ^*. This is consistent with Benjamin's stability analysis[4]. At the dense side, $\Delta_i U = C_2 U_d = C_2 2\sqrt{2gh}(1 - \sqrt[4]{1-\varrho^*})$, with C_2 decreasing from 2 to about 1.2 as the density ratio increases, and again $\Delta_i\varrho/\varrho_i \simeq 2(\varrho^*)^2$. The dense intrusion Richardson number is, therefore, $\mathrm{Ri}_d = (\varrho^*)^2\delta_i/\left[4hC_2^2(1 - \sqrt[4]{1-\varrho^*})^2\right]$. When $\varrho^* \ll 1$, we have $C_2 = C_1 \simeq 1$, giving $\mathrm{Ri}_d = \mathrm{Ri}_\ell \sim \delta_i/h$ by Taylor expansion. As ϱ^* goes to 1, C_2 grows close to 1 and Ri_d tends to $\delta/4h$. The dense intrusion interface becomes more unstable as the density ratio increases. This is also in agreement with Benjamin's stability analysis[4]. Furthermore, the coherent structures move more and more with the dense front velocity with increasing density ratios, with the tendency of the structures to move closer to the front as seen in Figure 19.

Because of wall friction and interfacial instability the intrusions are strictly speaking always dissipative. Nevertheless, Figure 20 indicates that when α is small ($\alpha \leq 0.5$), both currents would be loss free in the sense of Benjamin and of Keller and Chyou; the current depth is equal to h (half the channel height). At large values of α, the light current continues to occupy close to half the channel depth (Figure 20b) and when the Reynolds number is sufficiently large the loss-free Benjamin limit Fr_ℓ^∞ is approached; the interfacial instability is inhibited and the friction in the boundary layer is negligible. On the other hand, the dense current decreases in height and approaches the loss free Stoker solution $\mathrm{Fr} = 2\sqrt{2}$. This means that when the Reynolds number is large the losses due to boundary layer friction and interfacial instability are also negligibly small in the dense current.

Concerning the diffusion, it is of interest to point out that the assumption that F is a constant (see section C) overestimates the diffusion of light fluid into the dense one, so that the density gradient is reduced. This has, however, little effect on the value of the Richardson number, hence the interfacial instability, because $\Delta_i\varrho/\varrho_i \sim 1$. Simulations with $F(\Phi) = 1/(1+\alpha\Phi)$ for the case $\alpha = 20.6$ support this conclusion.

Acknowledgements: This work was partially supported by a grant (BQR) of the INPG. The first author, JE, acknowledges a Fellowship from the French Ministry of Education and Research.

H Annex. Numerical scheme

H.1 Discretisation in time

The method of characteristics consists in approximating the total derivative $\left(\dfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)$ by a finite difference in time along the pathlines of the flow. First we define the pathlines with a

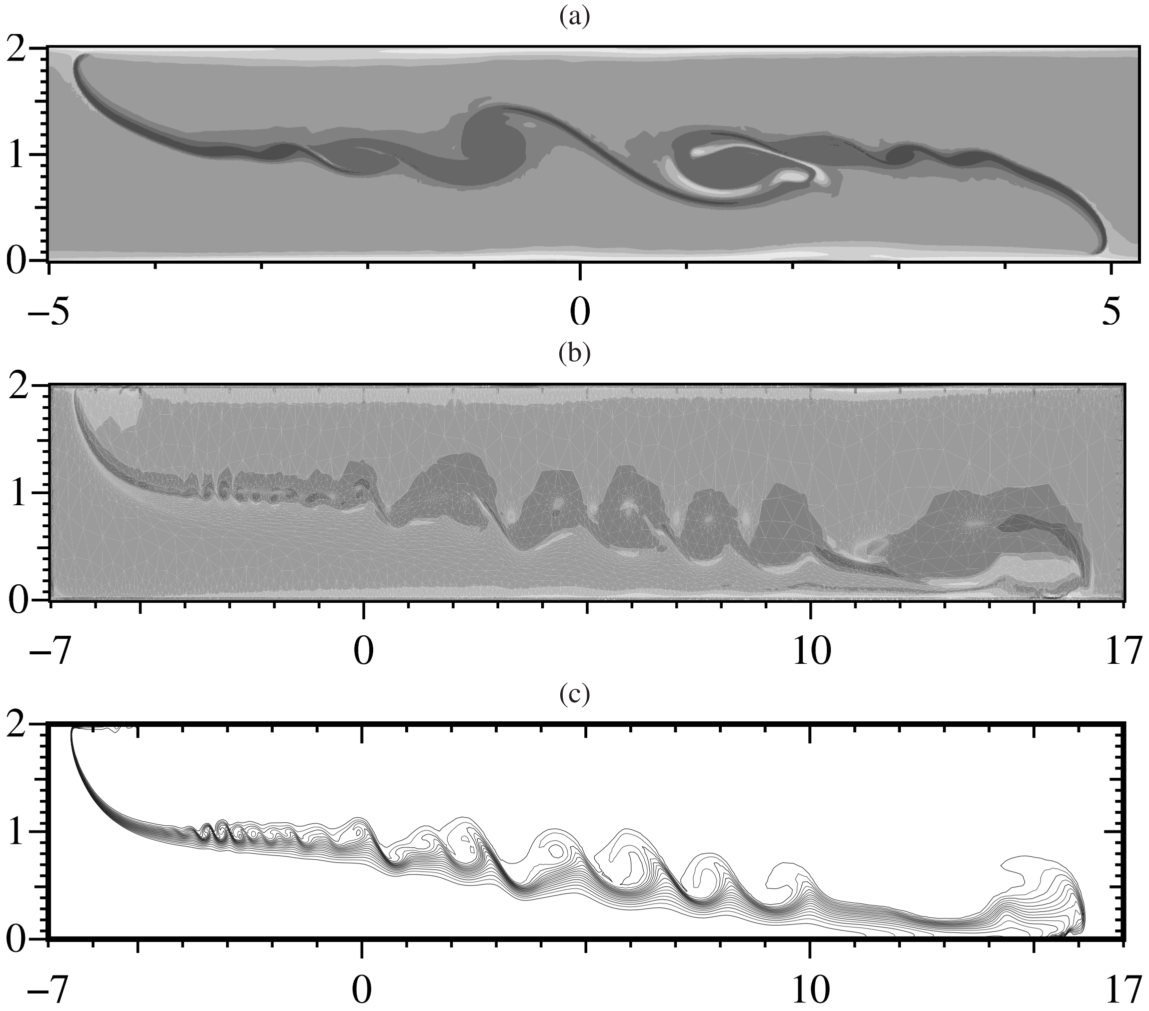


FIG. 20 – *(a) and (b), non-dimensional vorticity maps for the steady flow (long times). (a),* $\alpha = 0.11$, $\mathrm{Re} = 4.80 \cdot 10^3$ *at non-dimensional time* $t = 8$ *(*$\tilde{t} = 3$ *s); (b),* $\alpha = 20.6$, $\mathrm{Re} = 5.47 \cdot 10^4$ *at non-dimensional time* $t = 46$ *(*$\tilde{t} = 1.3$ *s). See Figure 19 for the grayscale legend. (c), non-dimensional density iso-lines,* $\alpha = 20.6$, $\mathrm{Re} = 5.47 \cdot 10^4$ *at non-dimensional time* $t = 46$ *(*$\tilde{t} = 1.3$ *s).*

mapping $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x},t;t+\tau)$ between the fluid particles located at $\boldsymbol{x}$ in Ω at time t and the position these reach when advected by the fluid velocity $\boldsymbol{u}$ over a time-span τ:

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x},t;t+\tau) \quad = \quad \boldsymbol{x} + \int_t^{t+\tau} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x},t;s),s)ds \tag{67}$$

Then it is easily shown that

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right) f(\boldsymbol{x},t+\Delta t) \quad = \quad \frac{f(\boldsymbol{x},t+\Delta t) - f(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x},t+\Delta t;t),t)}{\Delta t} + O(\Delta t). \tag{68}$$

Thus, if we can calculate $\boldsymbol{X}^n$ an approximation of $\boldsymbol{X}(\cdot,t^n+\Delta t;t)$, then we can define an implicit Euler scheme between t^n and $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ using this equality.

We cannot apply directly (67) since we have used the unknown velocity $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t+\tau)$ for $\tau \in [0,\Delta t]$, while we only know $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$, but we can calculate

$$\boldsymbol{X}^n = \boldsymbol{x} - \int_t^{t+\Delta t} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x},t;s),t)ds = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{x},t+\Delta t;t) + O(\Delta t^2).$$

This does not affect the order of approximation in (68). Using this, equation (59) yields a Poisson-like, classical problem, and equations (60, 58) a Stokes-like problem.

H.2 Semi-discrete algorithm

We will restrict ourselves here to the case of closed boundaries (such that $\boldsymbol{u}|_{\partial\Omega} = \boldsymbol{0}$ and $\partial\Phi/\partial\boldsymbol{n} = 0$), which is not very stringent since many variable-density problems occur in such configurations. A slip condition would be a straightforward extension of this scheme, but would make the notations superfluously complicated. Thus we will search the solution $(\Phi,\boldsymbol{u},p)$ in $V \times {V_0}^d \times Q$, with $V = H^1(\Omega)$, $V_0 = H_0^1(\Omega)$ and $Q = \left\{q \in L^2(\Omega),\ \int_\Omega q dx = 0\right\}$. χ is an intermediate variable in V which stands for $-\nabla\cdot\boldsymbol{u}$.

The variational formulation is written in terms of the multilinear forms:

$$\begin{aligned} a(\Phi,\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) &= \frac{1}{\Delta t}(\boldsymbol{u},(1+\alpha\Phi)\boldsymbol{v}) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left(2\,(\mathbb{D}\boldsymbol{u},\Lambda(\Phi)\mathbb{D}\boldsymbol{v}) - \frac{2}{3}(\nabla\cdot\boldsymbol{u},\Lambda(\Phi)\nabla\cdot\boldsymbol{v})\right) \\ b(\boldsymbol{v},q) &= -(q,\nabla\cdot\boldsymbol{v}) \\ c(\Phi,\psi) &= \frac{1}{\Delta t}(\Phi,\psi) + \frac{1}{\mathrm{ReSc}}(\boldsymbol{\nabla}\Phi,\boldsymbol{\nabla}\psi) \end{aligned}$$

Now we discretize the problem by choosing finite element spaces V_h and Q_h for the approximation of V and Q.

Algorithm

Initialization: $n = 0$. Choose Φ_h^0 some arbitrary function in V_h, with $\Phi_h^0(\boldsymbol{x}) \in [0,1]$, a.e. $\boldsymbol{x} \in \Omega$ and $\boldsymbol{\nabla}\Phi_h^0 \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega} = 0$, a.e. $\boldsymbol{x} \in \partial\Omega$, and $\boldsymbol{u}_h^0$ in $V_{0,h}^d$.

Loop: $n \geq 0$, assuming $(\Phi^n, \boldsymbol{u}^n)$ are given.

- **Step 1:** Calculate $\boldsymbol{X}^n(\cdot)$ with:

$$\boldsymbol{X}^n(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} - \Delta t\, \boldsymbol{u}_h^n \left(\boldsymbol{x} - \frac{\Delta t}{2} \boldsymbol{u}_h^n(\boldsymbol{x}) \right) \tag{69}$$

- **Step 2:** Find Φ_h^{n+1} in V_h such that, for all $\psi_h \in V_h$,

$$c(\Phi_h^{n+1}, \psi_h) \quad = \quad \left(\Phi_h^n \chi^n + \frac{1}{\Delta t} \Phi_h^n \circ \boldsymbol{X}^n, \psi_h \right). \tag{70}$$

- **Step 3:** Calculate $\Gamma_h^{n+1} \in V_h$, such that, for all $\psi_h \in V_h$,

$$\left(\Gamma_h^{n+1}, \psi_h\right) \quad = \quad \left(\frac{\alpha}{1 + \alpha \Phi_h^n} \frac{\Phi_h^{n+1} - \Phi_h^n \circ \boldsymbol{X}^n}{\Delta t}, \psi_h \right) \tag{71}$$

- **Step 4:** Calculate $\chi_h^{n+1} = \Gamma_h^{n+1} - \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_\Omega \Gamma_h^{n+1} \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} \right) \mathbb{1}$.
- **Step 5:** Find $(\boldsymbol{u}_h^{n+1}, p_h)$ in $V_{0,h}^d \times Q_h$ such that,

$$\begin{aligned} & a(\Phi_h^{n+1}, \boldsymbol{u}_h^{n+1}, \boldsymbol{v}_h) + b(\boldsymbol{v}_h, p_h) \\ & \quad = \frac{1}{\Delta t} \left(\boldsymbol{u}_h^n \circ \boldsymbol{X}^n, \boldsymbol{v}_h \right) - \left(\frac{1 + \alpha \Phi_h^{n+1}}{\alpha} \boldsymbol{e}_z, \boldsymbol{v} \right) & \forall \boldsymbol{v} \in V_{0,h}^d \qquad (72\text{a}) \\ & b(\boldsymbol{u}_h^{n+1}, q_h) = \left(\chi_h^{n+1}, q_h \right) & \forall q_h \in Q_h \qquad (72\text{b}) \end{aligned}$$

Step 1 of the algorithm is more complicated than it appears if one considers that we use unstructured meshes with strong local refinements. This means that the knowledge of the coordinates of $\boldsymbol{X}^n(\boldsymbol{x})$ does not give directly the element K of the mesh it belongs to, and an efficient search algorithm is necessary to determine it. Indeed, if N denotes the number of elements in our mesh, the search algorithm will be used for each degree of freedom in the mesh, that is $O(N)$ times per time-step. We propose an algorithm which allows to keep the overall cost of a time-step in $O(N \ln N)$, and consists for a given mesh in sorting its elements in a localization tree of depth $\ln N$, which allows a $O(\ln N)$ localization for each degree of freedom.

Step 2 is then a classical elliptic equation to solve, a multifrontal LU-type factorization is used.

Step 3 is straightforward, but as shown in section D, it does not yield an element of Q, and thus in general the equation (72b) has no solution if $\chi_h^n = \Gamma_h^n$. Thus Step 4 performs an orthogonal projection of Γ_h^n onto Q. If the Babuška–Brezzi inf-sup condition holds, this is enough to ensure that equation (72b) admits solutions. Moreover, this projection preserves the error because Γ_h^n can be shown a good approximation of $\chi(\cdot, t^n)$ which is an element of Q.

In Step 5 remains a Stokes-like problem, with the difference that the right hand side of equation (72b) is not zero. We use an augmented Lagrangian technique with a Uzawa iterative algorithm for problem (72) as done in Ref. [47].

In [chapter IV] we prove that this scheme yields optimal error bounds $\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_V + \|\Phi - \Phi_h\|_V \leq C(h^2 + \Delta t)$ and that for any $\varepsilon \geq 0$, for a sufficiently fine mesh and time step we have $-\varepsilon \leq \Phi_h^n(\boldsymbol{x}) \leq 1 + \varepsilon$ for any $\boldsymbol{x} \in \Omega$ and $t^n \in [0, T]$. We also explain the difficulty of alternatives

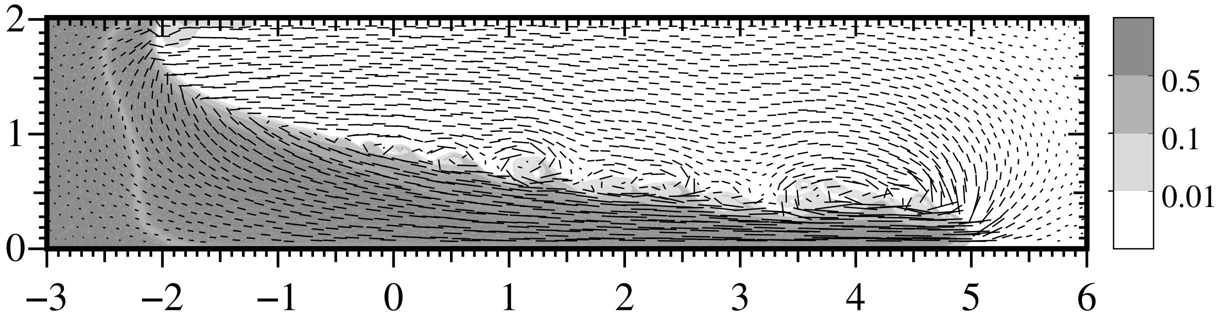


FIG. 21 – *Vitesses dans l'écoulement d'échange à $\alpha = 39.0$, $\Lambda = 1$ lorsque le front dense atteint $x_d = 5$ (voir la dernière image de la figure 19). La couleur de fond correspond à la composition du mélange Φ. Afin d'être lisible, la visualisation est faite ici sur un maillage uniforme, beaucoup plus grossier à l'interface que le maillage du calcul. De même, le sens des vecteurs vitesses n'a pas pu être indiqué sur cette figure.*

to the projection step 4.

12 Données supplémentaires non publiées

Les figures 21 à 30 permettent de mieux comprendre le comportement de l'instabilité de la couche de mélange quand α et Re sont grands. (Le nombre de Reynolds correspondant aux valeurs de α est donné par la table 1, comme dans l'article). On remarque en effet que les profils de vitesse et de densité sont décalés de façon relativement importante, les structures de Kelvin-Helmholtz se situant dans la partie la moins dense de l'interface.

Ces résultats sont susceptibles d'être sensibles au choix de la fonction de diffusion $F(\Phi)$, et il faut donc garder une grande prudence dans leur interprétation mécanique.

13 Discussion des résultats

Les résultats obtenus dans cet article, s'ils permettent de répondre à certaines questions, en posent surtout de nouvelles.

Tout d'abord, ils rencontrent certaines limites. Pour un coefficient de viscosité en $\Lambda = 1$, notre limite s'est située à $\alpha = 60$ pour un Reynolds de $6 \cdot 10^4$, avec des conditions aux limites d'adhérence ; alors que pour $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$, les instabilités au même écart de densité et nombre de Reynolds sont moindres et ont permis de poursuivre les calculs.

Il semble donc que le cadre que nous nous sommes fixé pour cette étude ait été trop étroit pour nous donner une idée juste des difficultés liées aux deux formes $\Lambda = 1$ et $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$: nous n'avons en effet pas exploré les limites atteintes à Reynolds constant, ni avec des nombres de Reynolds équivalents dans les intrusions denses pour les deux formes. En effet, nous avions fixé comme objectif de reproduire les résultats expérimentaux, qui présentent des variations importantes du nombre de Reynolds selon α et aussi selon le fluide léger employé ; ainsi que d'explorer

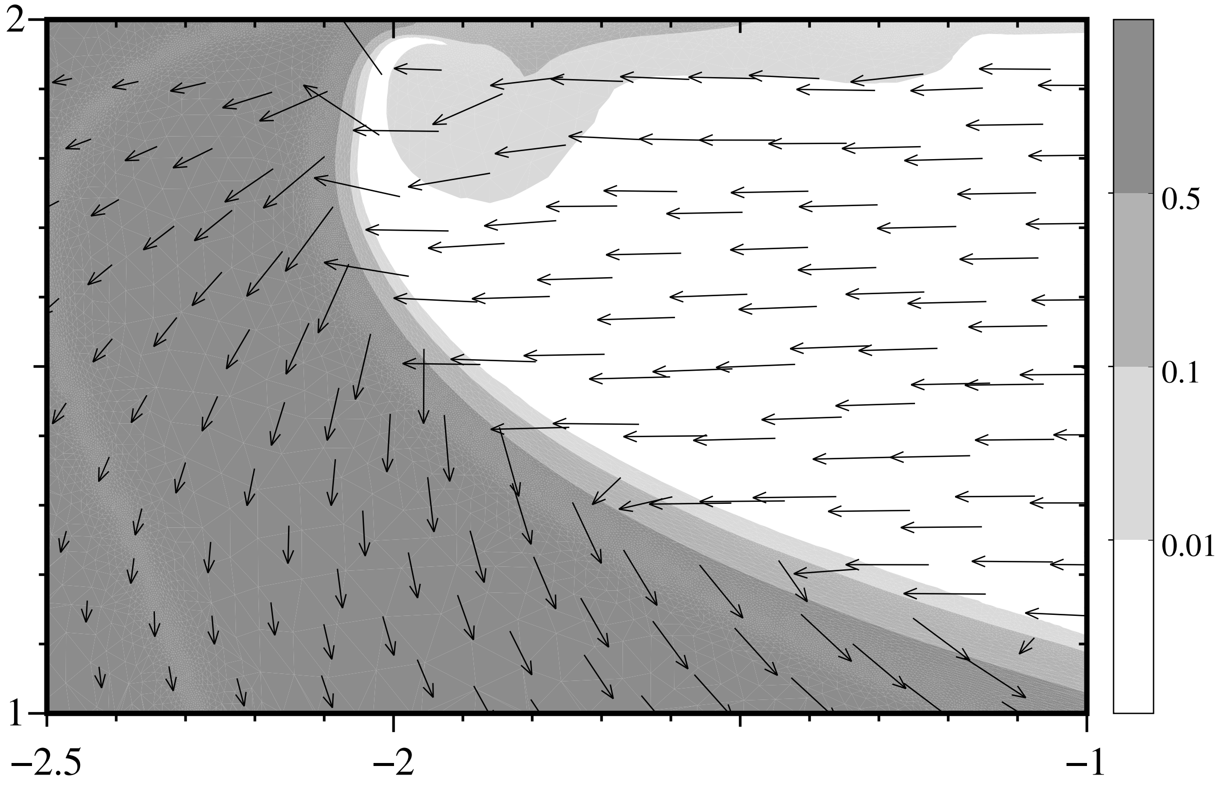


FIG. 22 – *Détail de la figure 21 autour du front léger.*

la limite des grandes valeurs de α en gardant identique la viscosité du fluide léger – ce qui implique de faire varier le nombre de Reynolds proportionnellement à $\sqrt{\alpha}$. Ces dernières simulations indiquent que, pour $\alpha \rightarrow \infty$ et $\mathrm{Re} \sim \mathrm{Fr} = \sqrt{\alpha}$, la vitesse du front dense tend vers la vitesse limite inviscide $2\sqrt{2gh}$. Cela signifie qu'à la limite, l'énergie dissipée dans les couches limites aux parois et dans la couche de mélange tendent vers zéro dans ces conditions.

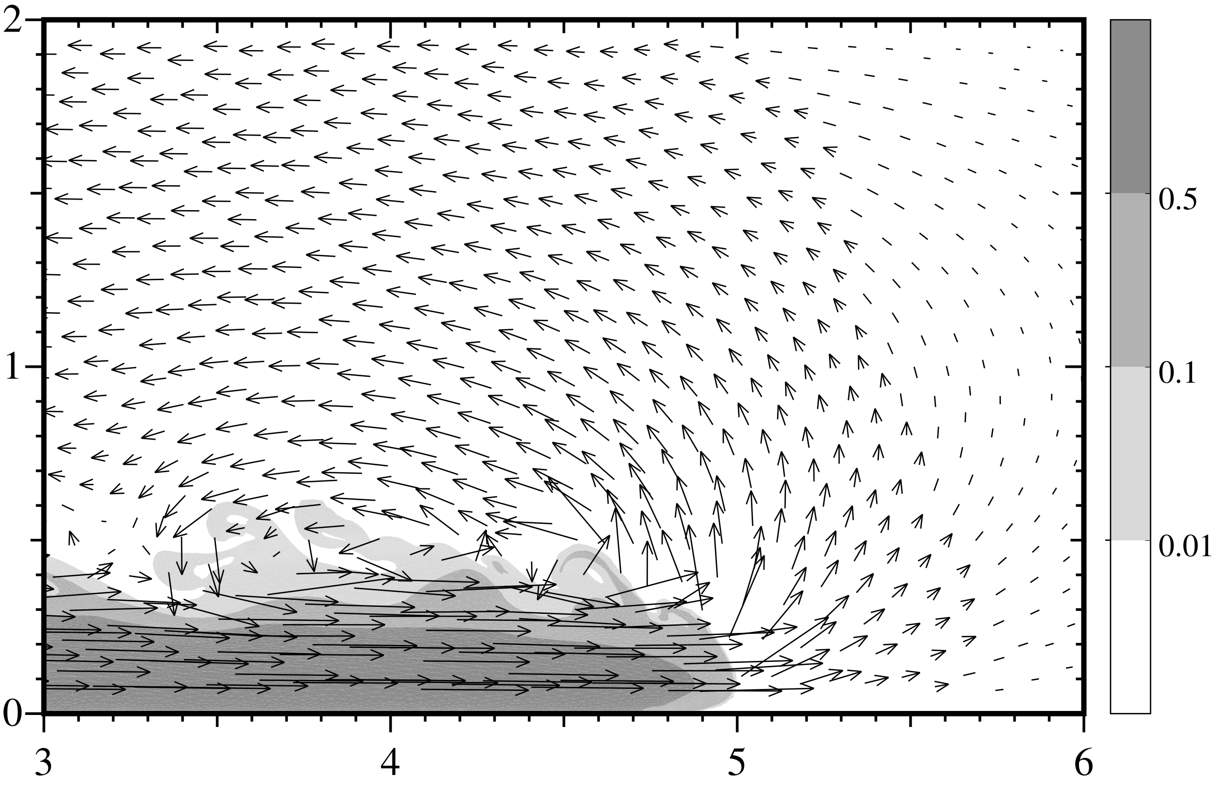


FIG. 23 – *Détail de la figure 21 autour du front dense.*

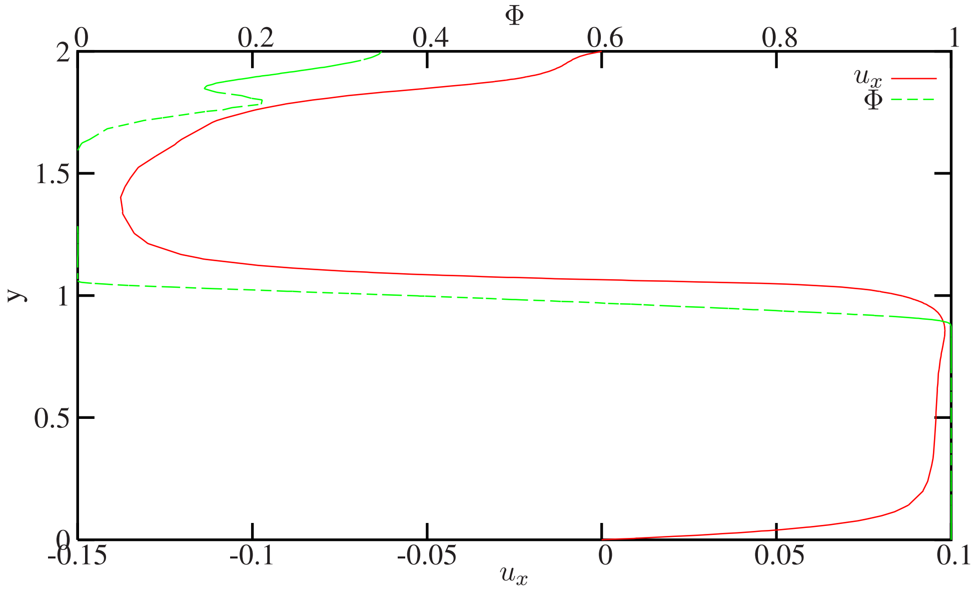


FIG. 24 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = -1$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 39.0$, $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$.

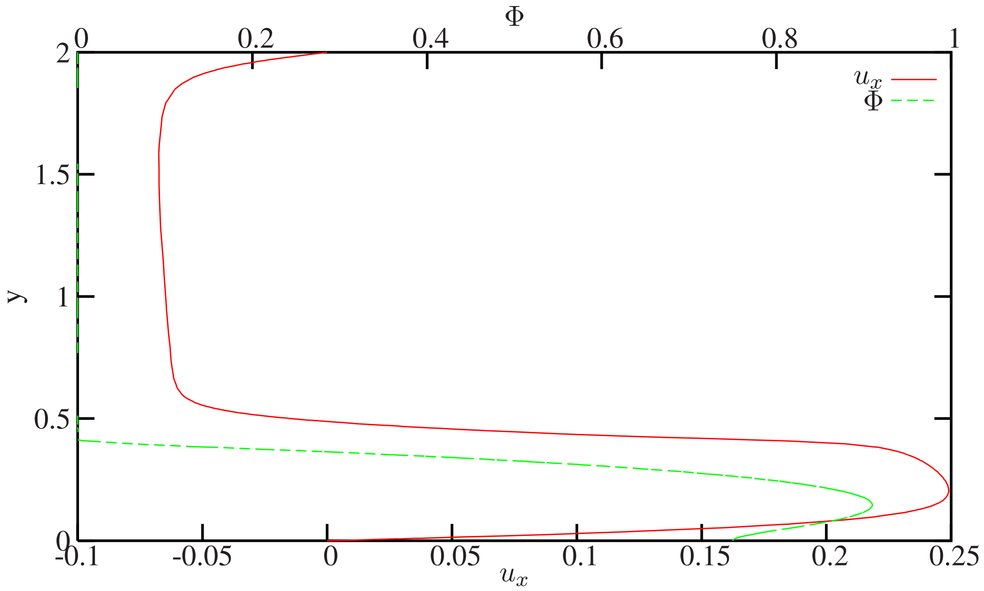


FIG. 25 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = 3$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 39.0$*,* $\Lambda = 1 + \alpha\Phi$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$*.*

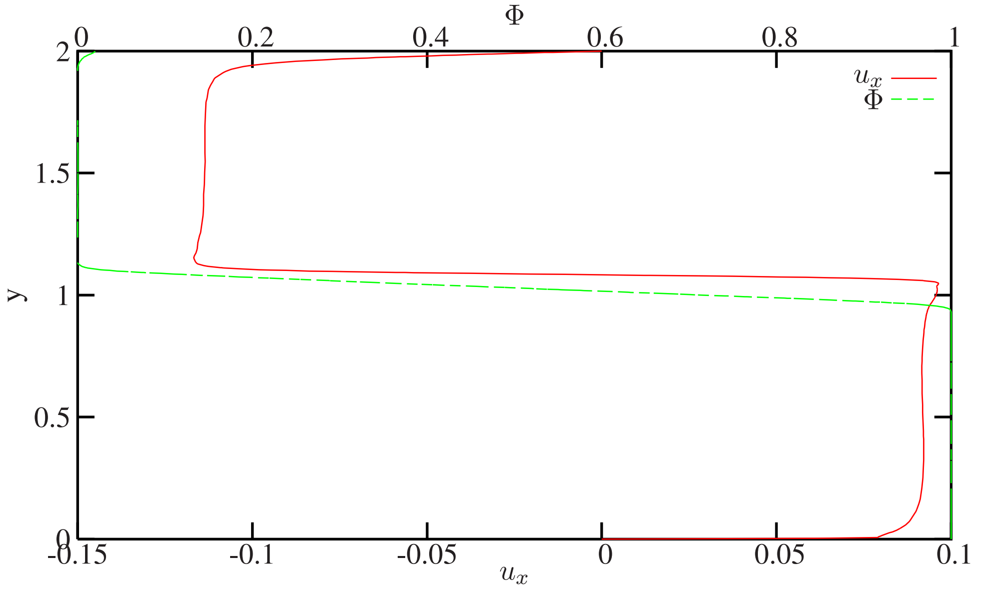


FIG. 26 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = -1$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 39.0$*,* $\Lambda = 1$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$*.*

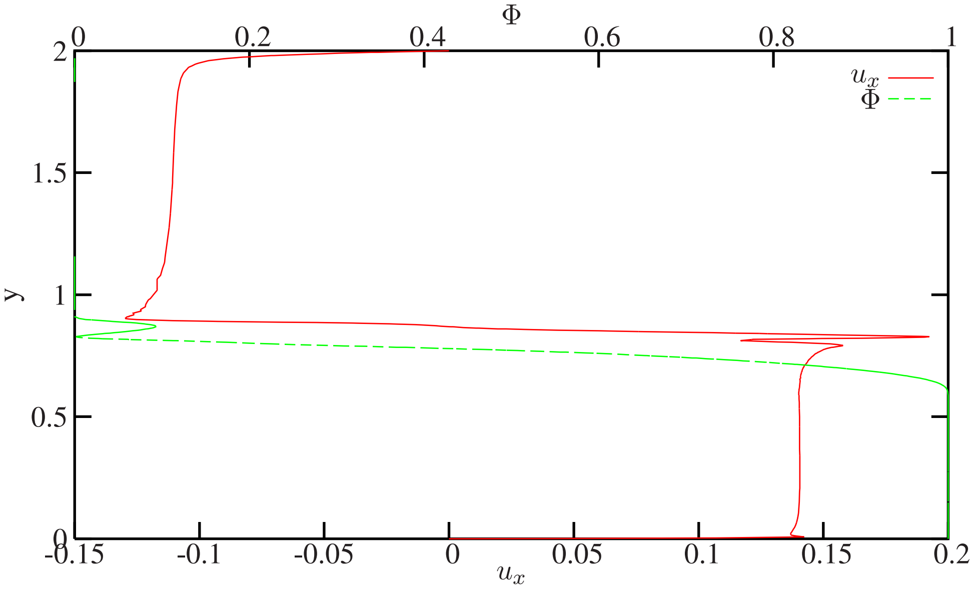


FIG. 27 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = 0$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 39.0$*,* $\Lambda = 1$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$*.*

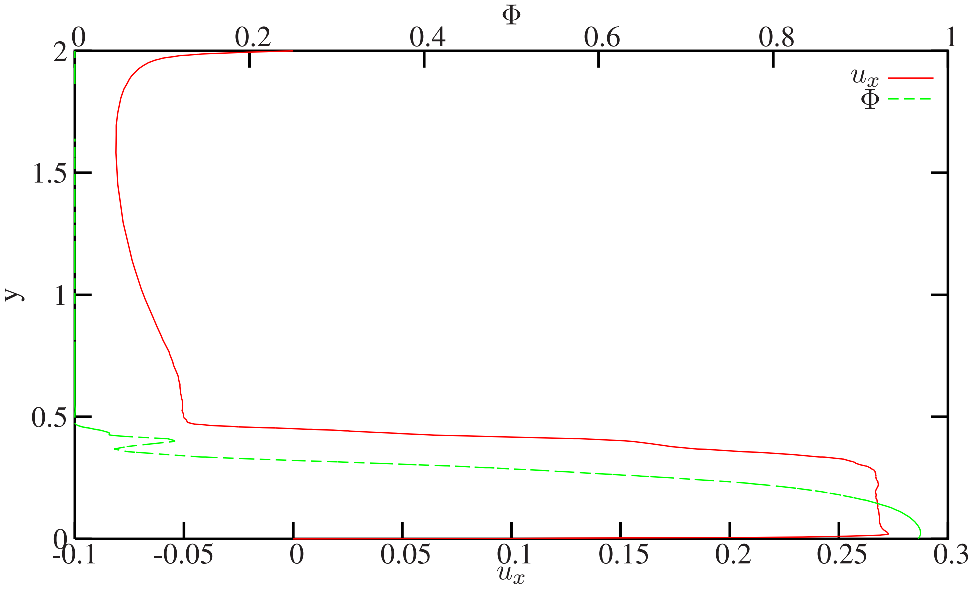


FIG. 28 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = 3$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 39.0$*,* $\Lambda = 1$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$*.*

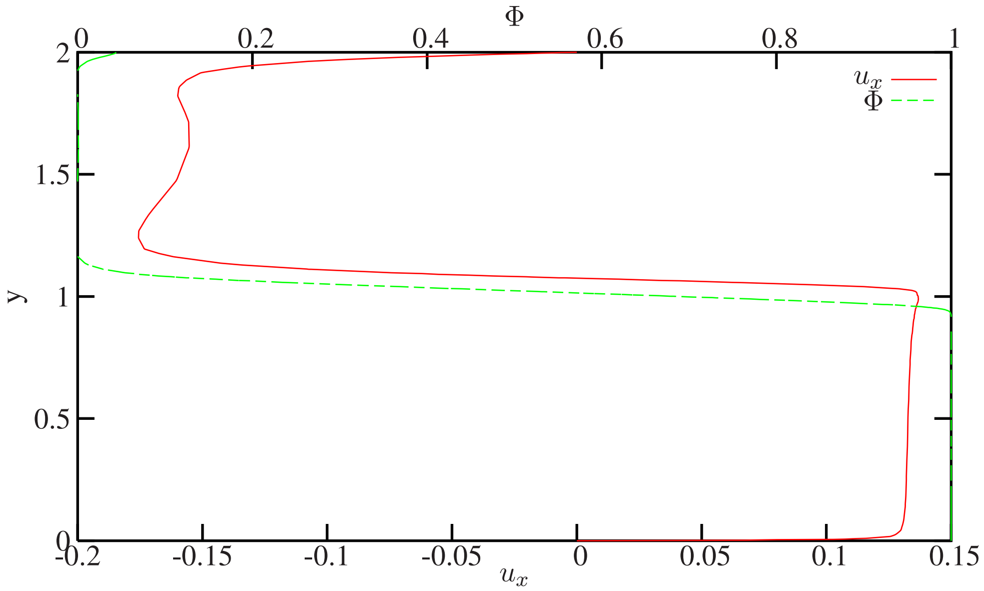


FIG. 29 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = -1$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 20.6$*,* $\Lambda = 1$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$*.*

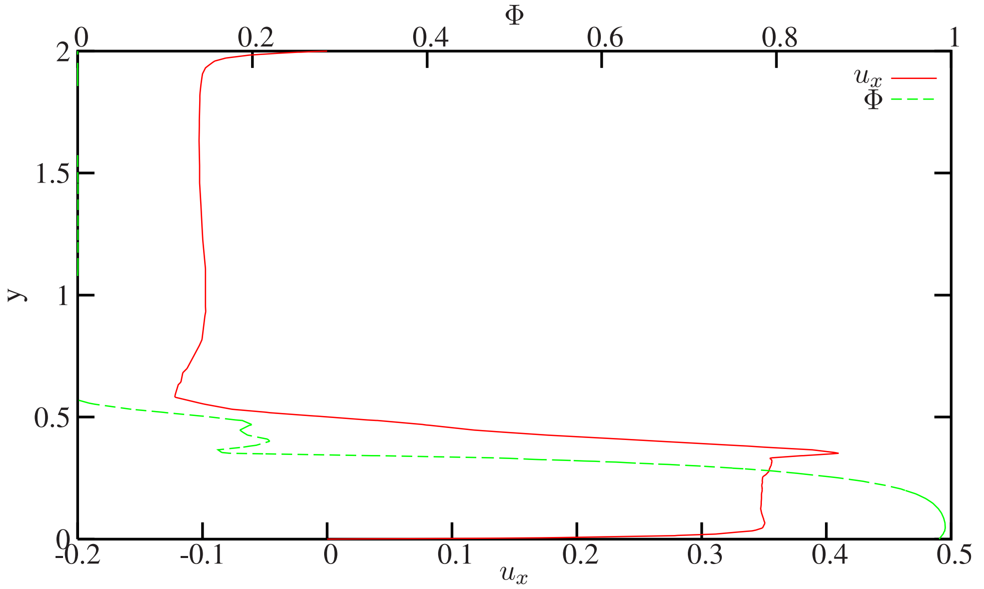


FIG. 30 – *Profil des vitesses et densités pour* $x = 3$*, dans l'écoulement d'échange à* $\alpha = 20.6$*,* $\Lambda = 1$ *lorsque le front dense atteint* $x_d = 5$*.*

Chapitre VI

Application aux avalanches

Les avalanches de neige poudreuse sont des événements rares, spectaculaires et destructeurs. Dans le cadre de cette thèse, on représente leur comportement par celui d'un nuage de fluide de même densité que la suspension de particules de neige dans l'air s'écoulant dans un fluide ambiant beaucoup moins dense. La validité de cette approche est étayée dans la section 1.

La première différence avec les écoulements d'échange du chapitre V est donc que l'écoulement a lieu sur une pente : il y a donc un apport d'énergie potentielle tout au long de l'écoulement. Cet apport d'énergie va être compensé, entièrement ou partiellement, par la force de traînée, due à l'incorporation de fluide ambiant dans le nuage, qui est générée par les instabilités de la frontière libre du nuage. Cette incorporation se manifeste par une croissance à peu près linéaire des dimensions du nuage [2]. Cependant, contrairement au cas des écoulements d'échange, il ne s'établit pas d'équilibre entre l'apport d'énergie potentielle et la force de traînée, et on rencontre au cours de l'écoulement différents régimes de vitesse.

Le paragraphe 1 donne les bases sur lesquelles nous avons fondé notre modélisation des avalanches de neige poudreuse. L'observation du phénomène justifie le choix d'un modèle de fluides miscibles, et les résultats des études expérimentales permettent de nous restreindre à des simulations bidimensionnelles, avec des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^5. Puis dans le paragraphe 2 sont décrites les conditions des simulations numériques qui sont présentées. Celles-ci peuvent être validés dans le cas de faibles différences de densité, en les comparant avec des résultats expérimentaux [2, 45] dans le paragraphe 3. Pour de fortes différences de densité, en revanche, il n'existe aucun résultat expérimental du fait de la très grande difficulté de reproduire de telles conditions en laboratoire. Les simulations numériques, elles, n'ont pas cette limitation, permettent au paragraphe 4 de montrer quel est l'effet d'une forte augmentation de la différence de densité sur le comportement des nuages. Lorsque c'est possible, on compare les résultats obtenus aux prévisions théoriques de Rastello et Hopfinger [45].

1 Justification de l'approche de modélisation

1.1 Caractéristiques des avalanches de neige poudreuse

Une avalanche de neige poudreuse est une suspension de particules de neige en écoulement sur une pente raide, entre 20 et 60 degrés. Le nuage de suspension peut atteindre des dimensions $h \simeq 100$ m en hauteur et $\ell \simeq 600$ m en longueur, avec une vitesse du front U_f allant jusqu'à environ 100 m·s^{-1}. Le nombre de Reynolds d'un tel écoulement est donc de l'ordre de 10^9. Ces quantités ont pu être mesurées par des techniques photographiques ou de radar [18, 17].

La densité du manteau neigeux est de l'ordre de 100 kg·m^{-3}, et on estime que celle du nuage varie entre 20 kg·m^{-3} au début de l'écoulement à environ 2 kg·m^{-3} à la fin, mais il est extrêmement difficile de vérifier ces hypothèses par des mesures. On peut en revanche donner des estimations concernant les particules de la suspension [51] : leur concentration volumique est de l'ordre de 1 %, et leur vitesse de sédimentation U_s inférieure à 1 m·s^{-1}. Ces particules sont cependant très lourdes, leur densité étant d'environ 900 kg·m^{-3}, ce qui explique la forte densité du nuage.

Ces dernières données sont à la base de l'approche de modélisation des avalanches de neige poudreuse. En effet, on peut alors considérer que l'énergie requise pour conserver ces particules en suspension est une faible fraction de l'énergie cinétique turbulente du nuage, et que, dans la phase d'écoulement rapide de l'avalanche qui nous intéresse, la sédimentation des particules peut être négligée. De plus, le temps caractéristique de ces particules vaut $\tau_p = U_s/g \lesssim 0.1$, tandis que le temps caractéristique de l'écoulement est $h/U_f \simeq 1$. Les particules ont donc une inertie suffisamment faible pour que leur vitesse soit très proche de celle du fluide porteur localement. Elles n'ont donc, au premier ordre, pas d'autre effet que d'augmenter la densité du fluide dans le nuage.

Ces constatations nous amènent donc à considérer l'avalanche comme un nuage de densité élevée, miscible dans l'air environnant. On voit que l'on se ramène donc au même modèle que pour des mélanges de fluides miscibles, développé au chapitre I.

1.2 Dynamique des avalanches

C'est sur ce même constat que se sont appuyées les approches expérimentales de modélisation des avalanches. La plupart des expériences ont en effet été réalisées avec des liquides de densité variable, comme de l'eau avec des variations de salinité, et ont montré la validité de cette approche [2, 27, 44, 45]. Cependant, aucune expérience n'a pu être réalisée avec des écarts de densité approchant ceux des avalanches : la différence de densité est limitée aux conditions de Boussinesq, c'est-à-dire à quelques pourcents ($\alpha \leq 0.2$), alors que les nuages de suspension d'avalanches ont une densité plusieurs fois, voire localement 20 fois supérieure à celle de l'air ambiant ($1 \leq \alpha \leq 20$). Il est certain que le paramètre α de différence de densité a une influence capitale sur les caractéristiques quantitatives de l'écoulement. Par contre, les études basées sur les approches expérimentales tendent à prouver que qualitativement, les écoulements dans les conditions de Boussinesq constituaient une bonne première approximation des écoulements réels, et ont permis de développer des modèles théoriques qui peuvent être étendus aux fortes différences de densité.

Les simulations numériques ne sont elles pas limitées aux faibles différences de densité. Leur intérêt est donc de pouvoir vérifier la validité de ces modèles sur toute la gamme des différences de densité, depuis les conditions de Boussinesq, pour lesquelles une validation expérimentale est possible, jusqu'aux fortes différences de densité ; et de comparer les résultats quantitatifs aux modèles théoriques.

Deux résultats essentiels résultent des expériences en conditions de Boussinesq :

- L'équilibre des forces qui gouverne l'écoulement est celui de la force de gravité et de l'entraînement d'air ambiant dans le nuage. L'air entraîné doit en effet être accéléré, et ce transfert d'énergie résulte en une traînée effective qui a un effet d'importance bien plus grande que le frottement au sol. De cette incorporation d'air résulte une croissance linéaire du nuage dans les deux directions de hauteur et de longueur, qui conserve le rapport d'aspect de l'avalanche. La traînée de forme est, elle, négligeable, car du fait de la couche de mélange il n'y pratiquement pas de séparation d'écoulement.
- L'entraînement de fluide ambiant est dû aux grandes structures que génèrent des instabilités.

Ces structures, qui sont similaires à des tourbillons de Kelvin-Helmholtz et apparaissent à l'interface entre le nuage et l'air ambiant, sont générées dans un mécanisme essentiellement bidimensionnel. Les structures turbulentes de plus petite échelle, qui sont tridimensionnelles, sont superposées à ces grandes structures et n'ont pas d'effet de premier ordre sur l'écoulement, de la même façon que pour la couche de mélange des écoulements d'échange du chapitre V.

C'est pourquoi on peut espérer reproduire les mécanismes essentiels des écoulements par des simulations limitées au cas bidimensionnel, comme cela peut se faire avec succès pour les écoulements d'échange (voir en particulier le paragraphe 2.2 du chapitre V), et de la même façon ainsi bénéficier d'une grande puissance de calcul pour des nombres de Reynolds élevés pour ce problème simplifié.

Malgré cela, des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^9 restent hors de portée des simulations numériques directes. Cependant là encore, nous avons des raisons physiques d'espérer reproduire ces phénomènes en nous restreignant à ce que nous savons faire. En effet, il est démontré que, pour des écoulement libres cisaillés, un spectre d'énergie continu apparaît pour $\mathrm{Re} \gtrsim 3 \cdot 10^4$, avec une pente spectrale en $k^{-5/3}$. Le comportement global de l'écoulement devient alors indépendant du nombre de Reynolds. Cette propriété a d'ailleurs été également utilisée pour les études expérimentales citées plus haut, car il est impossible en laboratoire d'avoir à la fois une similitude des nombres de Froude et de Reynolds pour reproduire les avalanches, et seul le premier était conservé, amenant le nombre de Reynolds à 10^4 environ (voir table 2). Les résultats des expériences permettent de valider cette hypothèse [45].

Ces mêmes études et expériences donnent une idée assez précise du comportement global du nuage. Le front subit tout d'abord une importante phase d'accélération en $U_f \propto \sqrt{x_f}$, où x_f est sa position, puis une décélération à partir d'un point x_f^* dont la position dépend de la différence de densité et de la pente. On sait en revanche très peu de chose de la position $\boldsymbol{x}_{MC}$ du centre

Réf.	Fluides utilisés	$\alpha = \frac{\varrho_d - \varrho_\ell}{\varrho_\ell}$	Pente θ	$\mathrm{Re} = \frac{L\sqrt{\alpha g L}}{\nu}$	Conditions aux limites
E1	Eau salée et eau pure (1)	0.02	5° à 90°	$1.2 \cdot 10^4$	–
E2	Eau salée et eau pure (2)	0.05	32°	$2.7 \cdot 10^4$	–
N3	*Simulation numérique*	0.02	32°	10^4	Glissement
N4	*Simulation numérique*	0.05	32°	$10^{9/2}$	Glissement
N5	*Simulation numérique*	0.02	32°	10^5	Glissement
N6	*Simulation numérique*	0.02	32°	10^5	Adhérence
N7	*Simulation numérique*	3	32°	10^5	Glissement
N8	*Simulation numérique*	9	32°	10^5	Glissement
N9	*Simulation numérique*	19	45°	10^4	Glissement
N10	*Simulation numérique*	19	32°	10^5	Glissement
N11	*Simulation numérique*	19	45°	10^5	Glissement

TAB. 2 – *Nomenclature des simulations numériques et des expériences d'avalanches présentées. Les expériences sont celles (1) de Beghin* et al.*[2], et (2) de Rastello [44].*

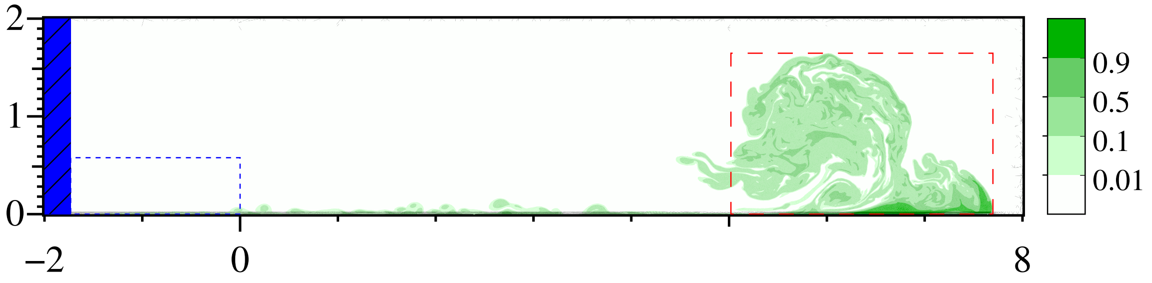
de masse du nuage. Dans les études théoriques, il est supposé se trouver au centre volumique du nuage, faute de meilleure approximation. Sa vitesse U_{MC}, par contre, peut-être prédite par les modèles théoriques en fonction de x_{MC}, avec la même difficulté pour en déduire la vitesse du front U_f. Les calculs numériques permettent de calculer ces variables, et on est amené à définir aussi le point x_f^+, qui est la position du front pour laquelle la vitesse U_{MC} est maximale. On verra dans les résultats numériques qu'elle ne coïncide pas en général avec x_f^*.

Dans les avalanches réelles intervient également un phénomène appelé la *reprise*, qui est l'incorporation de neige provenant du manteau neigeux en aval de la zone de déclenchement, qui est arrachée au manteau par le passage de l'avalanche. Les quantités de neige supplémentaire ainsi entraînée peuvent être considérables, atteignant généralement pour les avalanches de neige poudreuse la totalité de la couche de neige fraîche. Le mécanisme qui régit cette érosion est encore mal établi d'un point de vue théorique, mais ses conséquences par contre peuvent être appréciées, et on montre qu'alors l'accélération de l'avalanche se poursuit tout au long de l'écoulement, tant que la pente reste constante [45].

Ce phénomène est très difficile à reproduire expérimentalement, et nous ne pouvons pas non plus le simuler numériquement sans introduire une rhéologie spécifique correspondant à la neige déposée dans le manteau neigeux. Il faudrait donc au minimum utiliser une loi de comportement du type fluide à seuil pour la neige. Cela est envisageable mais dépasse le cadre de cette thèse.

Pour finir, le nombre de Schmidt a été pris égal à 1 pour les raisons données dans la remarque 9, page 24. Il est nettement plus élevé dans les mélanges de salinité des expériences de laboratoire, et inconnu pour les avalanches. Cependant, dans les écoulements turbulents, le nombre de Schmidt turbulent est de l'ordre de 1.

a. Faibles différences de densité $\alpha = 0.02$, simulation (N5)



b. Fortes différences de densité $\alpha = 19$, simulation (N10)

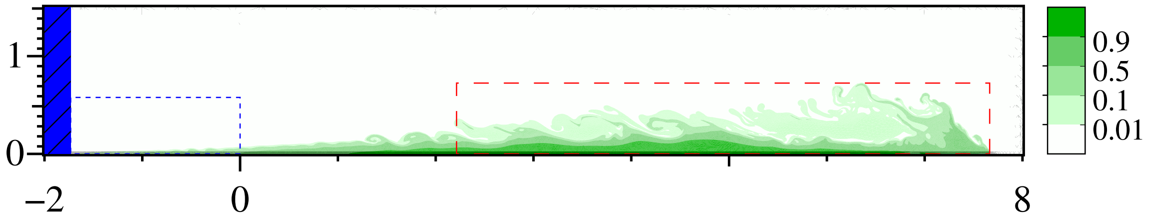


FIG. 31 – *Aspect des avalanches simulées selon la différence de densité : on représente Φ sur une partie du domaine par un code de couleurs (en abscisse, x, et en ordonnée, y). En pointillés, à gauche, le volume initial de fluide dense $\Phi_0 = 1$, de volume unitaire ; à droite, le rectangle correspondant à la longueur et la hauteur de la tête calculées l'avalanche selon notre définition, voir paragraphe 2.*

2 Simulations numériques et exploitation

2.1 Conditions des simulations

Les conditions des simulations numériques et des expériences décrites dans ce chapitre sont données en table 2. Nous avons fait de nombreuses simulations pour tenter de reproduire et d'analyser les résultats expérimentaux et de tester la validité des hypothèses mécaniques. Cependant le nombre de paramètres décrivant le problème (différence de densité, pente, conditions aux limites, nombre de Reynolds) ne permet pas de parcourir tous les cas intéressants, étant donnée la complexité des simulations numériques et le temps de calcul nécessaire pour obtenir des résultats sur un intervalle de temps pertinent.

Les simulations ont été faites avec l'algorithme (32), avec une viscosité dynamique indépendante de Φ ($\Lambda = 1$), et de même F est pris constant. L'adimensionnement des distances est choisi tel que le volume initial de fluide dense est égal à 1, et tous les calculs présentés sont faits avec un volume initial de forme rectangulaire avec un rapport d'aspect de 3 et de densité homogène. Nous avons testé d'autres rapports d'aspect et des densités intiales stratifiées, sans noter de différence significative ultérieurement au démarrage de l'écoulement. Pour adimensionner les vitesses, nous avons utilisé comme au chapitre I, page 22, la vitesse de chute qu'aurait un corps solide de mêmes densité et diamètre que ce volume de fluide initial dans le fluide ambiant, à savoir $\sqrt{\alpha g L}$. Le temps est donc adimensionné par $T = \sqrt{L/\alpha g}$, de l'ordre du dixième de seconde dans les expériences. Pour une avalanche réelle, comme celle du 25 février 1999 dans la Vallée de la Sionne, en Suisse, et pour laquelle des mesures ont été faites [17], on peut estimer que l'adimensionnement serait

$L \simeq 40$ m, $U \simeq 80$ m s^{-1}, et $T \simeq 0.5$ s.

Les calculs en faible différence de densité (N3–N6) ont été réalisés sur le domaine rectangulaire $\Omega = [-\sqrt{3}; 20] \times [0; 6]$ où le fluide dense occupait initialement la zone $[-\sqrt{3}; 0] \times [0; \sqrt{3}/3]$, comme dans l'expérience (E2). Dans les expériences (E1), différents rapports, plus proches de 2, avaient été pris. Ces calculs sont tous pour une pente de $\theta = 32^\circ$, un calcul pour une pente de $\theta = 45^\circ$ et conditions aux limites d'adhérence a aussi été mené avec des résultats similaires. Les calculs en forte différence de densité ont été menés sur un domaine $\Omega = [-\sqrt{3}; 100] \times [0; 3.5]$, du fait de la hauteur plus faible et de l'évolution différente de ce type d'avalanches. Les conditions initiales de densité étaient les mêmes que pour les faibles différences de densité (figure 31), et dans tous les cas $\boldsymbol{u}_0$ était pris nul.

Les calculs ont tous été effectués sur des ordinateurs personnels avec processeurs Intel de fréquence 1 à 2 GHz, et 1 à 2 Go de mémoire vive, équipés d'un système d'exploitation Linux. Dans ces conditions, une itération en temps moyenne, comprenant 5 itérations d'adaptation de maillage, prend environ 6 minutes de temps utilisateur, dont la moitié pour le calcul sur le maillage le plus fin, qui comptait en général environ $4 \cdot 10^4$ éléments. La vorticité maximale atteint en général 10^2 au maximum (hors couches limites des parois), le temps de retournement d'un vortex est donc de l'ordre de $6 \cdot 10^{-2}$ pour les plus rapides. Nous ne pouvions donc pas prendre un pas de temps trop grand, pour des raisons intrinsèques au problème. Le choix de $\delta t = 2 \cdot 10^{-2}$ nous a paru raisonnable, et c'est avec ce pas de temps que tous les calculs présentés ici ont été effectués. Pour des calculs à forte différence de densité, où les caractéristiques de l'écoulement évoluent sur un temps adimensionné de 60 environ, il a donc fallu faire jusqu'à 3000 itérations, donc 2 semaines de calcul.

Cela explique que certaines courbes s'arrêtent plus tôt que d'autres, et que nous ne puissions fournir tous les résultats qui peuvent paraître souhaitables pour une bonne interprétation du phénomène. Par exemple, le choix des calculs effectués a été guidé par l'hypothèse d'une influence négligeable aux grandes échelles du nombre de Reynolds lorsque celui-ci est suffisamment élevé (voir paragraphe 1). Or il semble qu'il subsiste une influence sensible de ce nombre, voir paragraphe 4.3, et nous avons donc essayé de compléter notre gamme de simulations en le faisant varier, mais sans pouvoir toutefois le faire suffisamment pour répondre complètement aux questions que cela soulève.

Les tailles des éléments étaient comprises entre $3 \cdot 10^{-3}$ pour les plus fins, et plusieurs unités pour les plus grands (voir figure 32). On peut donc noter que, la vitesse adimensionnée étant d'ordre 1, la méthode des caractéristiques pouvait, dans les zones de maillage les plus fines, parcourir une dizaine d'éléments[1]. Au cours de l'écoulement, les caractéristiques du nuage changent et il faut donc modifier les paramètres de raffinement de maillage, tels que la taille de la plus petite maille et le coefficient qui fixe la variation maximale des tailles de maille dans l'espace.

Les calculs sont effectués en « double précision », c'est-à-dire que l'erreur machine est de l'ordre de 10^{-16}. La condition d'arrêt dans l'algorithme d'Uzawa pour la contrainte de divergence

---

[1] D'un point de vue algorithmique, la recherche de cet élément ne se faisait pas par parcours mais par une méthode de recherche hiérarchique, voir annexe B.

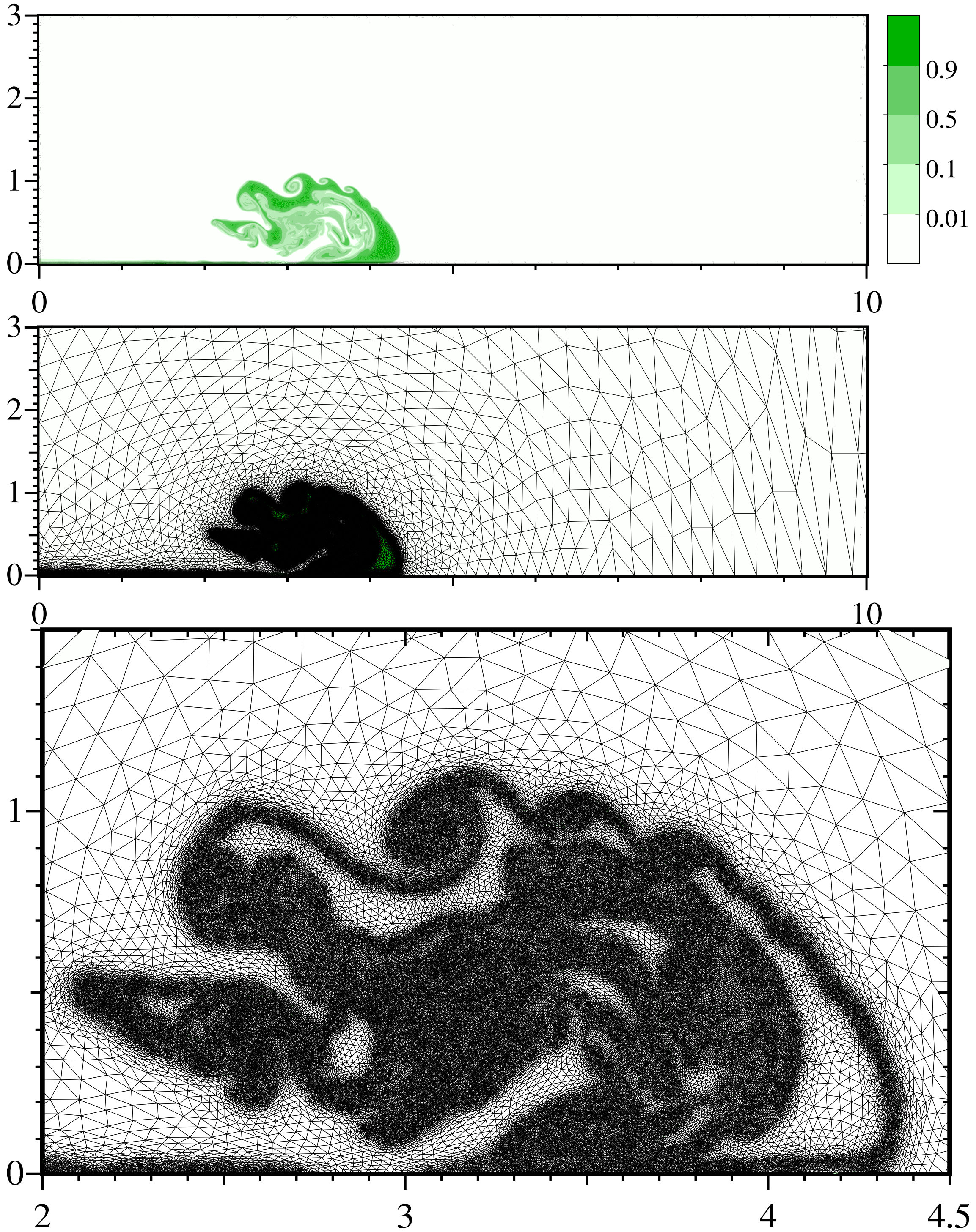


FIG. 32 – *Exemple de maillage adaptatif dans la simulation (N4).*

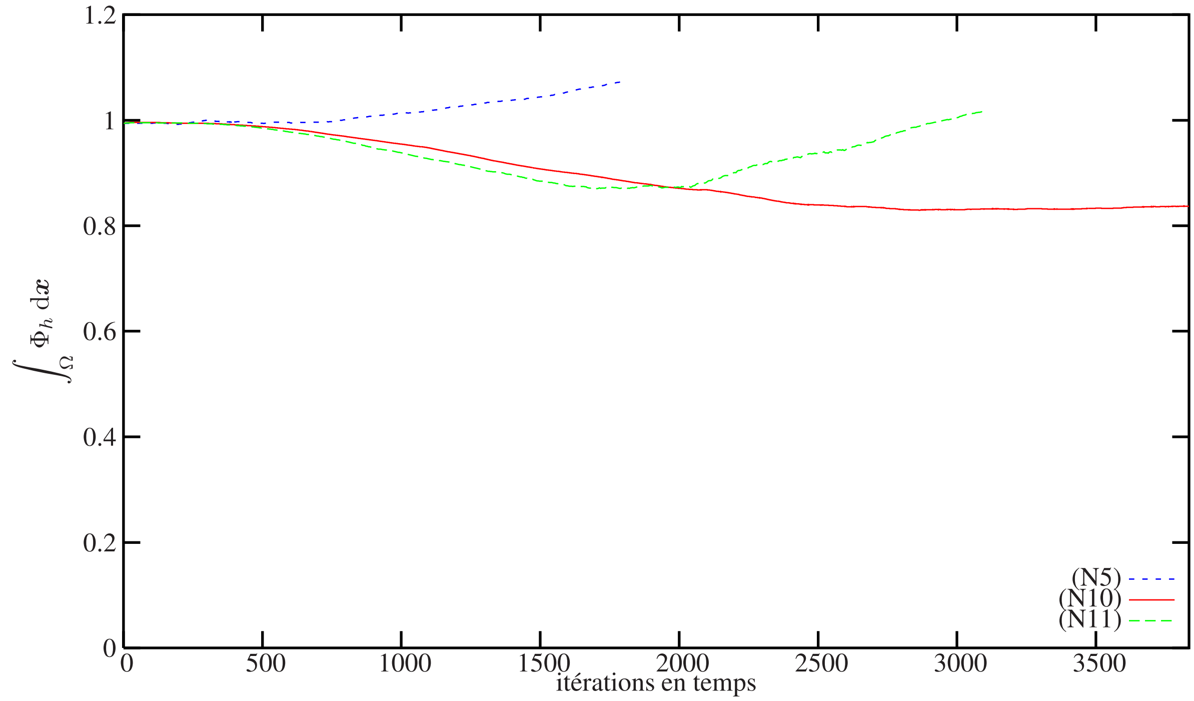


FIG. 33 – *Conservation approchée de la masse.*

sur la vitesse (étape 5 de l'algorithme (32), page 38) était fixée à une erreur inférieure à 10^{-12}, ce qui a permis des convergences en une dizaine d'itérations en général, quelques dizaines dans certains cas. Pour quelques cas, des calculs ont été effectués avec différents paramètres de maillages, plus ou moins fins, qui permettent de vérifier que les quantités globales sont inchangées pour des maillages suffisamment fins.

Enfin, nous avons prêté une attention particulière à la conservation de la masse et à l'approximation du principe du maximum pour l'inconnue Φ, qui fournissent un bon indicateur d'erreur. Les variations de masse $\displaystyle\int_\Omega \Phi_h \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}$ en une itération (avec un pas de temps $\delta t = 2 \cdot 10^{-2}$) étaient en général de l'ordre de 10^{-5}, et dans le cas le pire 10^{-4}. Cependant, l'intervalle de temps T sur lequel nous avons dû mener nos simulations étant très grand, les variations ont pu atteindre des proportions importantes qui peuvent avoir eu une influence sur nos résultats. On présente en figure 33 ces variations pour quelques simulations. Le théorème d'estimation d'erreur du chapitre IV nous garantit que, pour le même intervalle de temps T, le choix d'un pas de maillage et de temps plus petits permet de réduire cette erreur jusqu'à un niveau arbitraire[2].

De même, on a montré dans le chapitre IV que notre approximation Φ_h respectait des bornes arbitrairement proches de celles de Φ pour h et δt suffisamment petits. En pratique, notre discrétisation était suffisamment fine pour avoir un dépassement correct des bornes, restant de l'ordre de 10^{-1}, voir figure 34. Cependant, si α est grand, ce n'est pas suffisant pour conserver $\varrho_h =$

---

[2] Néanmoins, ce théorème suppose que nous puissions calculer l'intégrale exacte du second membre issu de la discrétisation par la méthode des caractéristiques, voir paragraphe 3 du chapitre III

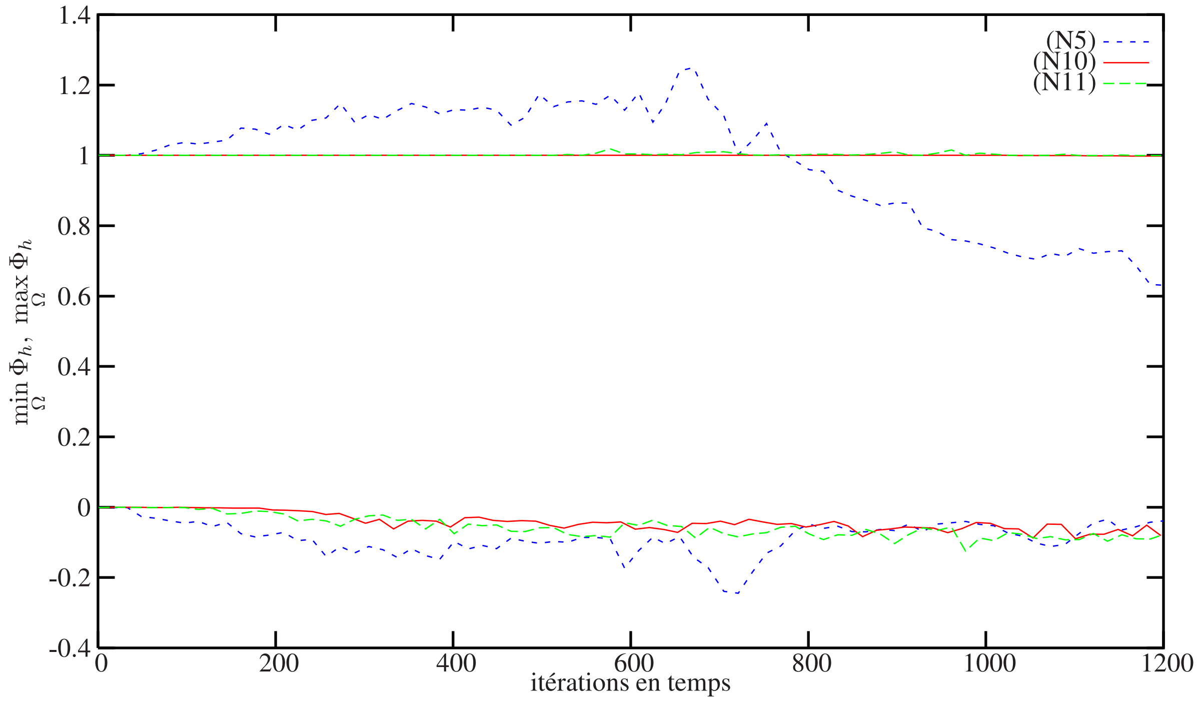


FIG. 34 – *Principe du maximum approché : maximum de l'écart de Φ_h avec ses bornes supérieures et inférieures théoriques.*

$1 + \alpha\Phi_h \geq c > 0$, et il est alors nécessaire d'employer une technique arbitraire si l'on souhaite poursuivre le calcul sans pouvoir raffiner le maillage. Dans ces cas, nous avons appliqué une fonction « filtre » qui affecte à ϱ_h la valeur $1 + \alpha$ si $\Phi_h(\boldsymbol{x}) > 1$, la valeur zéro si $\Phi_h(\boldsymbol{x}) < 0$ et $1 + \alpha\Phi$ sinon. C'est ensuite ce ϱ_h qui était utilisé là où $1 + \alpha\Phi_h$ apparaît dans l'algorithme (32), page 38.

2.2 « Post-traitement » géométrique des résultats numériques

La comparaison de nos résultats de calculs avec les résultats expérimentaux a nécessité un « post-traitement » de ceux-ci, pour obtenir des quantités qui n'étaient pas directement calculées mais qui étaient mesurées expérimentalement, même si ces quantités n'ont pas toujours un sens mathématique très précis. Nous résumons ici le mode d'évalutation que nous avons employé pour automatiser leur mesure. La figure 35 permet de les représenter visuellement, et la figure 31 les représente pour un instant donné dans une simulation.

On dit qu'un point est un *point « de l'avalanche »* en un instant t_m donné si la densité en ce point est supérieure à un certain seuil. En pratique, on a pris le seuil à $\Phi_h^m(\boldsymbol{x}) \geq s^m = 10^{-2} \times \max_\Omega \Phi_h^m$.

La *vitesse du front* U_f est la vitesse de progression du point de l'avalanche $\boldsymbol{x}_f$ de plus grande coordonnée selon l'axe x. À strictement parler, elle doit donc être approchée en détectant ce point pour deux instants successifs, et en calculant la différence finie de leur abscisse $(x_f^{m+1} - x_f^m)/\delta t$. Cependant, au premier ordre en δt, cette vitesse coïncide avec la vitesse $u_x(\boldsymbol{x}_f)$ du fluide au niveau

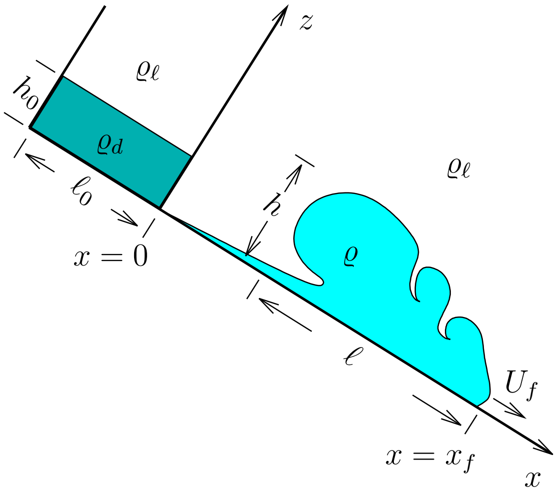


FIG. 35 – *Vitesse du front, hauteur et longueur du nuage. L'aire* $h_0\ell_0$ *est égale à 1, et le rapport* h_0/ℓ_0 *à 3.*

du front, et on constate que cette dernière valeur est moins bruitée que la différence finie. (Malgré cela, certaines courbes brutes sont peu lisibles et on a appliqué dans les figures 40 et 49 un lissage en approchant les données par une courbe de Bézier, de degré égal au nombre de points [58]).

La *hauteur maximale* h de l'avalanche est facile à définir sur une pente uniforme, en utilisant le même seuillage que ci-dessus. Il est à noter que ce n'est pas sa hauteur selon l'axe vertical, mais selon l'axe y (donc il y a une différence d'angle θ). On constate cependant que cette valeur, si elle est faiblement bruitée, est perturbée par les instabilités de l'interface.

La *longueur* ℓ de l'avalanche est une notion difficile à définir rigoureusement. Pour les avalanches avec de faibles écarts de densité, elle est visuellement assez évidente, car il y a une très rapide décroissance de la hauteur en arrière de la couche de mélange. La notion de longueur est donc fortement reliée aux notions de *tête* de l'avalanche (front et couche de mélange), et de *traînée*, proche du sol et peu instable : il s'agit de détecter la séparation x_t entre ces deux régions. Nous avons donc considéré la fonction $a^m \,:\, x \mapsto \dfrac{1}{A}\displaystyle\int_0^x \int \mathbb{1}_{\Phi_h^m(x,y)\geq s^m} \mathrm{d}y\mathrm{d}x$, où A est l'aire totale de l'avalanche, et qui est strictement croissante de $[0{,}x_f]$ dans $[0{,}1]$. L'hypothèse que l'avalanche est formée d'une traînée de faible hauteur puis d'une tête plus haute conduit à supposer que la pente de a^m est nettement plus forte en moyenne sur $[x_t{,}x_f]$ que sur $[0{,}x_t]$ Nous nous sommes ainsi ramenés à un problème de minimisation de $a^m(x) - x/x_f$, qui en l'absence de bruit permet de détecter cette rupture de pente. La fonction étant en pratique très bruitée, nous avons appliqué un simple algorithme de descente à pas constant en nous reposant fortement sur une bonne initialisation, qui est donnée par la valeur trouvée au pas de temps précédent[3]. Cet algorithme est tout-à-fait primaire, et il explique les sauts qui apparaissent dans les courbes de résultats. On a toutefois pu vérifier que celles-ci étaient pertinentes, par visualisation comme sur la figure 31, dans la mesure où la notion de longueur peut être discernée.

---

[3] Il faut donc initialiser cette longueur pour $t = 0$. Comme il est difficile de définir alors la longueur de la « tête », on a habituellement pris la longueur totale du volume initial, mais j'ai parfois oublié d'initialiser à cette longueur: c'est la raison pour laquelle certaines courbes de longueur commencent à $\ell = 1$ pour $t = 0$, par exemple figure 38. On voit que rapidement, la condition initiale perd son importance.

La *tête* est ainsi définie comme les points de l'avalanche d'abscisse comprise entre x_t et x_f, avec une aire $A_f = \int \int_{x_t}^{x_f} \Phi(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$. Le *centre de masse* (x_{MC},y_{MC}) à l'instant t_m de la tête est calculé avec :

$$x_{MC}(t_m) = \frac{1}{A_f} \int \int_{x_t}^{x_f} x\Phi_h^m(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x} \qquad y_{MC}(t_m) = \frac{1}{A_f} \int \int_{x_t}^{x_f} y\Phi_h^m(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

(c'est donc le barycentre non pas de la densité, mais de la densité supplémentaire due à l'avalanche). La *vitesse du centre de masse* U_{MC} de la tête est donnée par la différence finie de cette vitesse entre deux pas de temps.

3 Validation par comparaison aux expériences dans les conditions de Boussinesq

Dans ce cas, on utilise l'approximation de Boussinesq, décrite au chapitre I, paragraphe 2. Alternativement, on peut aussi utiliser le modèle complet, qui donne les mêmes résultats au prix d'un coût plus important, puisque de nombreuses variables sont alors calculées qui sont en fait négligeables.

Les résultats expérimentaux de Beghin *et al.* [2] et de Rastello et Hopfinger [45] permettent alors de valider quantitativement plusieurs caractéristiques essentielles de l'écoulement. De plus, les observations qualitatives qu'ils ont rapportées peuvent être confrontées aux visualisations obtenues dans les simulations numériques [20].

3.1 Vitesse du front

La vitesse de progression du front de l'avalanche a pu être mesurée de façon relativement fiable dans les expériences, soit par visualisation photographique [2], soit par mesures au moyen de sondes de conductivité [45]. Une certaine dispersion est due au caractère tridimensionnel de l'écoulement expérimental, où des digitations apparaissent sur le front. Plusieurs définitions de sa position sont alors possibles : la position la plus en aval, la plus en amont, ou une moyenne, qui a son tour peut-être diversement définie. Dans le cas de mesures par capteurs de conductivité, il est difficile de contrôler à quelle définition correspondent les mesures faites [44, page 94].

La figure 36 montre que les simulations numériques bidimensionnelles faites avec des conditions aux limites d'adhérence sont clairement inappropriées pour reproduire les expériences. Ce résultat n'était pas attendu a priori, et l'interprétation la plus probable est que le comportement de la couche limite est différent en 2D et en 3D, dans la phase de décélération de l'avalanche au moins.

Les résultats pour une condition aux limites de glissement sont au contraire très bons tant en comportement que quantitativement. On note cependant qu'il existe une influence non négligeable

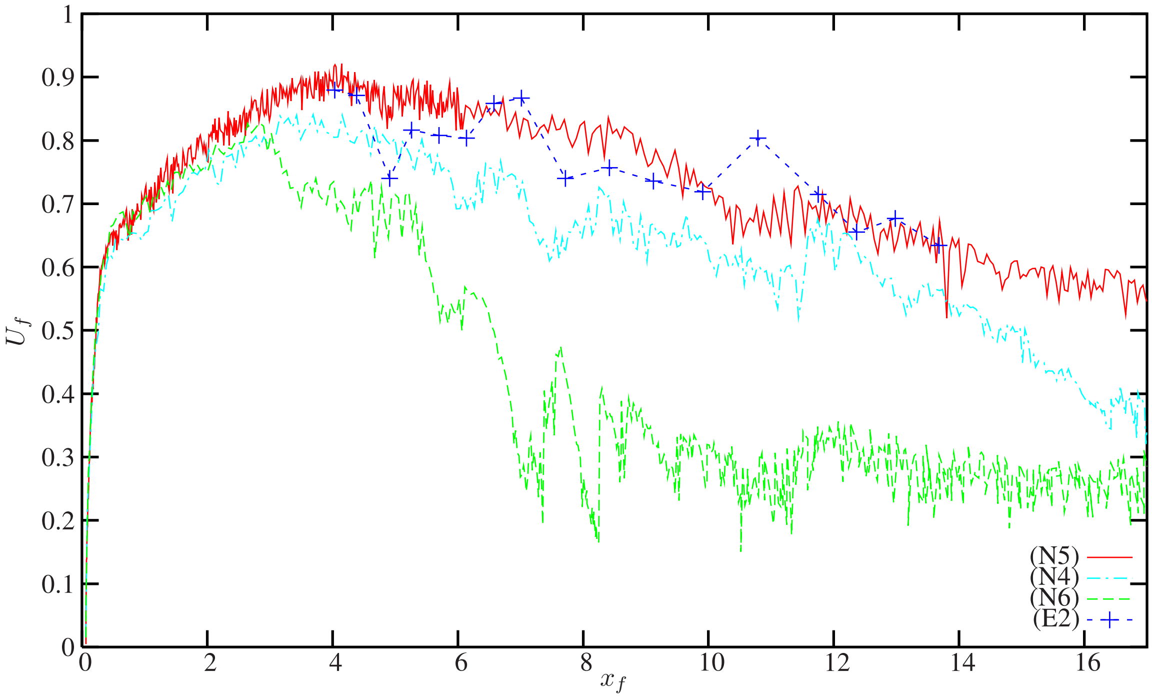


FIG. 36 – *Vitesse du front du nuage dans les simulations numériques, avec conditions aux limites de glissement (N4, N5) et d'adhérence (N6), et d'une bouffée d'eau salée dans l'eau pure (E2). Les simulations (N4) et (N5) sont faites avec des nombres de Reynolds respectifs de* $10^{9/2}$ *et* 10^5*, c'est donc théoriquement (N4) qui reproduit le mieux les conditions expérimentales (E2).*

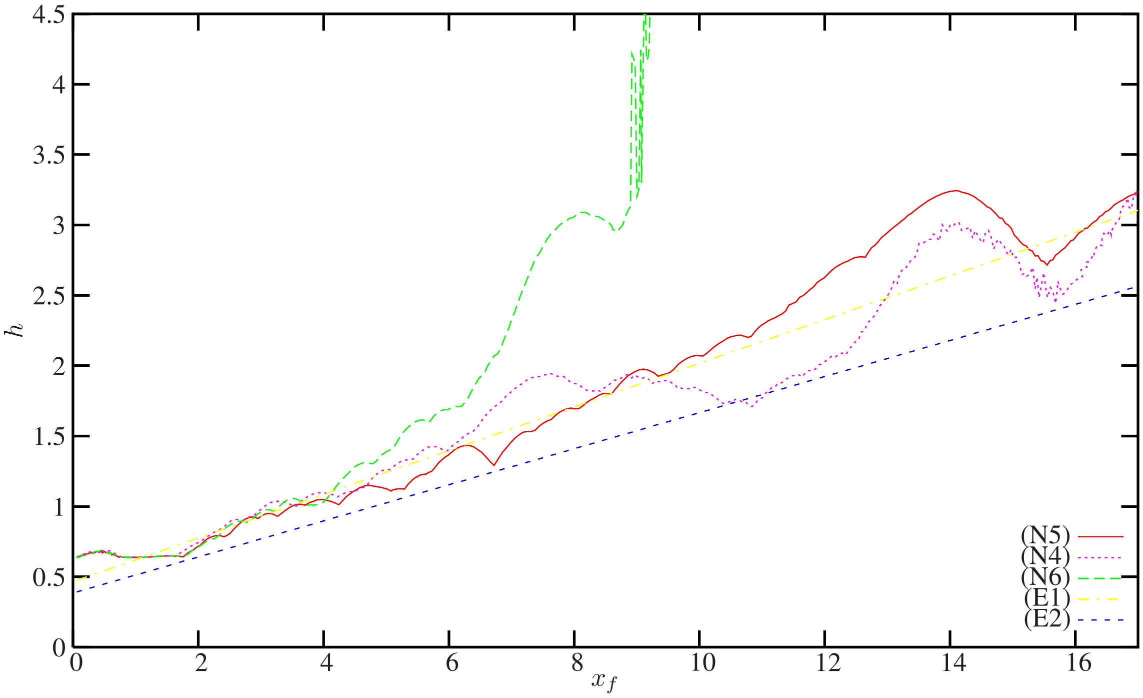


FIG. 37 – *Croissance en hauteur du nuage dans les simulations numériques, avec conditions aux limites de glissement (N4, N5) et d'adhérence (N6), et d'une bouffée d'eau salée dans l'eau pure pour le régime proche (E2) et pour le régime lointain (E1)*

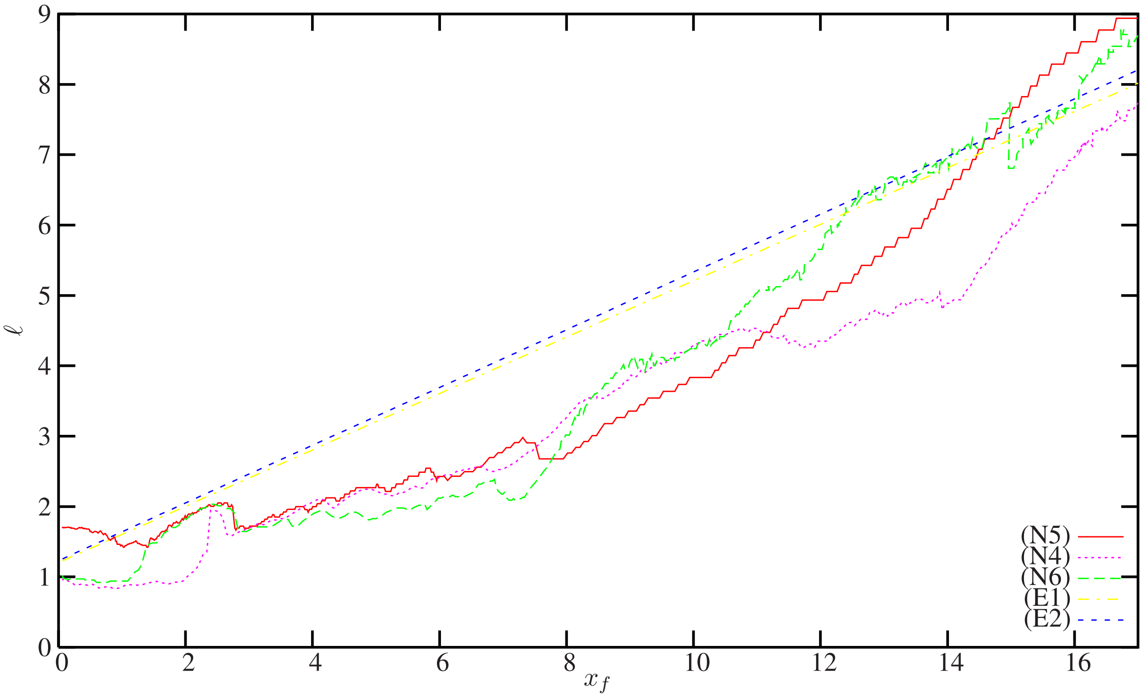


FIG. 38 – *Croissance en longueur du nuage dans les simulations numériques, avec conditions aux limites de glissement (N4, N5) et d'adhérence (N6), et d'une bouffée d'eau salée dans l'eau pure (E1)*

de la vitesse du front au nombre de Reynolds, et que, à nombre de Reynolds équivalent, la simulation (N4) a tendance à sous-estimer la vitesse du front trouvée expérimentalement dans (E2).

3.2 Croissance du nuage en hauteur et en longueur

Expérimentalement, la hauteur et la longueur du nuage formé par l'avalanche ont été mesurées sur des visualisations de l'écoulement, et sont cette fois-ci soumises à des incertitudes du même type que les mesures faites sur les résultats numériques (voir paragraphe 2.2). La conclusion des études expérimentales est que la croissance du nuage, que ce soit en hauteur ou en longueur, est une fonction linéaire de la position du front ; et que la pente de cette fonction est une fonction affine de l'angle θ de la pente avec l'horizontale. Les mesures de Beghin *et al.*[2] sont faites plutôt dans le régime lointain ($x_f \gtrsim 10$), et donnent les lois :

$$h(x_f) = [(3.6\,\theta + 40)\cdot 10^{-3}]\,(x_f + x_0) \qquad \ell(x_f) = [(4.4\,\theta + 260)\cdot 10^{-3}]\,(x_f + x_0) \tag{E1}$$

Celles de Rastello et Hopfinger [45] sont faites dans le régime proche ($x_f \in [4; 14]$) et, si elles ont la même longueur, donnent une moindre croissance en hauteur du nuage :

$$h(x_f) = [(3.6\,\theta + 13)\cdot 10^{-3}]\,(x_f + x_0) \tag{E2}$$

Dans ces équations, x_0 correspond à une origine virtuelle, qui prolonge l'auto-similarité en-deça de la position du front x_f où celle-ci apparaît. Dans les figures, nous avons utilisé la valeur $x_0 = 3$.

Les résultats sont donnés en figures 37 et 38. On voit, là aussi, que la condition d'adhérence de (N6) a un effet inattendu sur le comportement de l'écoulement, avec une très forte croissance de la hauteur sur la zone $x_f \in [6; 9]$, qui correspond à la phase de forte décélération de l'avalanche (N6). La longueur de l'avalanche, curieusement, semble être au contraire peu influencée par la condition d'adhérence, et les résultats sont proches de l'expérience tant pour (N6) que pour (N5).

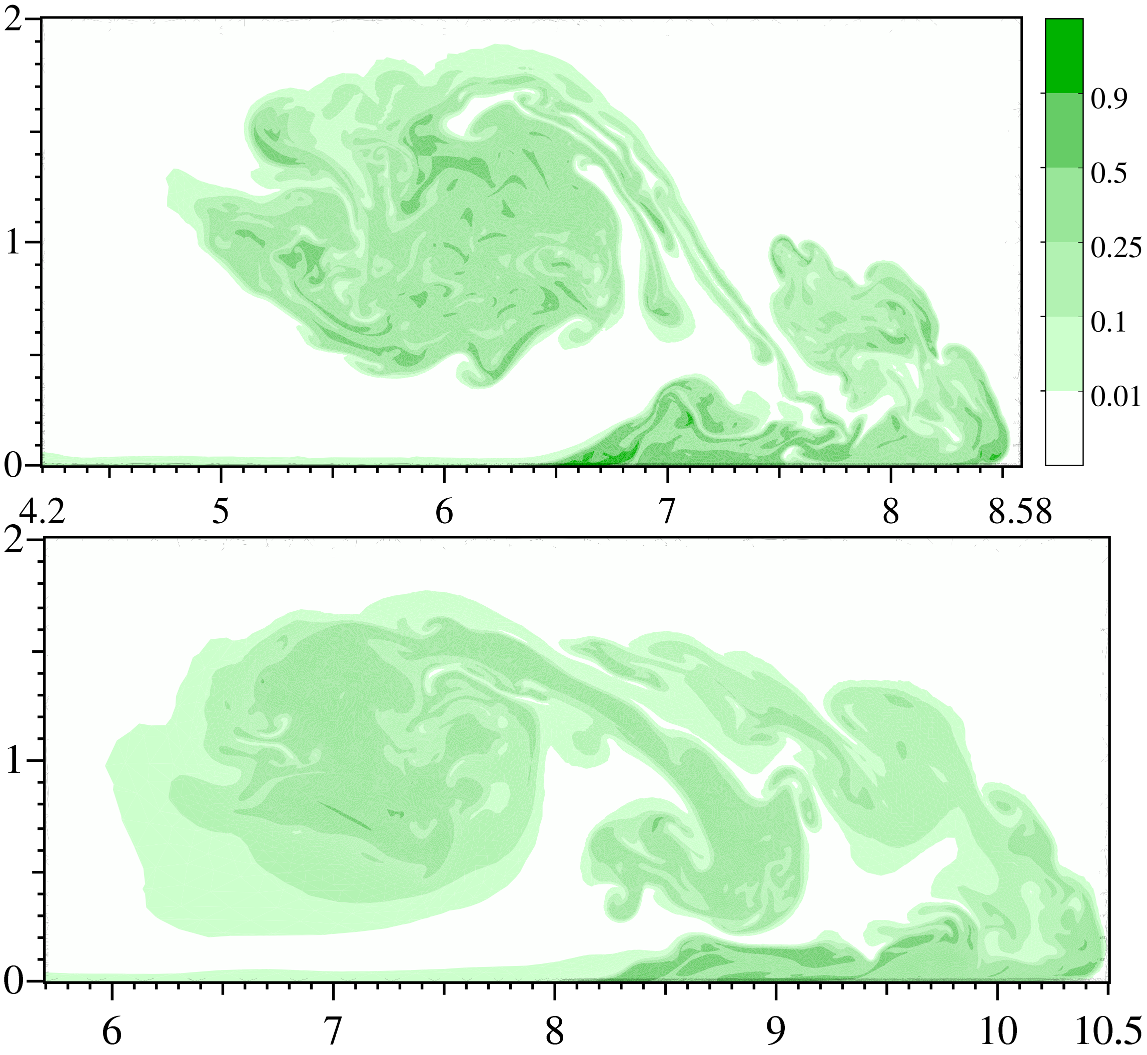
On note sur la courbe de hauteur de la simulation (N5), figure 37, des variations évoquant des cycloïdes superposées, d'amplitudes variables. Ces variations proviennent du développement d'instabilités d'interface, qui réalisent temporairement le maximum de hauteur de l'avalanche.

La bonne concordance entre les résultats expérimentaux et numériques indique que le taux d'entraînement d'air ambiant dans la suspension est similaire dans les ceux cas. Ceci confirme la validité de l'hypothèse selon laquelle les effets des grandes structures de la couche de mélange sont principalement bidimensionnels, et que par conséquent nos calculs 2D sont pertinents.

3.3 Aspect général de l'écoulement

La figure 39 présente l'aspect d'un résultat de simulation numérique et d'un écoulement de laboratoire. On retrouve une structure similaire : de grandes structures ressemblant à des tourbillons de Kelvin–Helmholtz par-dessus lesquelles se superposent des instabilités de plus petite échelle. À l'arrière de la tête, un tourbillon dont la hauteur est presque égale à celle de la tête surmonte une région de moindre densité, où le fluide ambiant est entraîné dans le nuage.

a. Simulation numérique (N4)



b. Expérience (E2)

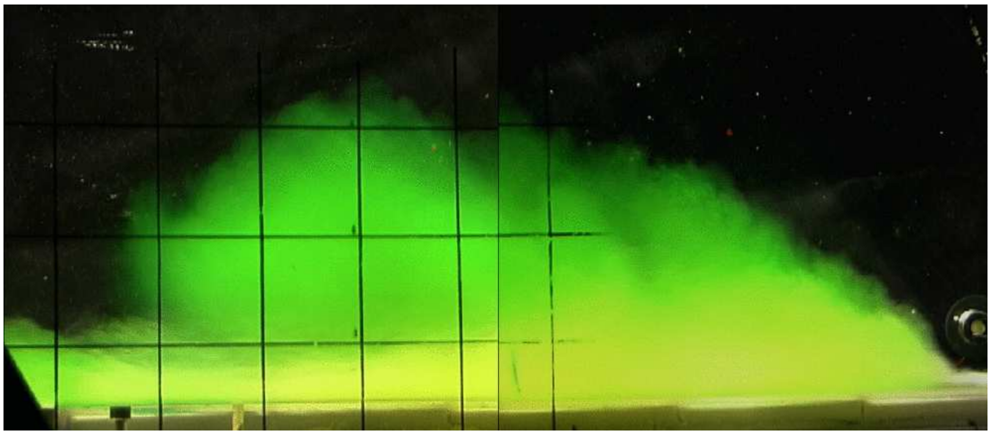


FIG. 39 – *Aspect des simulations numériques et expériences. On visualise ici la distribution de* Φ *(équivalent à la salinité pour l'expérience) dans le domaine. Les visualisations de la simulation et la photographie sont à la même échelle. L'instant auquel a été prise la photographie n'est pas connu, on donne les visualisations de simulations à deux instants pour lesquels la longueur du nuage est proche. (Photo: Hervé Bellot, Marie Rastello)*

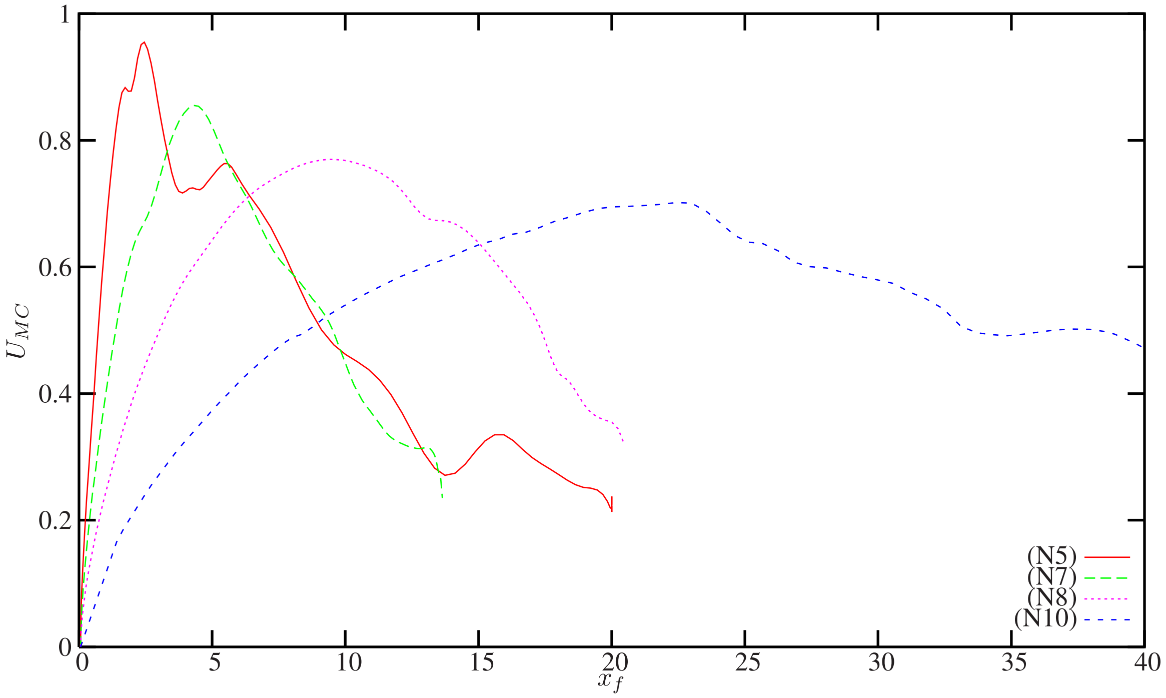


FIG. 40 – *Influence de la différence de densité α sur la vitesse du centre de masse U_{MC}. Simulations numériques pour $\alpha = 0.02$ (N5), $\alpha = 3$ (N7), $\alpha = 9$ (N8) et $\alpha = 19$ (N10). Notez bien que la vitesse est adimensionnée par $\sqrt{\alpha g h}$.*

4 Cas des fortes différences de densité

4.1 Conditions aux limites

Les résultats dans le cas de faibles différences de densité, paragraphe 3, indiquent clairement que des conditions de glissement doivent être utilisées. Un calcul avec des conditions d'adhérence et pour $\alpha = 19$ a cependant été mené. Dans ce cas, le comportement de l'écoulement est inattendu, avec un « décollement » du front. Les résultats donnés dans la suite sont donc tous pour des conditions aux limites de glissement.

4.2 Effet du rapport de densité

Sur les figures 40, 41 et 42, on compare l'évolution des nuages (avalanches) pour quatre rapports de densité. La figure 40 montre que la position du front x_f^+ où le nuage atteint sa vitesse maximale se déplace vers l'aval quand α augmente, et donc que le nuage a une plus grand inertie.

Concernant la modification du taux de croissance du nuage quand le rapport de densité augmente, le modèle proposé par Rastello et Hopfinger [45] prévoit que la croissance en longueur reste identique tandis que la hauteur est diminuée par un coefficient multiplicatif $(1 + 1/\sqrt{\alpha + 1})/2$. Les simulations numériques montrent bien la même tendance d'une diminution de la hauteur, avec un ordre de grandeur similaire à celui prévu. L'accord n'est cependant pas quantitatif, et la forme

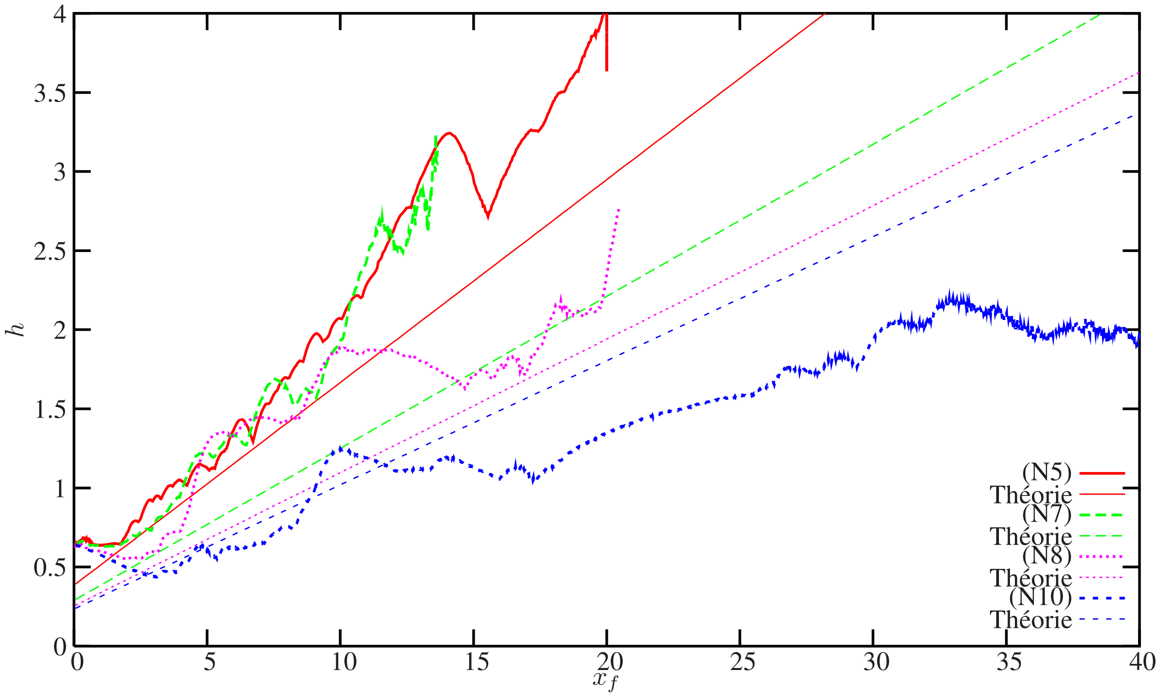


FIG. 41 – *Influence de la différence de densité α sur la hauteur maximale h de l'avalanche. Simulations numériques pour $\alpha = 0.02$ (N5), $\alpha = 3$ (N7), $\alpha = 9$ (N8) et $\alpha = 19$ (N10).*

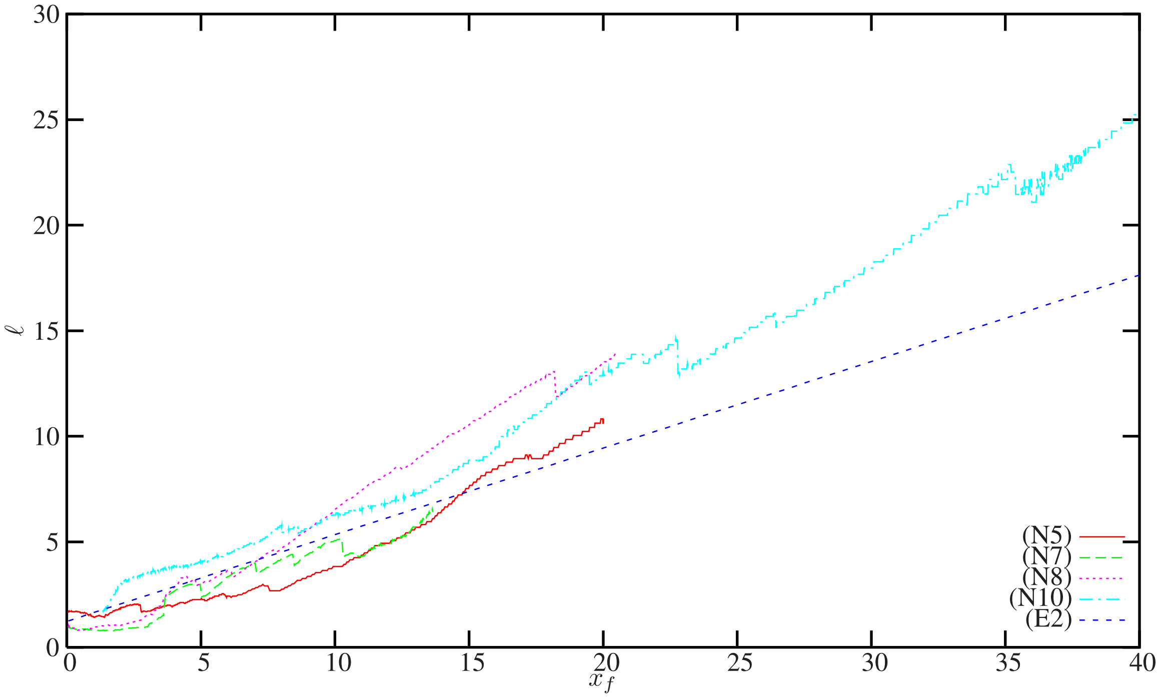


FIG. 42 – *Influence de la différence de densité α sur la longueur ℓ de la tête de l'avalanche. Simulations numériques pour $\alpha = 0.02$ (N5), $\alpha = 3$ (N7), $\alpha = 9$ (N8) et $\alpha = 19$ (N10).*

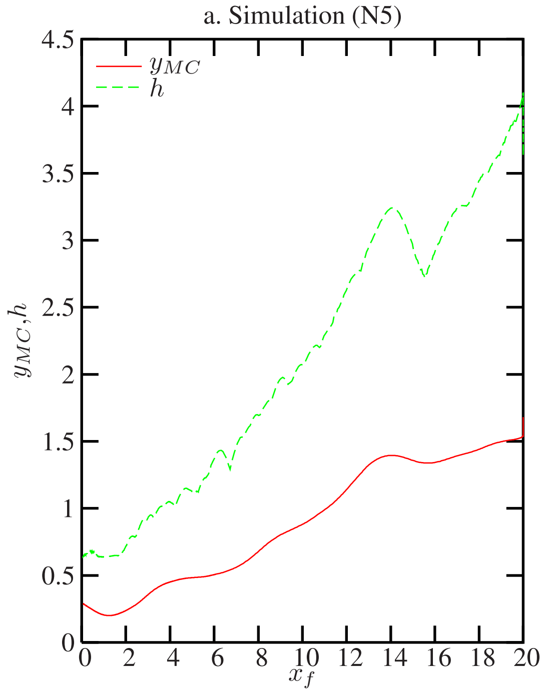


FIG. 43 – *Ordonnée du centre de masse* y_{MC}*, et hauteur* h *de la tête du nuage en fonction de* x_f *pour deux rapports de densité. a,* $\alpha = 0.02$ *; b,* $\alpha = 19$*.*

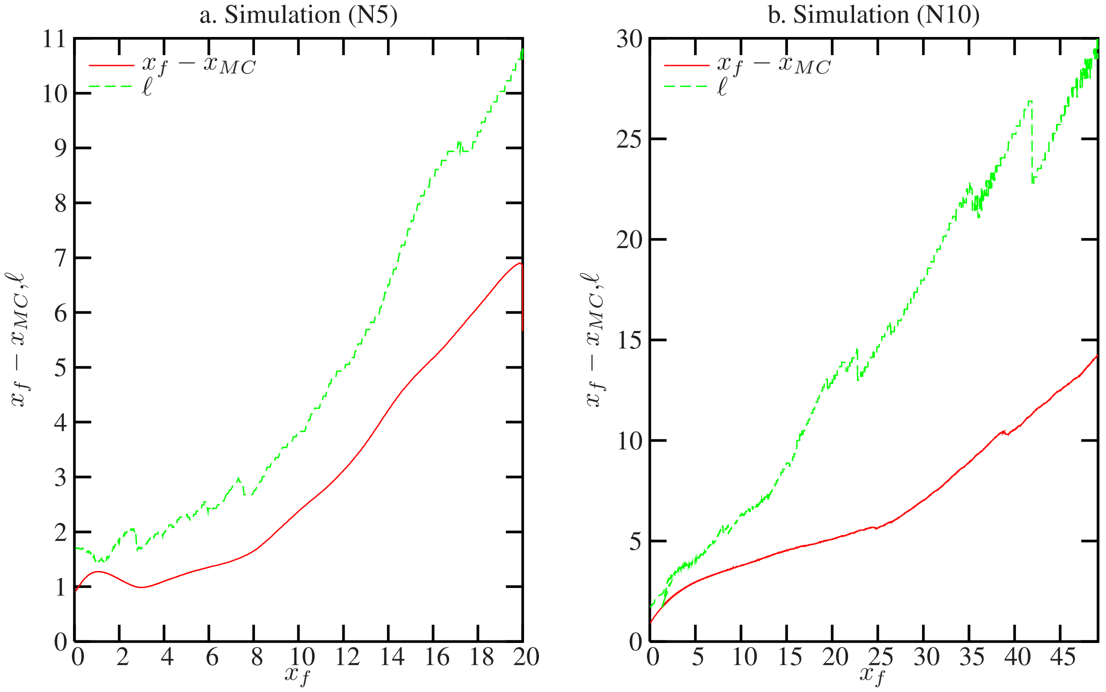


FIG. 44 – *Distance* $(x_f - x_{MC})$ *entre l'abcisse du centre de masse et celle du front, et longueur* ℓ *de la tête du nuage en fonction de* x_f *pour deux rapports de densité. a,* $\alpha = 0.02$ *; b,* $\alpha = 19$*.*

de la dépendance en α du taux de croissance semble différente, et les résultats pour la longueur sont difficiles à interpréter.

La croissance en hauteur est bien moindre quand α est grand ($\alpha \gtrsim 9$). Par contre, jusqu'à $\alpha \simeq 3$, le taux de croissance reste similaire à celui qu'on obtient dans les conditions de Boussinesq. La croissance en longueur se fait avec un taux comparable pour les différentes valeurs de α (pentes similaires), mais avec un décalage qui s'établit très tôt dans l'écoulement, et qui correspond à un rapport du simple au double entre la longueur d'un nuage léger ($\alpha = 0.02$) et un nuage dense ($\alpha = 19$) pour $x_f \lesssim 10$. Toutefois, la difficulté de définir la longueur du nuage dans le cas où α est grand limite les interprétations de ces résultats.

On voit aussi (figure 43) que, selon que le rapport de densité est faible ou fort, le centre de masse de l'avalanche est situé plus ou moins haut dans le nuage, du fait de la formation d'une couche dense en bas du nuage. Lorsque $\alpha = 0.02$, le rapport h/y_{MC} est d'environ 2.5, et augmente faiblement avec x_f. Pour $\alpha = 19$, il est de 4 environ.

Pour une avalanche dense le centre de masse est également plus proche du front qu'il ne l'est dans une avalanche en conditions de Boussinesq (ceci, relativement à la longueur de l'avalanche, figure 44).

4.3 Influence du nombre de Reynolds

Les figures 45, 46, 47 et 48 montrent comment le nombre de Reynolds affecte le comportement de l'avalanche. On trouve que la sensibilité n'est pas du tout la même pour des avalanches à faibles différences de densité et à fortes différences de densité.

Pour les faibles différences de densité, on voit que le nombre de Reynolds affecte peu la phase d'accélération du front : les figures 45 et 46 respectivement montrent l'invariance de x_f^+ et x_f^*, et celle de U_{MC} et de U_f pour $x_f < x_f^*$. La phase de décélération présentant des instabilités de très grande échelle, on trouve une variabilité de la vitesse U_{MC} du centre de masse, mais elle semble s'appuyer pour les trois valeurs de Re sur une même courbe moyenne. On identifie plus nettement l'augmentation de la vitesse du front avec le nombre de Reynolds.

Pour les fortes différences de densité (figure 48), la dépendance est d'une autre nature : les courbes des vitesses U_{MC} et U_f se séparent nettement pour $x_f > 10$, alors qu'elles sont très proches jusque là. On a pour $\mathrm{Re} = 10^4$, $x_f^+ \simeq x_f^* \simeq 13$, tandis que pour $\mathrm{Re} = 10^5$, $x_f^+ \simeq 18$ et $x_f^* \simeq 25$.

4.4 Influence de la pente

Les figures 49, 50 et 51 donnent une comparaison des avalanches sur deux inclinaisons différentes. La croissance en hauteur est fortement affectée par la pente, alors que la longueur est inchangée.

Sur la figure 49, qui présente la vitesse U_{MC} en fonction de la position du centre de masse x_{MC}, on a également tracé la vitesse théorique d'une avalanche dense, obtenue par Rastello et Hopfinger [45]. Cette vitesse est fonction de la densité, de la pente et d'un paramètre inconnu E_0,

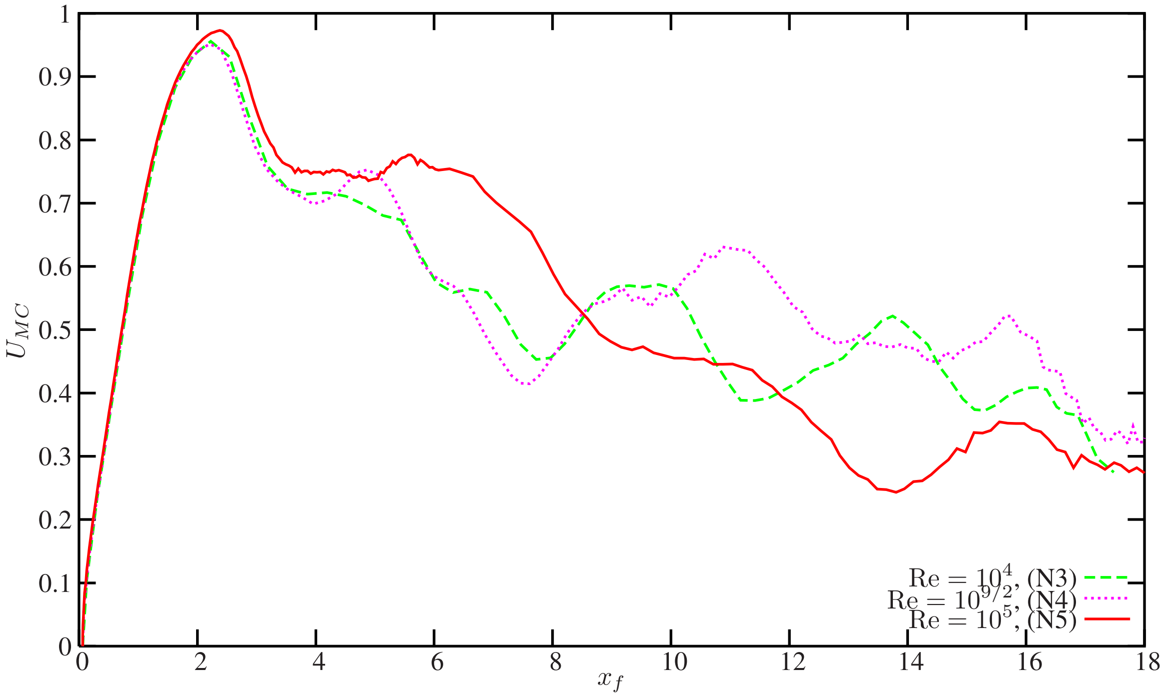


FIG. 45 – *Influence du nombre de Reynolds sur les vitesses du front et du centre de masse dans les simulations numériques pour de faibles différences de densité.*

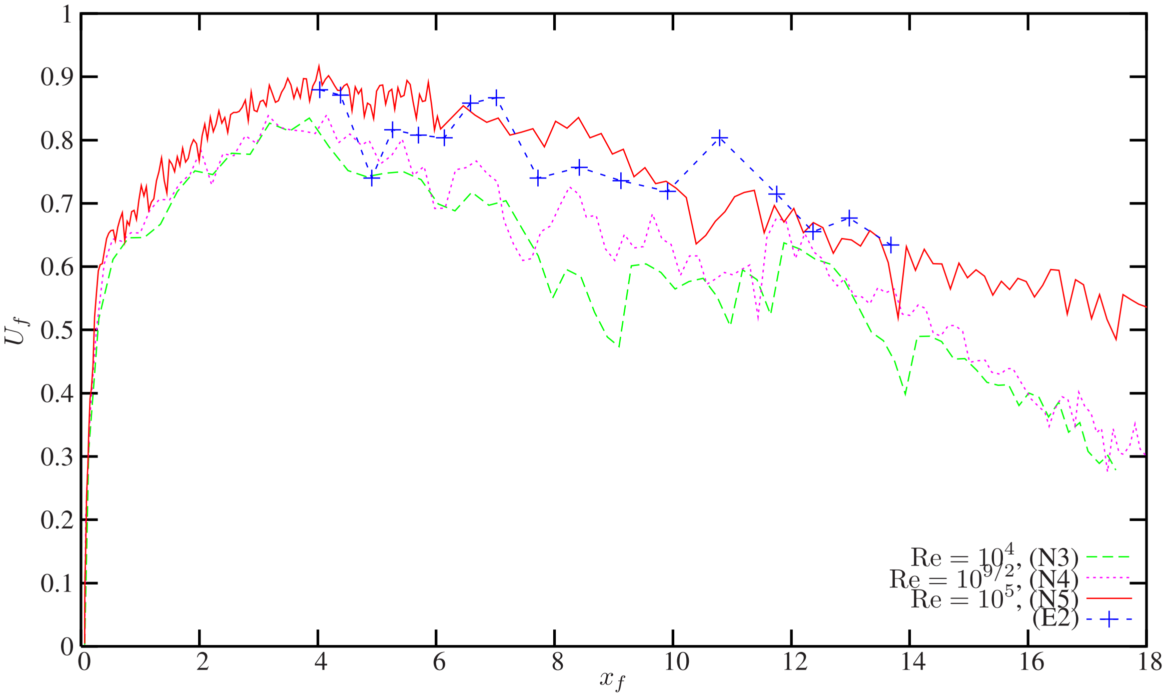


FIG. 46 – *Influence du nombre de Reynolds sur les vitesses du front de l'avalanche dans les simulations numériques pour de faibles différences de densité.*

qui gouverne l'entraînement d'air dans le nuage. Un choix approprié de E_0 pour chaque pente permet une bonne approximation de la vitesse obtenue dans les simulations numériques dans la phase d'accélération de l'avalanche. Les courbes divergent ensuite, soit que des effets de la bidimensionnalité des simulations prennent de l'importance dans la phase de décélération, soit que des phénomènes non pris en compte dans la théorie apparaîssent dans cette phase.

4.5 Profils de densité et de vitesse

Les figures 52 à 55 donnent les profils de la vitesse et de la densité pour deux coupes verticales de la tête de nuages de faible et forte densités.

5 Conclusion

Les écoulements gravitaires sur des pentes présentés ici présentent une très grande complexité dans leur structure. L'instabilité de Kelvin–Helmholtz qui apparaît dans la couche de mélange (figure 32) connaît une évolution très différente du cas plan, du fait de la longueur finie du nuage, et donne à l'écoulement établi une structure complexe, très différente d'aspect selon le rapport de densité (figure 31).

Néanmoins, comme l'ont montré les études théoriques [45], on peut extraire de cette complexité des caractéristiques qui démontrent une continuité des comportements des faibles aux fortes différences de densité. Les simulations numériques permettent de tester ces conjectures pour les fortes différences de densité, inaccessibles expérimentalement. Leur validité est démontrée pour de faibles différences de densité, et elles viennent confirmer de nombreuses conjectures mécaniques, même si elles amènent sans doute plus de questions que de réponses définitives.

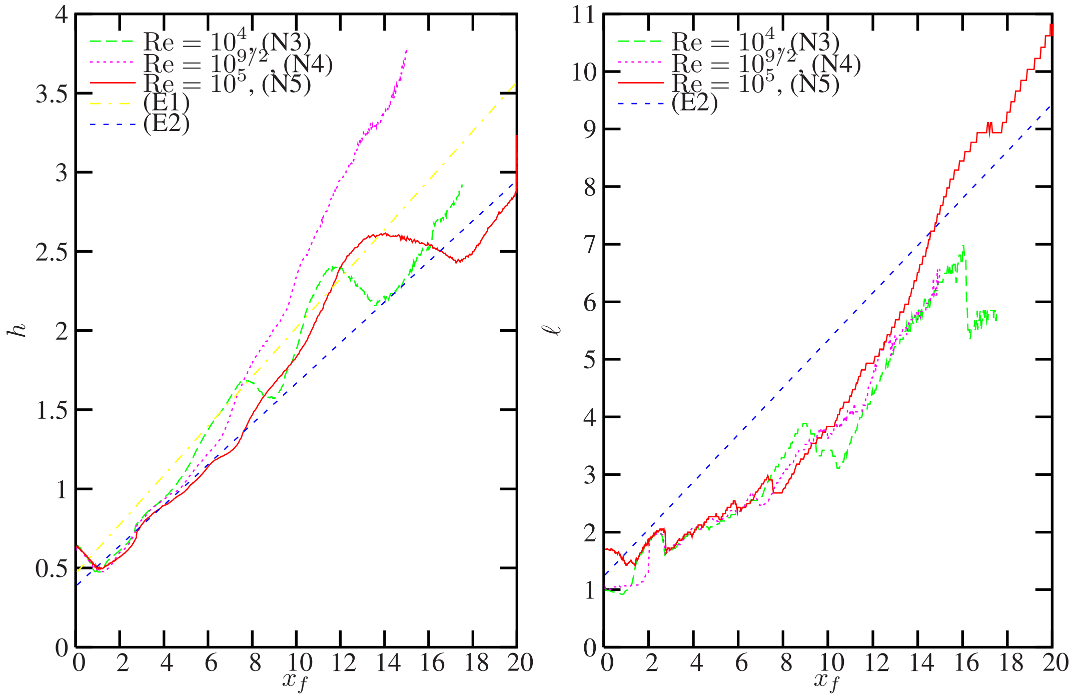


FIG. 47 – *Influence du nombre de Reynolds sur la hauteur et la longueur du nuage dans les simulations numériques pour de faibles différences de densité.*

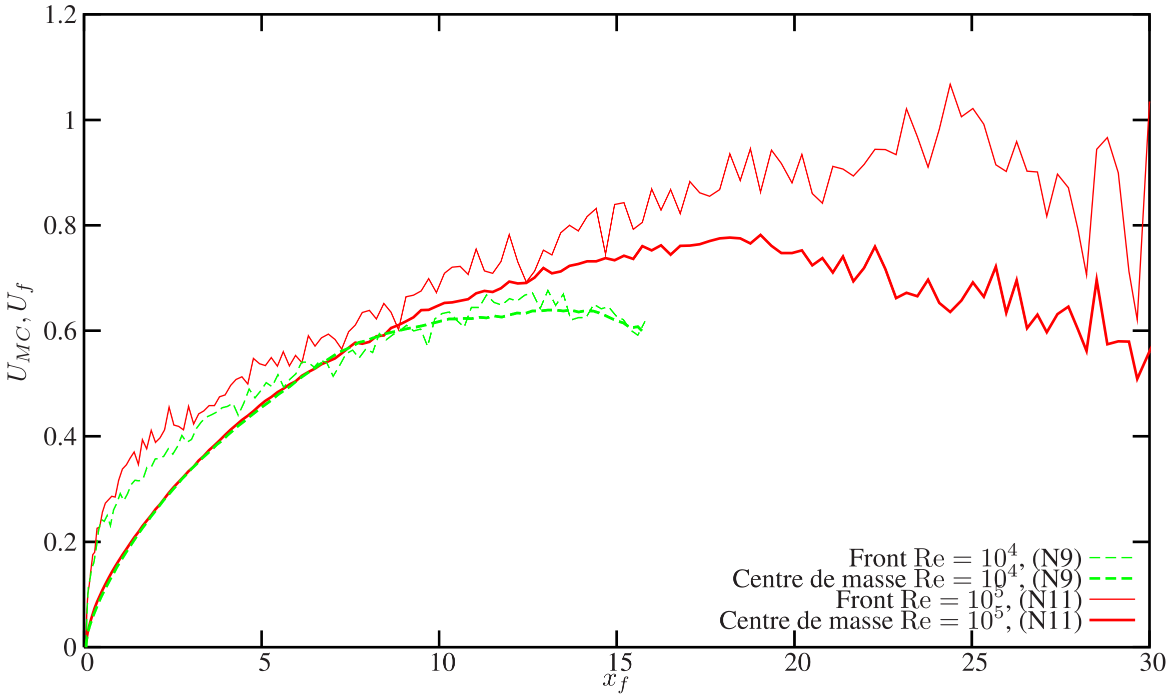


FIG. 48 – *Influence du nombre de Reynolds sur les vitesses du front et du centre de masse pour une forte différence de densité* $\alpha = 19$.

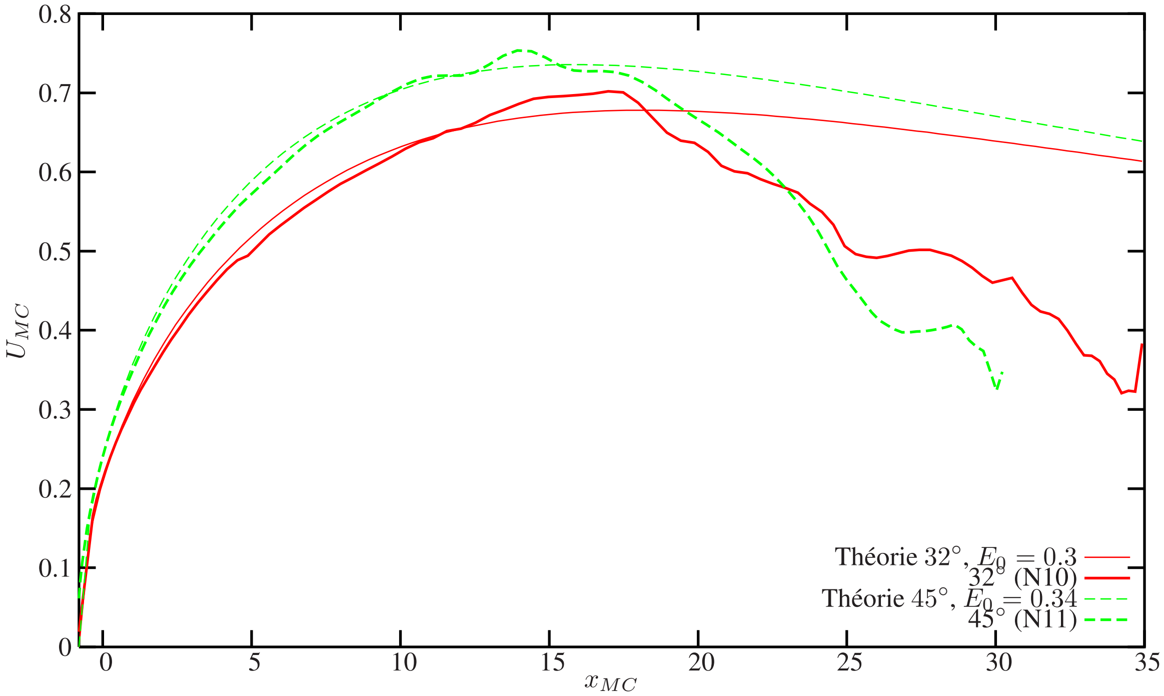


FIG. 49 – *Influence de la pente θ sur la vitesse du centre de masse U_{MC}. Simulations numériques pour $\theta = 32°$ (N10) et $\theta = 45°$ (N11).*

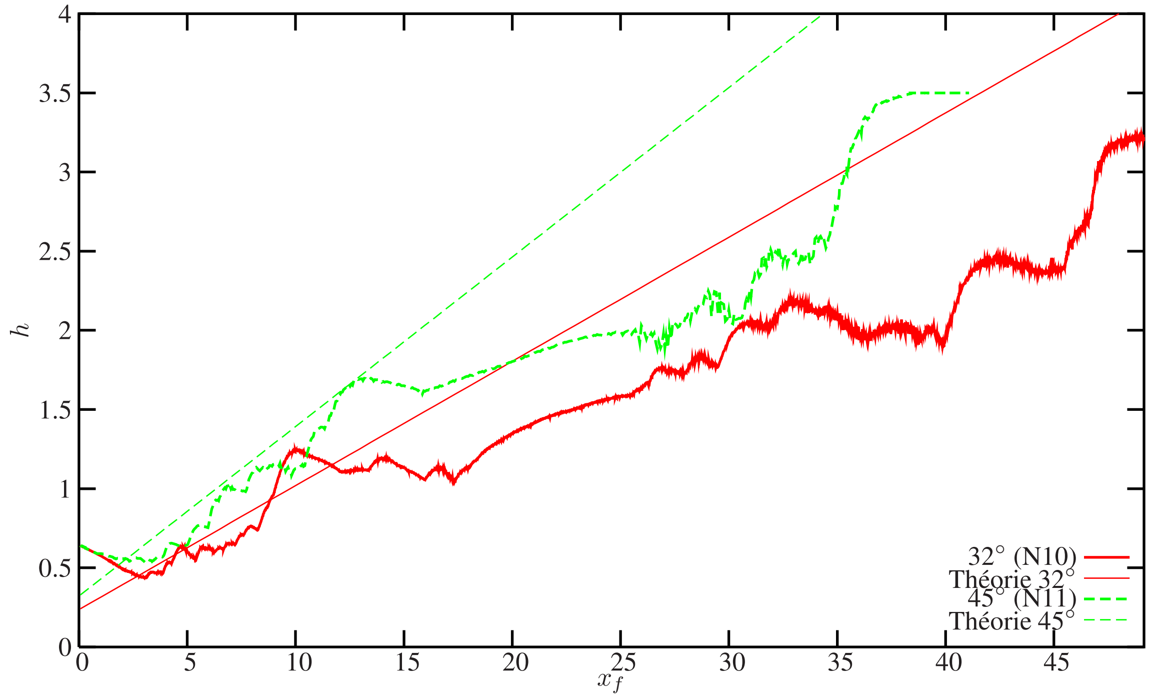


FIG. 50 – *Influence de la pente θ sur la hauteur maximale h de l'avalanche. Simulations numériques pour $\theta = 32°$ (N10) et $\theta = 45°$ (N11).*

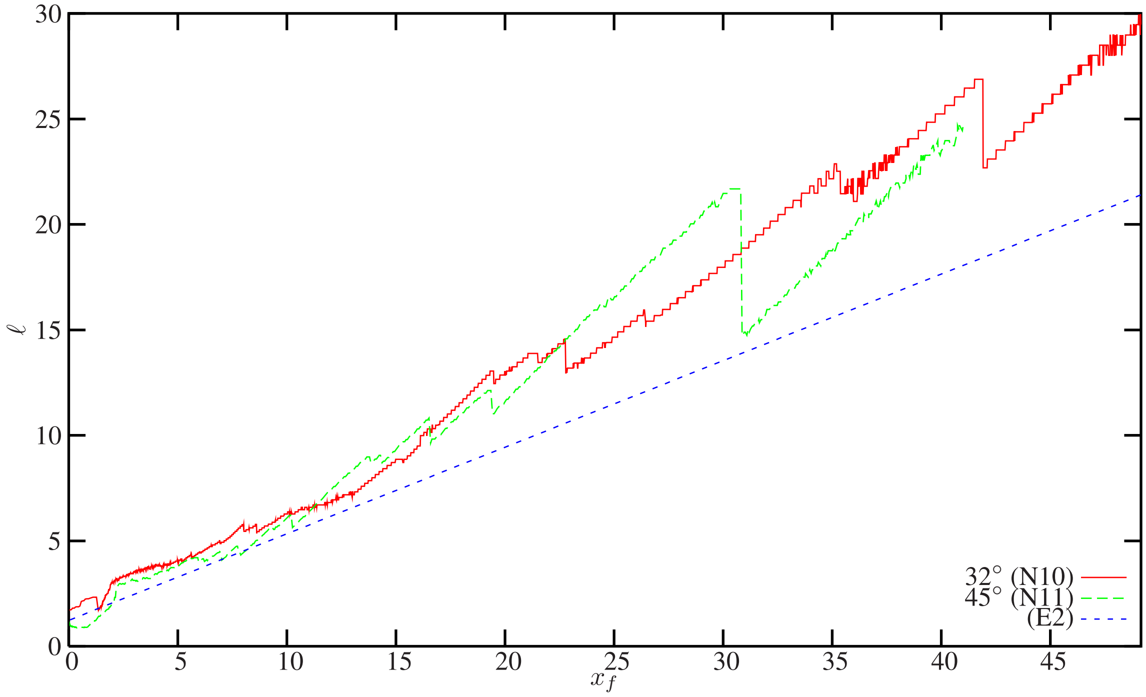
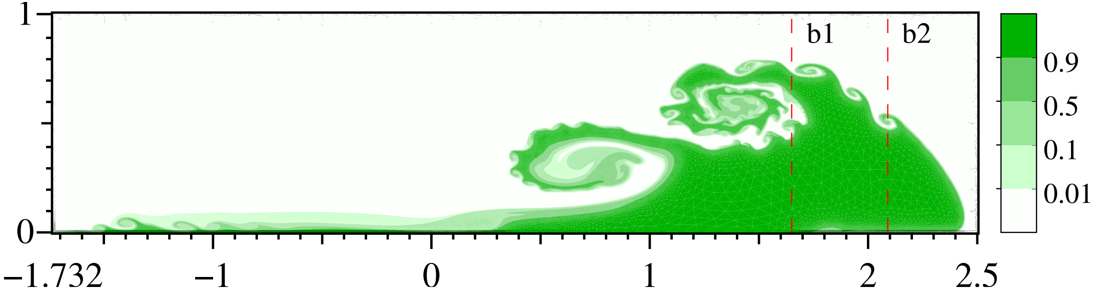


FIG. 51 – *Influence de la pente θ sur la longueur ℓ de la tête de l'avalanche. Simulations numériques pour $\theta = 32^\circ$ (N10) et $\theta = 45^\circ$ (N11).*

a. Carte des densités Φ



b. Profils de vitesse longitudinale u_x et densité Φ

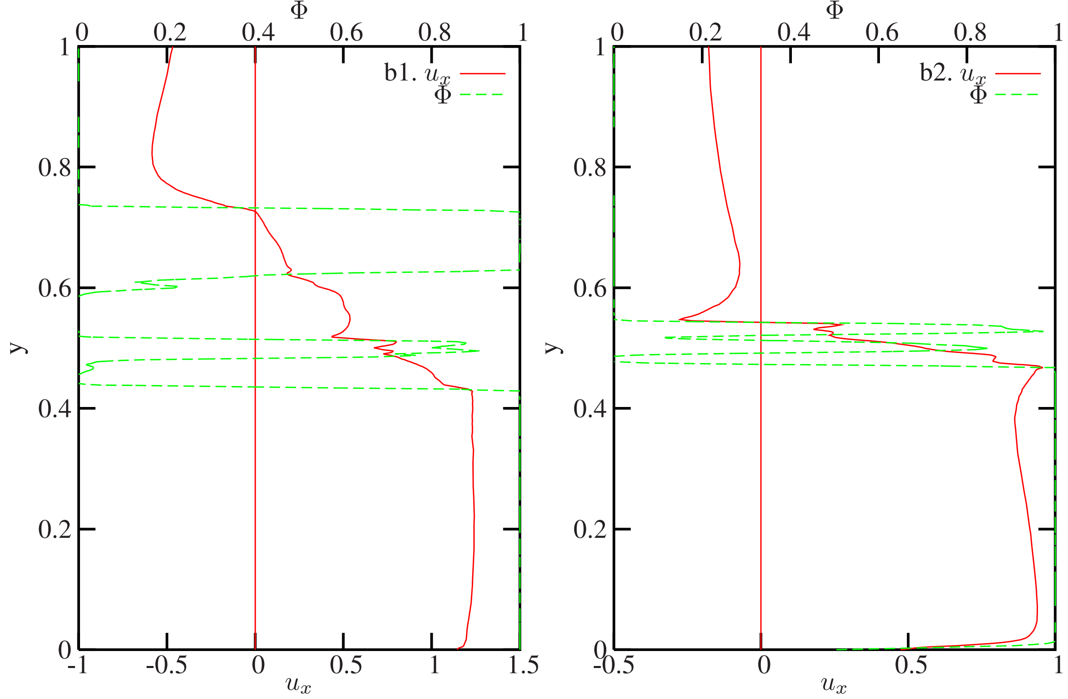
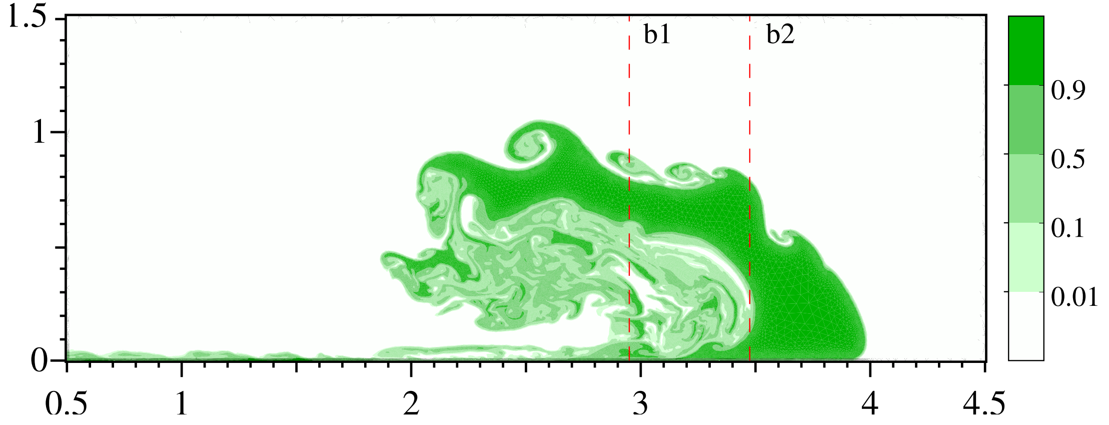


FIG. 52 – *Profils de densité dans la tête d'un nuage de faible densité (N5) lorsque sa vitesse* $U_{MC} \simeq 0.97$ *est maximale (*$x_f = x_f^+$*), on a alors* $U_f \simeq 0.82$*. Les profils sont tracés sur les lignes de coupe* $x_f^+ - h$ (b1) *et* $x_f^+ - h/2$ (b2)*. Les lignes de coupe sont indiquées sur la figure* a.

a. Carte des densités Φ



b. Profils de vitesse longitudinale u_x et densité Φ

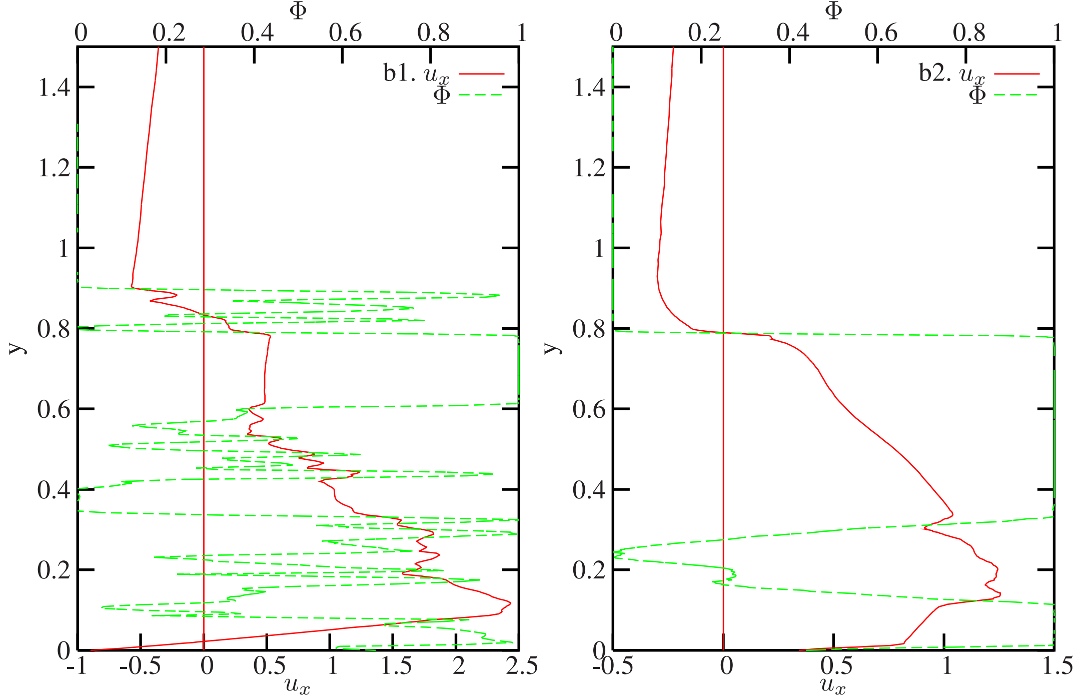
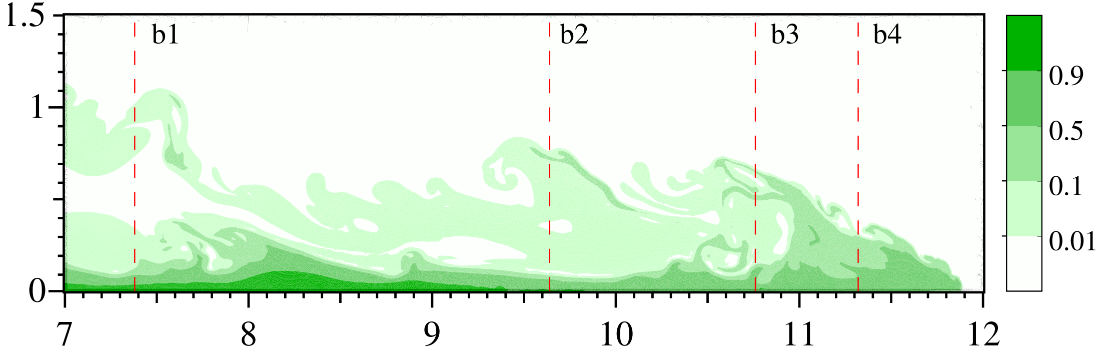


FIG. 53 – *Profils de densité dans la tête d'un nuage de faible densité (N5) lorsque sa vitesse* $U_f \simeq 0.90$ *est maximale* ($x_f = x_f^*$)*, on a alors* $U_{MC} \simeq 0.75$*. Les profils sont tracés sur les lignes de coupe* $x_f^* - h$ (b1) *et* $x_f^* - h/2$ (b2)*. Les lignes de coupe sont indiquées sur la figure* a.

a. Carte des densités Φ



b. Profils de vitesse longitudinale u_x et densité Φ

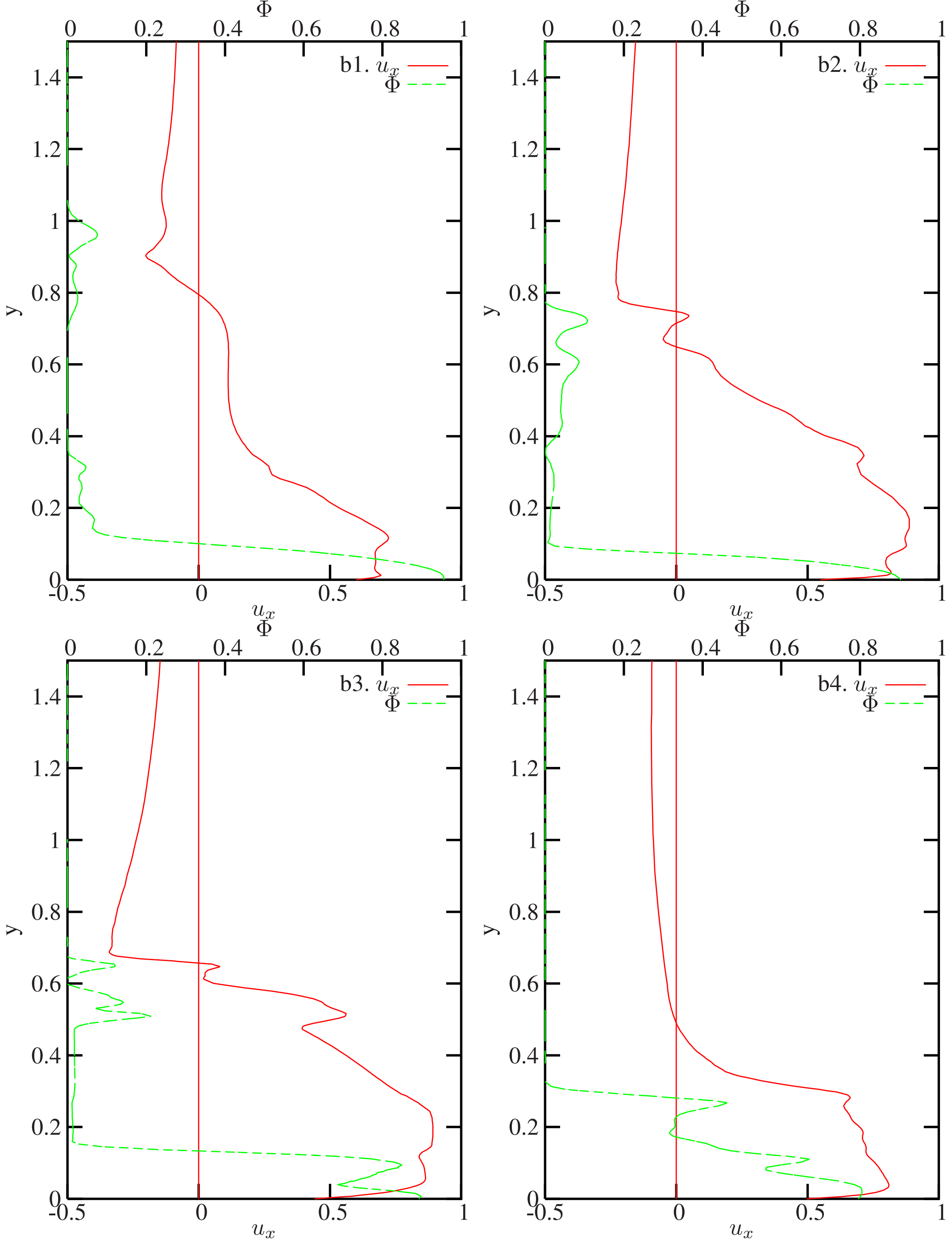
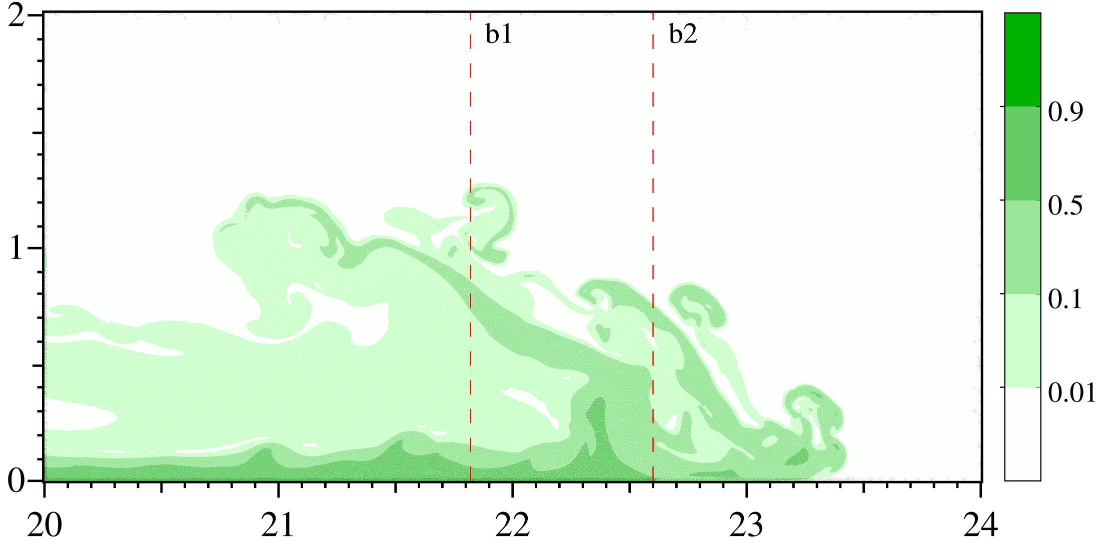


FIG. 54 – *Profils de densité dans la tête d'un nuage de forte densité (N10) lorsque le front atteint la position* $x_f = x_f^*/2$*. On a* $U_f \simeq 0.71$*,* $U_{MC} \simeq 0.59$*. Les profils sont tracés sur les lignes de coupe* $x_f - 4h$ (b1) *et* $x_f - 2h$ (b2)*,* $x_f - h$ (b3) *et* $x_f - h/2$ (b4)*.*

a. Carte des densités Φ



b. Profils de vitesse longitudinale u_x et densité Φ

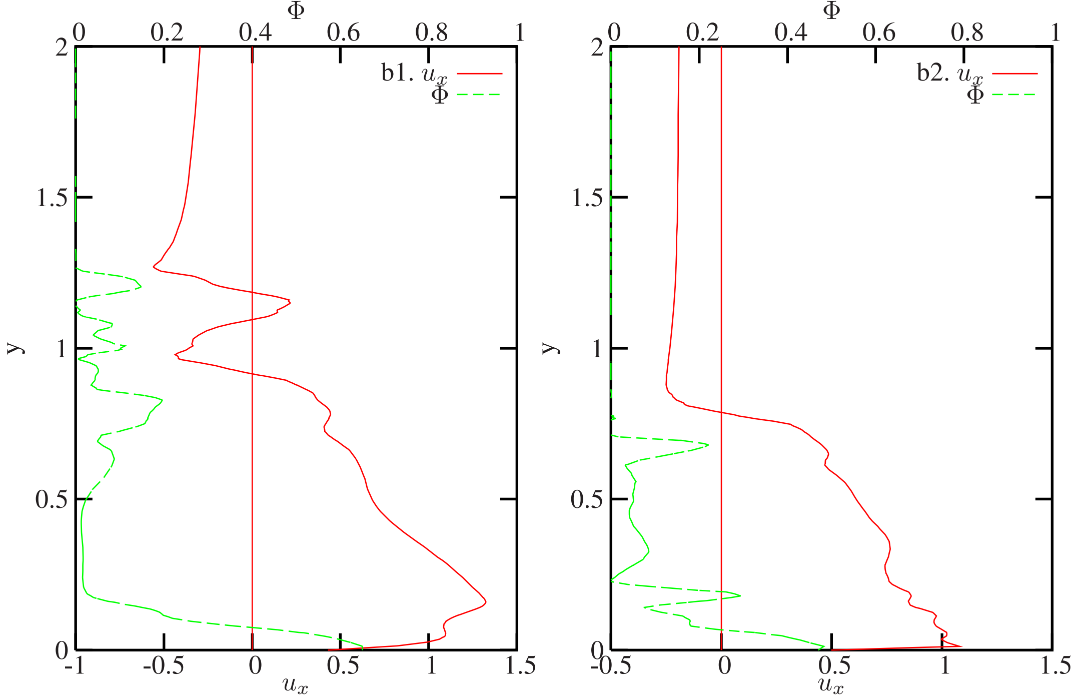


FIG. 55 – *Profils de densité dans la tête d'un nuage de forte densité (N10) lorsque sa vitesse* $U_f \simeq 0.82$ *est maximale* ($x_f = x_f^*$)*, on a alors* $U_{MC} \simeq 0.69$*. Les profils sont tracés sur les lignes de coupe* $x_f^* - h$ (b1) *et* $x_f^* - h/2$ (b2).

Perspectives

Nous avons proposé et testé un algorithme pour la simulation numérique d'écoulements de mélanges de fluides incompressibles, miscibles et ayant des densités très différentes (chapitre II), basé sur un modèle utilisant une moyenne massique des vitesses (paragraphe I.1). L'application de cet algorithme à des problèmes mécaniques d'intérêt environnemental et industriel, et pour lesquels des résultats expérimentaux sont disponibles, permet de valider notre approche. En outre, la robustesse de la méthode numérique nous a permis d'explorer des gammes de paramètres bien au-delà des valeurs accessibles expérimentalement, et de celles utilisées dans les simulations numériques antérieures. Cela nous a permis de progresser dans la compréhension des phénomènes qui gouvernent les écoulements d'échange et d'avalanches (chapitres V et VI).

Pour les écoulements d'échange (chapitre V), les simulations ont permis de mettre en évidence l'équilibre des forces entre la gravité et l'accélération du fluide en aval des fronts d'intrusion, qui conduit à l'établissement d'un régime où la vitesse est constante. Des simulations pour des valeurs très différentes du rapport de densité a permis d'introduire une loi de puissance qui donne cette vitesse pour le front dense en fonction du rapport de densité, et qui s'accorde avec les valeurs asymptotiques de cette vitesse.

Concernant les avalanches, le mécanisme crucial de l'entraînement d'air par les instabilités de la couche de mélange est bien reproduit, tant qualitativement que quantitativement. Aucune expérience avec de fortes différences de densité n'ayant jamais pu être menée du fait de la difficulté de leur mise en œuvre pratique, ces simulations numériques directes permettent pour la première fois d'étudier le phénomène avec des paramètres correspondant à ceux des avalanches. Les résultats donnés permettent de cerner l'influence de l'augmentation de la différence de densité, et mettent en évidence la complexité de l'écoulement. Une analyse quantitative de ces résultats reste à mener pour en exploiter toute la richesse.

Une autre perspective naturelle est maintenant d'améliorer la précision de l'algorithme, en particulier en ce qui concerne la conservation de la masse et le principe du maximum dans l'équation de convection-diffusion, comme on l'a vu pour les simulations d'avalanches pour des temps de simulation longs. Le théorème d'estimation d'erreur (paragraphe IV.1) nous garantit la convergence de ces conservations, avec une vitesse de convergence d'ordre 1, cependant ce théorème suppose une intégration numérique exacte des termes de second membre issus de la méthode des caractéristiques. Or nous ne connaissons pas de solution satisfaisante à ce problème pour laquelle on puisse donner une estimation d'erreur (paragraphe III.3), qui nous paraît être l'enjeu majeur pour la méthode de Lagrange–Galerkin.

Concernant notre algorithme, les simulations effectuées ont été limitées au cas d'une loi de diffusion linéaire (paragraphe I.1.2). Or cette loi n'est en réalité pas linéaire pour des mélanges de gaz, et les résultats mathématiques les plus récents ne sont pas non plus compatibles avec ce choix (paragraphe I.4). L'estimation d'erreur de notre algorithme a mis en lumière la raison de la plus grande difficulté des calculs avec notre discrétisation, lorsque cette loi devient non-linéaire. L'insertion d'une méthode de point fixe devrait nous permettre d'améliorer la convergence et de prendre en compte des diffusions non-linéaires.

De la même façon, le théorème d'estimation d'erreur (paragraphe IV.1) n'est pas valable si les pas de temps sont pris trop petits. À nouveau, cette condition peut être levée par une modification mineure de l'algorithme (paragraphe IV.4).

Au-delà de ces améliorations rendues possibles par l'étude de l'erreur, on peut envisager d'enrichir le modèle utilisé pour aborder d'autres types d'écoulements. En particulier, les écoulements de suspensions de particules diluées, mais ayant une plus grande inertie, pourraient être approchés dans un contexte similaire où des effets comme la sédimentation sont superposés à la loi de diffusion.

Le cas des avalanches nous fournit une autre perspective, qui consiste à simuler les interaction du nuage en écoulement avec le manteau neigeux, c'est-à-dire des particules déposées : un modèle de fluide à seuil pourrait permettre d'étudier les mécanismes d'érosion et de dépôt par sédimentation.

Annexe A

Diffusivité des gaz

Au chapitre I, on décompose les flux de masse à travers une interface fixe comme suit :

$$
\begin{aligned}
\varrho_d \boldsymbol{G}_d &= \varrho_d \Phi_d \tilde{\boldsymbol{u}} + \varrho_d \tilde{\boldsymbol{q}}_d \\
\varrho_\ell \boldsymbol{G}_\ell &= \varrho_\ell \Phi_\ell \tilde{\boldsymbol{u}} + \varrho_\ell \tilde{\boldsymbol{q}}_\ell
\end{aligned}
$$

Une condition de compatibilité, exprimée dans l'hypothèse H1 donne un flux de masse total $\varrho_d \boldsymbol{G}_d + \varrho_\ell \boldsymbol{G}_\ell = \varrho \boldsymbol{u}$ en annulant la somme $\varrho_d \tilde{\boldsymbol{q}}_d + \varrho_\ell \tilde{\boldsymbol{q}}_\ell$. Ces flux $\tilde{\boldsymbol{q}}_i$ sont la composante diffusive du flux de matière, et nous les avons supposés dirigés selon le gradient de la composition, en écrivant une loi de Fick avec une forme générale :

$$
\tilde{\boldsymbol{q}}_d = \mathscr{D} F(\Phi) \boldsymbol{\nabla} \Phi
$$

On veut ici relier la fonction F à la diffusion mesurée pour des gaz « au repos », c'est-à-dire dans une configuration stable d'un point de vue dynamique, et où la diffusion est la seule origine du mouvement.

Supposons une stratification de la densité $\varrho_0(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}) = 1 + \alpha \Phi_d(\tilde{y}, t = 0)$ stable ($\tilde{y} \mapsto \Phi_d(\tilde{y}, 0)$ décroissante, $\tilde{y}$ étant la variable de la direction verticale). Dans ces conditions, pour un mélange gazeux, Present [41] montre que les flux $\boldsymbol{G}_i$ s'écrivent $\boldsymbol{G}_d = D_{d\ell} \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi$ et $\boldsymbol{G}_\ell = D_{\ell d} \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \Phi$ respectivement, avec $D_{d\ell} = D_{\ell d}$.

En utilisant l'hypothèse de stratification pour simplifier les équations, l'équation de continuité donne $\partial_{\tilde{y}} \tilde{v} = \partial_{\tilde{y}} \left[(\mathscr{D}_{d\ell} - \mathscr{D}_{\ell d}) \partial_{\tilde{y}} \Phi_d \right]$ d'où $\tilde{v} = (\mathscr{D}_{d\ell} - \mathscr{D}_{\ell d}) \partial_{\tilde{y}} \Phi_d$ en utilisant que v s'annule en $y = a$ et b.

Les équations-bilans (5) des constituants donnent donc :

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi_d}{\partial \tilde{t}} = -\frac{\partial \Phi_\ell}{\partial \tilde{t}} &= -\partial_{\tilde{y}}(\Phi_d \tilde{v}) - \partial_{\tilde{y}}(\mathscr{D}_{d\ell} \partial_{\tilde{y}} \Phi_d) \\
&= -\partial_{\tilde{y}} \left([\Phi_\ell \mathscr{D}_{d\ell} + \Phi_d \mathscr{D}_{\ell d}] \partial_{\tilde{y}} \Phi_d \right)
\end{aligned}
$$

On a donc bien $D_{d\ell} = D_{\ell d} = \Phi_\ell \mathscr{D}_{d\ell} + \Phi_d \mathscr{D}_{\ell d}$, quelque soit notre choix des $\mathscr{D}_{ij}$ et de leur éventuelle dépendance de Φ_d.

On sait que les quantités D_{ij}, elles, ne dépendent pas de Φ_d, on peut donc écrire :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Phi_d}(\Phi_\ell \mathscr{D}_{d\ell} + \Phi_d \mathscr{D}_{\ell d}) = 0$$

La condition de compatibilité, exprimée dans l'hypothèse H1, donne $\varrho_d \mathscr{D}_{d\ell} = \varrho_\ell \mathscr{D}_{\ell d}$, dans ce cas on peut déduire la forme de ces coefficients grace à l'équation ci-dessus :

$$\frac{\mathrm{d} \ln \mathscr{D}_{d\ell}}{\mathrm{d}\Phi_d} = -\frac{\varrho_d - \varrho_\ell}{\varrho_\ell + (\varrho_d - \varrho_\ell)\Phi_d} = -\frac{\alpha}{1 + \alpha\Phi}$$

et donc $\varrho_i \mathscr{D}_{ij} \propto \dfrac{1}{\varrho}$. Ce résultat correspond au choix habituel de coefficient de diffusion pour des problèmes tels que le transport de polluants [1].

Annexe B

Implémentation de la méthode des caractéristiques à l'aide d'un arbre de recherche

Notations

Géométrie du domaine	
d	Dimension de l'espace
$\|\Omega\|$	Mesure de Ω
Maillage	
n_{cells}	Nombre de mailles
a_K	Plus petit côté de la boîte englobante de la maille K
A_K	Plus grand côté
Arbre de recherche	
n^x_{stump}	Taille de la « grille-souche » de l'arbre de recherche dans la direction x

1 Problématique

Soit Ω un domaine polygonal quelconque de $\mathbb{R}^d$, sur lequel on définit un maillage de simplexes. On ne fait a priori pas d'hypothèses sur ce maillage. On souhaite pouvoir répondre à deux types de requêtes :

- *Localisation simple :* Étant donné $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$, a-t-on $\boldsymbol{x} \in \Omega$ et si oui, donner une maille contenant $\boldsymbol{x}$.
- *Localisation selon un segment :* Étant donnés $\boldsymbol{x_0} \in \Omega$ et $\boldsymbol{x_1} \in \mathbb{R}^d$, trouver le point $\boldsymbol{x_i} \in \Omega$ le plus éloigné de $\boldsymbol{x_0}$ tel que $[\boldsymbol{x_0}\boldsymbol{x_i}[\in \Omega$, et donner une maille le contenant. (Si $\boldsymbol{x_1} \in \Omega$, c'est évidemment $\boldsymbol{x_1}$.)

On mesurera la complexité des algorithmes possibles en fonction de la taille du maillage.

2 Principe de la localisation par arbre de recherche

Sur un maillage structuré, le problème de la localisation peut être traité par d dichotomies, voire par d divisions si le maillage est régulier. On a donc un coût logarithmique dans le cas le pire. On souhaite se rapprocher de ce cas en introduisant une structure de données permettant une recherche par dichotomie.

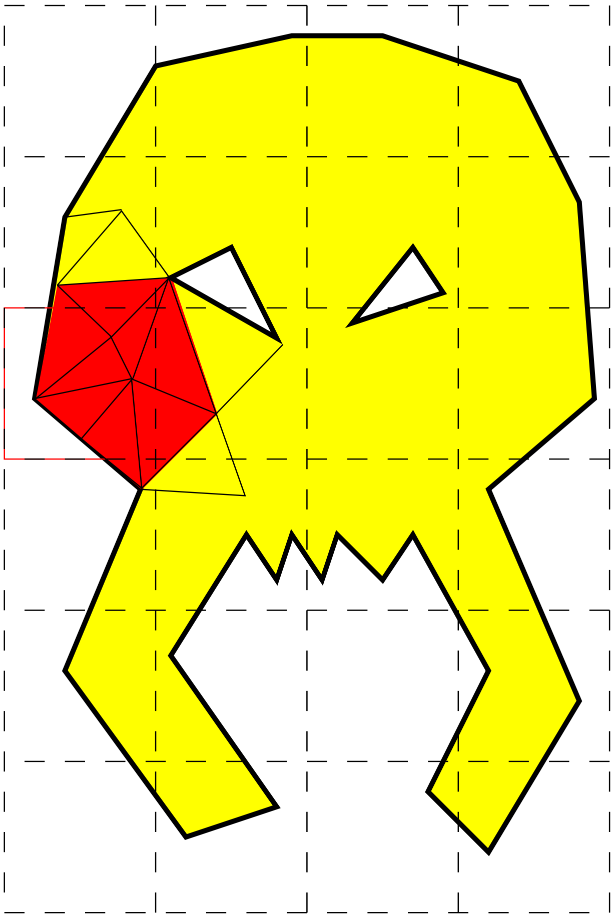


FIG. 56 – *Les mailles appartenant au pavé-feuille marqué en rouge*

Pour cela on fait une hypothèse sur la qualité du maillage : les mailles ne doivent pas être trop allongées, i.e. $\dfrac{A_K}{a_K} < C^{te}$.

On peut alors procéder en groupant les mailles par régions de Ω qu'elles occupent, ces régions étant définies de manière à pouvoir les chercher par dichotomie. Pour permettre d'avoir des régions de tailles différentes localement, le choix d'un arbre de subdivision de l'espace s'impose naturellement.

Un tel arbre divise la boîte englobante de Ω et a pour feuilles des pavés droits (produit cartésiens d'intervalles dans les directions canoniques) dont les frontières ne correspondent pas à celles de mailles : une maille appartient donc à *tous* les pavés avec lesquels son intersection est non nulle, voir figure 56. (Ce qui appelle l'hypothèse ci-dessus pour garder un nombre constant de mailles par pavé-feuille).

3 Algorithme de localisation par arbre de recherche

3.1 Localisation simple

On note `BB` un pavé correspondant à une branche de l'arbre. On utilise un algorithme de descente dans l'arbre pour trouver la feuille dont le pavé `BB`* contient $\boldsymbol{x}$, puis on parcourt les mailles qu'il contient jusqu'à trouver une maille contenant $\boldsymbol{x}$.

Algorithme (75)

Localisation simple

```
— BB est la boîte englobante de $\Omega$.
— Si $\boldsymbol{x} \in$ BB :
    — Tant que BB n'est pas une feuille :
        — BB devient l'enfant de BB auquel appartient $\boldsymbol{x}$.
    — Parcourir les mailles M de BB jusqu'à avoir $\boldsymbol{x} \in$ M.
    — Renvoyer M si on a trouvé, sinon $\boldsymbol{x}$ n'est pas dans $\Omega$.
— Sinon $\boldsymbol{x}$ n'est pas dans $\Omega$.
```

Pour accélérer les tests dans le parcours des mailles, on pourra avoir recours à un filtre basé sur un premier test d'appartenance à la boîte englobante de la maille.

3.2 Localisation selon un segment

On veut trouver le paramètre t le plus grand possible dans $[0; 1]$ tel que pour $\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{x_0} + t\boldsymbol{x_0 x_1}$, on ait $[\boldsymbol{x_0 x_i}[\in \Omega$ (sous réserve que $\boldsymbol{x_0}$ soit donné dans Ω).

Commençons par la recherche d'intersection avec la frontière de Ω.

Algorithme (76)

Intersection avec la frontière

```
— BB est la boîte englobante de $\Omega$.
— Si $[\boldsymbol{x_0 x_1}] \cap$ BB $\neq \phi$:
    — On a $\boldsymbol{x_i} \in [\boldsymbol{x_0 x_1}] \cap$ BB minimisant $t$ (voir Algo. 77).
    — Tant que l'on n'a pas trouvé :
        — Tant que BB n'est pas une feuille :
            — BB devient l'enfant de BB auquel appartient $\boldsymbol{x_i}$.
        — Parcourir les mailles de $\partial\Omega$ contenues dans la feuille :
            — S'il y a des intersections garder celle minimisant $t > 0$ : on a trouvé !
            — Si $t = 0$ correspond à une intersection, $\boldsymbol{x_0} \in \partial\Omega$.
        — Sinon, identifier le côté d'entrée de $\boldsymbol{x_0 x_1}$
```

```
            (plan le plus proche selon $-\boldsymbol{x_0x_1}$)
            et BB devient le voisin correspondant (voir Algo. 77) s'il y
            y en a un de ce côté.
— Sinon il n'y a pas d'intersection : $\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{x_1}$.
```

Il faut maintenant une petite discussion sur le résultat de cet algorithme pour savoir si le point $\boldsymbol{x_i}$ trouvé est bien le point recherché. Si $\boldsymbol{x_0}$ est un point de Ω, il n'y a pas de problème. Si $\boldsymbol{x_0}$ est un point de int$(\mathbb{R}^d \backslash \Omega)$, alors $[\boldsymbol{x_0 x_i}[\in$ int$(\mathbb{R}^d \backslash \Omega)$.

Par contre, lorsque $\boldsymbol{x_0} \in \partial\Omega$, $]\boldsymbol{x_0 x_i}[$ peut aussi bien appartenir à Ω qu'à int$(\mathbb{R}^d \backslash \Omega)$. On teste donc si le milieu du segment $\dfrac{\boldsymbol{x_0} + \boldsymbol{x_i}}{2}$ appartient ou non à Ω.

3.3 Incidence d'un segment sur un pavé

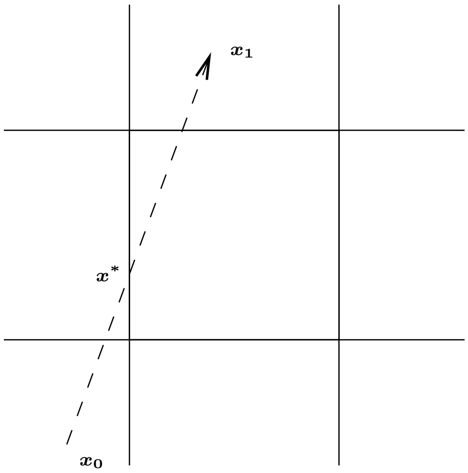


FIG. 57 – *Incidence d'un segment sur un pavé*

On note $x^i_{\texttt{GAUCHE}}$ et $x^i_{\texttt{DROITE}}$ les coordonnées extrêmes d'un élément dans la direction $i \in \{1;2;3\}$, et on cherche à déterminer quel est le point d'incidence $\boldsymbol{x_0} + t\boldsymbol{x_0x_1}$ du segment orienté $[\boldsymbol{x_0x_1}]$ sur le pavé.

Algorithme (77)

```
    Incidence d'un segment sur un pavé
— Pour $i = 0$ à $d - 1$ :
    — Position[i] = ($x^i_0 < x^i_{\texttt{GAUCHE}}$) ? GAUCHE : ($x^i_0 > x^i_{\texttt{DROITE}}$) ? DROITE : MILIEU
— Si tous sont au MILIEU, renvoyer $\boldsymbol{x_0}, t = 0$.
— Pour $i = 0$ à $d - 1$ :
    — Si Position[i]!=MILIEU
        — Incidence potentielle pour $t_i = \dfrac{x^i_{\texttt{Position[i]}} - x^i_0}{x^i_1 - x^i_0}$
— Trouver $i$ tel que $t_i$ soit maximal
— Si le point correspondant est bien sur la face, c'est le point d'incidence
```

— Sinon il n'y en a pas.

4 Arbre de type « noisetier » et coût

4.1 Choix de la forme de l'arbre

On souhaite éviter des arbres trop profonds lorsque le pas de maillage est uniforme. En effet dans ce cas, il est plus efficace d'avoir une simple grille régulière pour mener la recherche : l'accès aux feuilles d'un tel « arbre » de recherche est en coût constant (d divisions), suivi du test des mailles de la feuille, qui sont en nombre constant par hypothèse d'uniformité du maillage.

Les maillages raffinés peuvent généralement être vus comme des maillages grossiers uniformes avec des raffinements locaux. Il est donc avantageux d'utiliser la méthode de la grille régulière sur le maillage entier, et de descendre en profondeur avec notre arbre de recherche là où le maillage est plus fin.

On choisit donc un arbre dont le premier embranchement possède un grand nombre d'enfants (grille régulière $n^x_{stump} \times n^y_{stump} \times n^z_{stump}$), ceux-ci étant ensuite de simples « quadtree » (4 enfants) ou « octree » (8 enfants) selon la dimension. Cela donne à notre arbre une forme de noisetier, avec beaucoup de branches partant au niveau de la souche.

4.2 Coût en place et en temps selon le maillage

On suppose qu'on impose un nombre maximal n_{leaf} de mailles entièrement[1] incluses dans un pavé-feuille donné de l'arbre.

Cas d'un maillage de pas uniforme

Pour un bon choix de $n^x_{stump} \times n^y_{stump} \times n^z_{stump}$, l'arbre est de profondeur 1, le coût en place est majoré par $(1+\frac{2^d}{\sqrt[d]{n_{leaf}}})n_{cells}$, en estimant grossièrement la probabilité qu'une cellule appartienne à plusieurs pavés-feuilles.

Le temps d'accès à une feuille est constant (d divisions), et le coût de parcours de la liste des éléments dans le pavé-feuille est de l'ordre de $n_{leaf}(1+\frac{2^d}{\sqrt[d]{n_{leaf}}})$, avec un coefficient qui dépend de la qualité du maillage (allongement des mailles).

Cas d'un maillage raffiné localement

Supposons que l'on raffine le maillage précédent autour d'un point, par un facteur f_r, c'est-à-dire que la plus petite maille est f_r fois plus petite en volume que les mailles grossières du maillage initial.

---

[1] En effet, on a un contrôle sur la somme de ces nombres de mailles, qui est inférieur au nombre total de mailles, alors qu'on n'a pas de contrôle direct du nombre de mailles d'intersection non vide avec le pavé.

On suppose que le raffinement affecte une zone autour du point choisi représentant une proportion s_r de la mesure du domaine, c'est-à-dire qu'on définit autour du point de raffinement une zone de surface $s_r|\Omega|$ où le maillage est plutôt fin, par opposition au reste du domaine où le maillage est plutôt grossier. La limite entre « fin » et « grossier » est choisie de telle sorte que :

$$n_{cells} = n_{cells}^{coarse}(1 + s_r f_r)$$

où n_{cells}^{coarse} est le nombre de mailles avant raffinement.

Pour le même choix des n_{stump} que précédemment, on a maintenant des subdivisions dans l'arbre avec un nombre de nœuds de l'ordre de

$$n_{stump}^{x} n_{stump}^{y} n_{stump}^{z} s_r \log_2 f_r$$

(nombre de pavés de la souche que l'on raffine fois la profondeur.) On peut donc estimer le coût en place de l'arbre du maillage raffiné en un point par :

$$n_{stump}^{x} n_{stump}^{y} n_{stump}^{z} (1 + s_r \log_2 f_r)$$

Si les points à localiser sont distribués sur Ω avec une loi de probabilité uniforme, le coût en temps pour accéder au pavé-feuille contenant le point reste constant avec une probabilité $(1 - s_r)$, dans les autres cas il faut utiliser l'algorithme de descente dans l'arbre, avec un coût maximal en $\log_2 f_r$, soit au total un coût d'accès à la feuille de $s_r \log_2 f_r + 1$, qui ne dépend que du raffinement, et pas du nombre de mailles.

4.3 Construction de l'arbre

L'arbre est naturellement construit par une récursion, on partage entre les enfants d'un nœud la liste de ses mailles.

Le seul problème est la condition d'arrêt de subdivision. On peut utiliser un nombre maximal de mailles *entièrement* incluses dans une feuille, ce qui ne garantit le nombre total de mailles coupant une feuille que sous réserve d'hypothèses de qualité du maillage.

Coût : $\left(n_{cells} + n_{stump}^{x} n_{stump}^{y} n_{stump}^{z} s_r \log_2 f_r \times s_r n_{cells} f_r\right) \left(1 + \frac{2^d}{\sqrt[d]{n_{leaf}}}\right)$

4.4 Relations de voisinage dans l'arbre

On définit pour chaque nœud du maillage $2d$ voisins, qui sont d'autres nœuds de profondeur inférieure ou égale (voir figure 58).

Pour éviter des parcours d'arbre en $\log r_f$, on peut stocker les voisins dans chaque nœud de l'arbre, au moyen d'un parcours unique dans la largeur de l'arbre. Le tableau `squirrel_leap[d]` indique dans chaque dimension de l'espace la direction (positive pour la valeur 1, négative pour

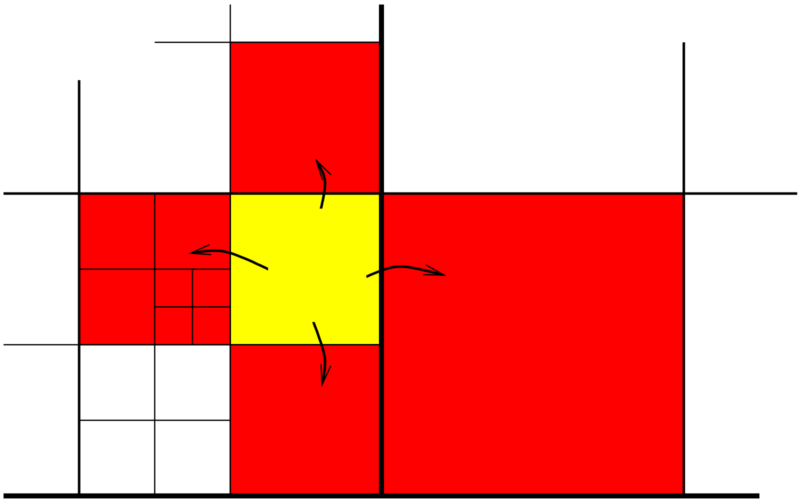


FIG. 58 – *Nœuds voisins*

0) où une remontée dans l'arbre est nécessaire pour atteindre le voisin (représentées par les traits forts dans la figure).

Algorithme (77)

Recherche des voisins

```
— Pour toutes les branches du premier niveau, si elles ont des enfants :
    — Mettre à jour leur tableau squirrel_leap
    — Mettre à jour leur tableau neighbour pour les directions sans remontée
    — Les ajouter à list
— Tant que list n'est pas vide :
    — Dépiler le premier élément de list :
        — S'il a des enfants :
            — Les ajouter à la fin de list
            — Mettre à jour leur squirrel_leap et neighbour
        — Pour $i = 0$ à $d - 1$ :
            — neighbour[2i+squirrel_leap[i]]:=
            daddy.neighbour[2i+squirrel_leap[i]]
            — Si neighbour[2i+squirrel_leap[i]] a des enfants :
                — neighbour[2i+squirrel_leap[i]] devient l'enfant approprié.
```

Remarque 10 (Arbre du maillage de Ω et de $\partial\Omega$) *On a la possibilité de n'utiliser qu'une seule structure d'arborescence pour accéder au maillage de Ω et de $\partial\Omega$.*

Bibliographie

[1] S. N. Antonsev, A. V. Kazhikhov, and V. N. Monakov. *Boundary value problems in mechanics of nonhomogeneous fluids*. North-Holland, Amsterdam, 1990.

[2] P. Beghin, E. J. Hopfinger, and R. E. Britter. Gravitational convection from instantaneous sources on inclined boundaries. *J. Fluid Mech.*, 107:407–422, 1981.

[3] H. Beirão da Veiga, R. Serapioni, and A. Valli. On the motion of non-homogeneous fluids in the presence of diffusion. *J. Math. Anal. Appl.*, 85:179–191, 1982.

[4] T. B. Benjamin. Gravity currents and related phenomena. *J. Fluid Mech.*, 31(2), 1968.

[5] M. Bercovier and O. Pironneau. Error estimates for finite elements method solution of the Stokes problem in the primitive variables. *Numer. Math.*, 33:211–224, 1979.

[6] M. Bercovier and O. Pironneau. Characteristics and the finite elements method. In Tadahiko Kawai, editor, *Finite element flow analysis, proceedings of the 4th Int. Symp. on Finite Elements Methods in Flow Problems, Tokyo*, pages 67–73. North-Holland, 26–29 July 1982.

[7] N. Besse. *Étude mathématique et numérique de l'équation de Vlasov non linéaire sur des maillages non structurés de l'espace des phases*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2003.

[8] V. K. Birman, J. E. Martin, and E. Meiburg. The non-Boussinesq lock-exchange problem. *submitted to J. Fluid Mech.*, 2004.

[9] H. Borouchaki, P. L. George, F. Hecht, P. Laug, and E. Saltel. Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part I: Algorithms. *Finite Elem. Anal. Des.*, 25:61–83, 1997.

[10] F. Boyer. *Écoulements diphasiques de type Cahn-Hilliard*. PhD thesis, Université Bordeaux I, 2001.

[11] S. C. Brenner and L. R. Scott. *The mathematical theory of Finite Elements methods*. TAM. Springer, 1991.

[12] D. Bresch, E. H. Essoufi, and M. Sy. De nouveaux systèmes de type Kazhikhov–Smagulov : modèles de propagation de polluants et de combustion à faible nombre de Mach. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 335:973–978, 2002.

[13] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and hybrid finite elements methods*. Springer-Verlag, New-York, 1991.

[14] J. Camacho and H. Brenner. On convection induced by molecular diffusion. *Ind. Eng. Chem. Res.*, pages 3326–3335, 1995.

[15] A. J. Chorin and J. E. Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer, New-York, 1993.

[16] P. G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Classics in Applied Mathematics. SIAM, Philadelphia, 2002.

[17] F. Dufour, U. Gruber, and W. Ammann. Avalanches : études réalisées dans la Vallée de la Sionne en 1999. *Les Alpes*, 2:9–15, 2001.

[18] F. Dufour, U. Gruber, P. Bartelt, and W. Ammann. Overview of the 1999 measurements at the slf test site, vallée de la sionne. In *ISSW Conference Proceedings, A Merging of Theory and Practice*, pages 527–534, 2000.

[19] P. Embid. Well-posedness of the nonlinear equations for zero mach number combustion. *Comm. Partial Diff. Eqs.*, 12:1227–1283, 1987.

[20] J. Étienne, P. Saramito, and E. J. Hopfinger. Numerical simulation of dense clouds on steep slopes: application to the powder-snow avalanches. *Annals Glaciol.*, 38, 2004 (in press).

[21] P.A. Farrell, A.F. Hegarty, J.J.H. Miller, E. O'Riordan, and G.I. Shishkin. *Robust Computational Techniques for Boundary Layers*. Chapman and Hall / CRC Press, Boca Raton, USA, 2000.

[22] M. Fortin and R. Glowinski. *Augmented Lagrangian methods, applications to the numerical solution of boundary value problems*. Elsevier Science, Amsterdam, 1983.

[23] V. Girault and P.A. Raviart. *Finite element approximation of the Navier-Stokes equations*, volume 749 of *Lecture notes in mathematics*. Springer Verlag, 1979.

[24] H. P. Gröbelbauer, T. K. Fanneløp, and R. E. Britter. The propagation of intrusion fronts of high density ratios. *J. Fluid Mech.*, 250:669–687, 1993.

[25] C. J. J. Härtel, E. Meiburg, and F. Necker. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. part 1. flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries. *J. Fluid Mech.*, 418:189–212, 2000.

[26] F. Hecht. `bamg`: Bidimensional anisotropic mesh generator. Technical report, INRIA, Rocquencourt, France, 1997. `http://www-rocq1.inria.fr/gamma/cdrom/www/bamg`.

[27] F. Hermann, J. Hermann, and K. Hutter. Laboratory experiments on the dynamics of powder-snow avalanches. In B. Salm and H. Grubler, editors, *Avalanches Formation, Movement and Effects (Proc. of the Davos Symposium, September 1986)*, number 162, pages 431–440, Wallingford, 1987. IAHS Publ.

[28] P. Hood and C. Taylor. A numerical solution of the Navier-Stokes equations using the finite element technique. *Comput. & Fluids*, 1(1):73–100, 1973.

[29] E. J. Hopfinger. Snow avalanche motion and related phenomena. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15:47–76, 1983.

[30] B. Hunt. Newtonian fluid mechanics treatment of debris flows and avalanches. *Journal of Hydraulic Engineering, ASCE*, 120(12):1350–1363, 1994.

[31] D. D. Joseph and Y. Y. Renardy. *Fundamentals of two-fluid dynamics. Part II: Lubricated Transport, Drops and Miscible Liquids*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer Verlag, New-York, etc, 1993.

[32] A. Kazhikhov and Sh. Smagulov. The correctness of boundary value problems in a diffusion problem of an homogeneous fluid. *Sov. Phys. Dokl.*, 22:249–252, 1977.

[33] J. J. Keller and Y. P. Chyou. On the hydraulic lock-exchange problem. *Z. Angew. Math. Phys.*, 42:874–910, 1991.

[34] P. Lesaint and P. A. Raviart. On a finite element method for solving the neutron transport equation. In C. de Boor, editor, *Mathematical aspects of finite elements in PDE*, pages 89–123. Academic Press, 1974.

[35] P.-L. Lions. *Mathematical topics in fluid mechanics. Volume 1: Incompressible models*. Lecture series in Mathematics and its applications. Oxford Science, 1996.

[36] P.-L. Lions. *Mathematical topics in fluid mechanics. Volume 2: Compressible models*. Lecture series in Mathematics and its applications. Oxford Science, 1998.

[37] A. Majda. *Compressible fluid flow and systems of conservation laws in several space dimensions*, volume 53. Springer-Verlag, 1984.

[38] F. Necker, C. Härtel, L. Kleiser, and E. Meiburg. High-resolution simulations of particle-driven gravity currents. *Int. J. Multiphase Flow*, 28(2):279–300, 2002.

[39] O. Pironneau. *Méthodes des éléments finis pour les fluides*. RMA. Masson, Paris, 1988.

[40] O. Pironneau. *Finite Elements Methods for Fluids*. John Wiley & Sons, Chichester, 1989.

[41] R. D. Present. *Kinetic theory of gases*. McGraw-Hill, New-York, 1958.

[42] A. Priestley. Exact projections and the Lagrange-Galerkin method: A realistic alternative to quadrature. *J. Comput. Phys.*, 112:316–333, 1993.

[43] K. R. Rajagopal and L. Tao. *Mechanics of Mixtures*, volume 35 of *Series on advances in mathematics for applied sciences*. World scientific publishing Co., Inc., River Edge, NJ, USA, 1995.

[44] M. Rastello. *Étude de la dynamique des avalanches de neige en aérosol*. PhD thesis, Université J. Fourier, Grenoble, 2002.

[45] M. Rastello and E. J. Hopfinger. Sediment-entraining suspension clouds: a model of powder-snow avalanches. *J. Fluid Mech.*, 509:181–206, 2004.

[46] A. Ritter. Die Fortpflanzung der Wasserwellen. *Z. Verein. Deutsch. Ing.*, 1892.

[47] N. Roquet and P. Saramito. An adaptive finite element method for Bingham fluid flows around a cylinder. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192:3317–3341, 2003.

[48] H. Rui and M. Tabata. A second order characteristic finite element scheme for convection-diffusion problems. *Numer. Math.*, 2001.

[49] P. Saramito and N. Roquet. An adaptive finite elements method for viscoplastic fluid flows in pipes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:5391–5412, 2000.

[50] P. Saramito, N. Roquet, and J. Étienne. `rheolef` user's manual. Technical report, LMC-IMAG, Grenoble, France, 2003. `http://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef`.

[51] T. Scheiwiller, K. Hutter, and F. Hermann. Dynamics of powder snow avalanches. *Annales Geophysicae*, 5B(6):569–588, 1987.

[52] H. Schlichting and K. Gersten. *Boundary layer theory*. Springer, Berlin, 2000.

[53] J.E. Simpson. *Gravity currents in the Environment and the Laboratory*. Cambridge University Press, 1997. 2nd ed.

[54] J. J. Stoker. *Water waves*. Interscience publishers, New-York, 1957.

[55] E. Süli. Convergence and nonlinear stability of the Lagrange-Galerkin method for the Navier-Stokes equation. *Numer. Math.*, 53:459–483, 1988.

[56] R. Verfürth. Error estimates for a mixed finite element approximation of the Stokes equation. *RAIRO Num. An.*, 18(2):175–182, 1984.

[57] C. Wieners. Taylor-Hood elements in 3D. `http://www.am.uni-erlangen.de/~wieners`.

[58] T. Williams and C. Kelley. `gnuplot`, 2002. `http://www.gnuplot.info`.

[59] P. K. Yeung, Michelle C. Sykes, and Prakash Vedula. Direct numerical simulation of differential diffusion with schmidt numbers up to 4.0. *Phys. Fluids*, 12(6):1601–1604, 2000.

[60] P. K. Yeung, Shuyi Xu, and K. R. Sreenivasan. Schmidt number effects on turbulent transport with uniform mean scalar gradient. *Phys. Fluids*, 14(12):4178–4191, 2002.

[61] C.-S. Yih. *Dynamics of Nonhomogeneous Fluids*. Macmillan, New-York, 1965.