HAL open science

Modélisation et calcul des interfaces bi-fluides

Pierre Saramito

To cite this version:

Pierre Saramito. Modélisation et calcul des interfaces bi-fluides. DEA. Grenoble, France, 2001, pp.66. cel-00573977

HAL Id: cel-00573977

https://cel.hal.science/cel-00573977v1

Submitted on 6 Mar 2011

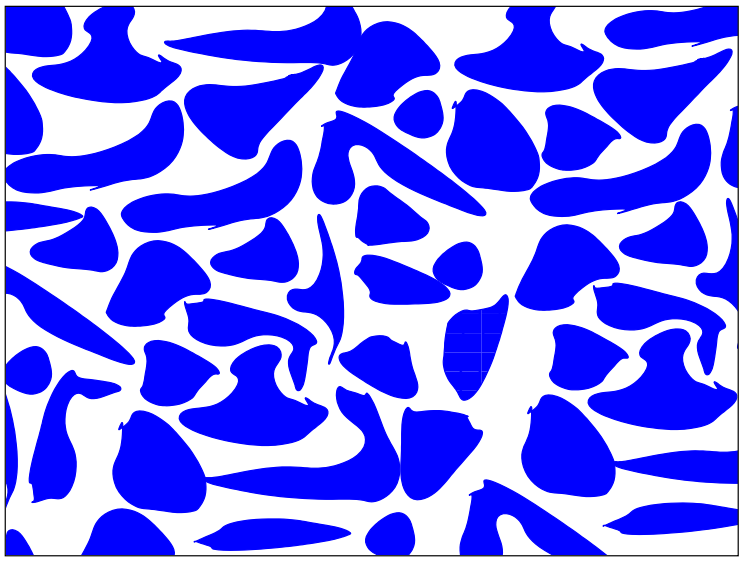
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation et calcul des interfaces bi-fluides

Pierre.Saramito@imag.fr

19 décembre 2001



Copyright (c) 2001 Pierre Saramito

Copyleft : cette œuvre est libre, vous pouvez la redistribuer et/ou la modifier selon les termes de la Licence Art Libre. Vous trouverez un exemplaire de cette Licence sur le site d'Art Libre `http://www.artlibre.org` ainsi que sur d'autres sites.

1 Introduction aux équations de Navier-Stokes

1.1 Conservation de la masse

Introduisons les notations suivantes :

$\rho(\mathbf{x}, t)$	la **densité** au point $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ et à l'instant t.
$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u_i(\mathbf{x}, t))_{1 \leq i \leq 3}$	la **vitesse** au point $\mathbf{x}$ et à l'instant t.

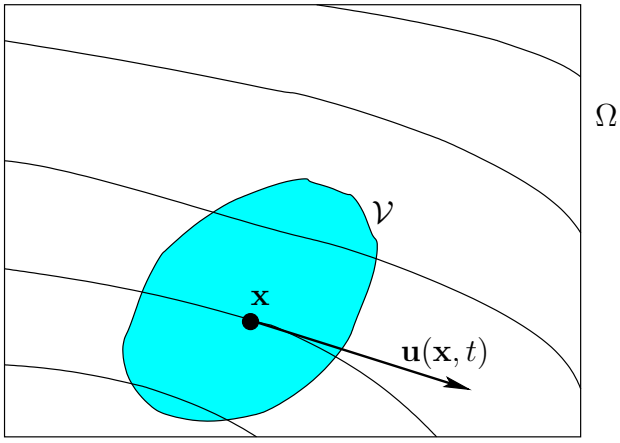


FIG. 1 – Écoulement dans un domaine Ω.

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ le domaine ouvert borné occupé par le fluide et $\mathcal{V} \subset \Omega$ un sous-domaine ouvert régulier quelconque, comme représenté sur la figure 1. La conservation de la masse dans le volume $\mathcal{V}$ exprime que la variation de la masse totale de fluide contenu dans $\mathcal{V}$ à l'instant t est égale au flux de masse entrant à travers $\partial\mathcal{V}$:

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{x}, t)\, dx\right) = -\int_{\partial\mathcal{V}} \rho(\mathbf{x}, t)\, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t).\mathbf{n}(\mathbf{x})\, ds$$

où $\mathbf{n}$ est la normale unitaire sortante à $\mathcal{V}$ sur $\partial\mathcal{V}$. Rappelons la formule de Stokes :

$$\int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{v}.\mathbf{n}\, ds = \int_{\mathcal{V}} \operatorname{div} \mathbf{v}\, dx, \ \forall \mathbf{v} \in (H^1(\mathcal{V}))^3$$

et appliquons cette formule au membre de droite de l'équation de conservation de la masse, avec $\mathbf{v} = \rho(., t)\mathbf{u}(., t)$. Après permutation de la dérivation en temps et de la somme sur $\mathcal{V}$ dans le membre de gauche, il vient :

$$\int_{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})\right) dx = 0$$

Cette relation étant vraie pour tout voisinage $\mathcal{V}$ d'un point quelconque $\mathbf{x}$ de l'ouvert Ω, et à tout instant t d'un intervalle de temps $]0,T[$, nous obtenons une expression locale de la conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega \times]0,T[\tag{1}$$

1.2 Conservation de la quantité de mouvement

Cette relation s'énonce de façon générale :

$$\text{masse} \times \text{accélération} = \text{forces exercées}$$

ceci dans tout volume $\mathcal{V} \subset \Omega$ de fluide. Considérons une particule en $\mathbf{x}$ à l'instant t : cette particule sera en $\mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x},t)\delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$ à l'instant $t + \delta t$. Ainsi, son accélération est donnée par :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(\mathbf{x},t) &= \lim_{\delta t \to 0} \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x},t)\delta t + \mathcal{O}(\delta t^2), t + \delta t) - \mathbf{u}(\mathbf{x},t)}{\delta t} \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla \mathbf{u} \right)(\mathbf{x},t) \end{aligned}$$

où $\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}$ est la notation d'un vecteur de composantes

$$(\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u})_i = \sum_{j=1}^{3} u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad 1 \leq i \leq 3$$

Les forces exercées sur le volume $\mathcal{V}$ sont de deux sorte :
i) Les forces externes, dûes à la gravité :

$$\int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{x},t)\, \mathbf{g}\, dx$$

où $\mathbf{g}$ est le vecteur **gravité**, supposé constant. Nous négligerons ici les autres forces, telles que la force de Coriolis ou les forces dûes aux effets magnétiques.

ii) Les forces internes, dûes aux déformations du fluide :

$$\int_{\partial\mathcal{V}} \sigma_{\mathrm{tot}}(\mathbf{x},t)\, \mathbf{n}(\mathbf{x})\, dx$$

où $\sigma_{\mathrm{tot}}(\mathbf{x},t)$ est le tenseur symétrique des **contraintes totales**.

La notation $\sigma_{\mathrm{tot}}\, \mathbf{n}$ représente un champs de vecteur issu du produit tenseur-vecteur, de composantes :

$$(\sigma_{\mathrm{tot}}\, \mathbf{n})_i = \sum_{j=1}^{3} \sigma_{ij}\, n_j, \quad 1 \leq i \leq 3$$

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit donc :

$$\int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{x},t)\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)(\mathbf{x},t),dx=\int_{\mathcal{V}}\rho(\mathbf{x},t)\,\mathbf{g}\,dx+\int_{\partial\mathcal{V}}\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{x},t)\,\mathbf{n}(\mathbf{x})\,ds$$

Introduisons la divergence d'un tenseur τ :

$$\mathbf{div}\,\tau=\left(\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\tau_{ij}}{\partial x_j}\right)_{1\leq i\leq 3}$$

Ainsi, $\mathbf{div}\,\tau$ est un champs de vecteur, à trois composantes. Afin d'éviter toute ambiguïté avec la divergence d'un champs de vecteur $\operatorname{div}\mathbf{v}$, l'opérateur divergence de tenseur est noté en caractères gras.

En appliquant la formule de Stokes suivante :

$$\int_{\partial\mathcal{V}}\tau\,\mathbf{n}\,ds=\int_{\mathcal{V}}\mathbf{div}\,\tau\,dx,\ \forall\tau\in(H^1(\mathcal{V}))^{3\times 3}$$

au tenseur $\sigma_{\text{tot}}(.,t)$, la conservation de la quantité de mouvement devient :

$$\int_{\mathcal{V}}\left(\rho\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)-\mathbf{div}\,\sigma_{\text{tot}}-\rho\mathbf{g}\right)dx=0$$

Cette relation étant vrai pour tout voisinage $\mathcal{V}$ d'un point quelconque $\mathbf{x}$ de l'ouvert Ω, et à tout instant t, nous obtenons une expression locale de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)-\mathbf{div}\,\sigma_{\text{tot}}=\rho\mathbf{g}\ \text{ dans }\ \Omega\times]0,T[\tag{2}$$

1.3 Loi de comportement

Commençons par introduire quelques définitions. Tout d'abord, définissons la **trace** d'un tenseur τ :

$$\operatorname{tr}(\tau)=\sum_{i=1}^{3}\tau_{ii}$$

Un tenseur τ peut être décomposé en la somme de $\frac{1}{3}\operatorname{tr}(\tau)\,I$, appelé **partie sphérique**, et de $\tau-\frac{1}{3}\operatorname{tr}(\tau)\,I$, sa **partie déviatrice**, où $I=(\delta_{ij})_{1\leq i,j\leq 3}$ est le tenseur identité et δ_{ij} représentant le symbole de Kronecker.

La partie sphérique du tenseur des contraintes totales permet d'introduire le champs de **pression** :

$$p=-\frac{1}{3}\operatorname{tr}(\sigma_{\text{tot}})$$

La partie déviatrice du tenseur des contraintes totales est notée σ, si bien que :

$$\sigma_{\text{tot}} = -p\, I + \sigma \tag{3}$$

La loi de comportement exprime une relation entre la partie déviatrice du tenseur des contraintes totales et le tenseur des gradients de vitesse $\nabla \mathbf{u}$:

$$(\nabla \mathbf{u})_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad 1 \leq i, j \leq 3$$

Dans le cas le plus simple d'un **fluide newtonien**, la loi de comportement est :

$$\sigma = 2\eta D(\mathbf{u}) - \frac{2\eta}{3} \text{div}(\mathbf{u})\, I \tag{4}$$

où η est une constante positive appelée **viscosité** et $D(\mathbf{u})$ est la partie symétrique du tenseur de gradient des vitesses :

$$D(\mathbf{u}) = \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2}$$

Le tenseur $D(\mathbf{u})$ est aussi appelé tenseur des **taux de déformation**. Remarquons que $\text{tr}(D(\mathbf{u})) = \text{div}\, \mathbf{u}$, si bien que l'expression du membre de droite de (4) est bien à trace nulle. L'eau et l'air sont des fluides newtoniens et vérifient la relation (4). Un certain nombre de fluides ne vérifient pas cette loi de comportement, et sont appelés fluides non-newtoniens ; citons notamment :

- les pâtes alimentaires (pâte à pain, ...), les argiles et terres ;
- les fluides présentant des fibres, tels que les plastiques fondus ou bien les micro-organismes en biomécanique ;
- les mélanges de fluide et de particules, tels que le sang, les mélanges de sable et d'eau ;
- les gaz raréfiés.

La loi entre σ et $\nabla \mathbf{u}$ est alors non-linéaire.

1.4 Hypothèse d'incompressibilité

Dans la suite, nous allons supposer la densité ρ constante. Cette hypothèse se justifie lorsque le fluide est de l'eau, ou bien encore de l'air à faible vitesse. La conservation de la masse (1) conduit alors à la **relation d'incompressibilité** :

$$\text{div}\, \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega \times]0, T[\tag{5}$$

et la loi de comportement (4) devient :

$$\sigma = 2\eta D(\mathbf{u})$$

En utilisant la décomposition (3) du tenseur des contraintes totales, la conservation de la quantité de mouvement (2) devient alors :

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)-\mathbf{div}(2\eta D(\mathbf{u}))+\nabla p=\rho\mathbf{g} \quad \text{dans} \quad \Omega\times]0,T[$$

Remarquant encore l'identité $\mathbf{div}(2D(\mathbf{u}))=\Delta\mathbf{u}+\nabla(\operatorname{div}\mathbf{u})$, cette relation s'écrit aussi :

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)-\eta\Delta\mathbf{u}+\nabla p=\rho\mathbf{g} \quad \text{dans} \quad \Omega\times]0,T[\tag{6}$$

Les équations (5)-(6) sont appelées équations de Navier-Stokes.

1.5 Problème aux limites

Le problème est complété par une condition initiale :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t=0)=\mathbf{u}_0(\mathbf{x}) \quad \text{pour presque tout } \mathbf{x}\in\Omega$$

et par une condition aux limites :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t=0)=\mathbf{u}_\Gamma(\mathbf{x}) \quad \text{pour presque tout } \mathbf{x}\in\partial\Omega,\ t\in]0,T[$$

où $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_\Gamma$ sont donnés.

Le problème de Navier-Stokes s'énonce alors :

(NS) : *trouver* $\mathbf{u}$ *et* p *tels que*

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcl}
\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right) & - & \eta\Delta\mathbf{u} & + & \nabla p & = & \rho\mathbf{g} \ \text{dans} \ \Omega\times]0,T[\\
 & - & \operatorname{div}\mathbf{u} & & & = & 0 \ \text{dans} \ \Omega\times]0,T[\\
 & & & & \mathbf{u}(0) & = & \mathbf{u}_0 \ \text{dans} \ \Omega \\
 & & & & \mathbf{u} & = & \mathbf{u}_\Gamma \ \text{sur} \ \partial\Omega\times]0,T[
\end{array}\right.$$

Pour des résultats d'existence et d'unicité, on pourra consulter [Lio68] ou [Pir88], page 132.

1.6 Approximation en temps

L'intervalle $[0,T]$ est partitionné en N sous-intervalles $[t_n,t_{n+1}]$, où $t_n=n\Delta t$, $0\leq n\leq N$ et $\Delta t=T/N$ est le pas de temps.

Introduisons la **dérivée totale** d'une quantité φ :

$$\frac{d\varphi}{dt}=\frac{\partial\varphi}{\partial t}+(\mathbf{u}.\nabla)\varphi$$

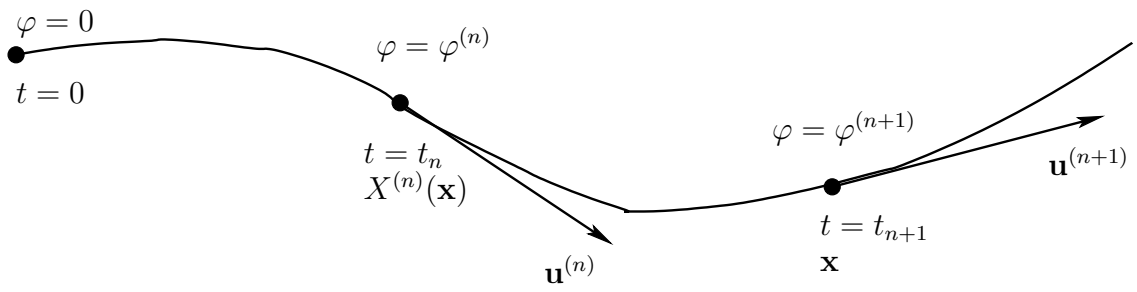


FIG. 2 – Approximation de la dérivée totale.

Notons $X^{(n)}(\mathbf{x})$ la position de la particule au temps t_n qui est à la position $\mathbf{x}$ au temps t_{n+1}. Cette situation est représentée sur la figure 2. La dérivée totale de φ à l'instant t_{n+1} est approchée suivant l'expression de type différences finies :

$$\frac{d\varphi}{dt}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \frac{\varphi(\mathbf{x}, t_{n+1}) - \varphi(X^{(n)}(\mathbf{x}), t_n)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Remarquons que la dérivée totale du champs des vitesses

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}.\nabla)\mathbf{u}$$

apparaît dans les équations de Navier-Stokes. Il est donc possible d'approcher ce terme par

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}) - \mathbf{u}(X^{(n)}(\mathbf{x}), t_n)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Utilisons un schéma d'Euler implicite pour approcher en temps le problème :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\frac{\mathcal{Y}^{(n+1)} - \mathcal{Y}^{(n)} \circ X^{(n)}}{\Delta t} + \mathcal{F}(\mathcal{Y}^{(n+1)}) &= 0 \\ \mathcal{Y}^{(0)} &= \mathcal{Y}_0 \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} &= \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix} \\ \mathcal{M} &= \mathrm{diag}(\rho,\, 0) \\ \mathcal{F}(\mathcal{Y}) &= \begin{pmatrix} -\eta\Delta\mathbf{u} + \nabla p \\ -\mathrm{div}\,\mathbf{u} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Nous pouvons construite par récurrence une suite $(\mathbf{u}^{(n)})_{0\leq n\leq N}$, où $\mathbf{u}^{(n)}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ est une approximation de la vitesse :

Algorithme **1.1** *(*schéma d'Euler implicite*)*

- $n = 0$ *:* $\mathbf{u}^{(0)} := \mathbf{u}_0$ *est donné.*
- $n \geq 0$ *:* $\mathbf{u}^{(n)}$ *étant connu, trouver* $\mathbf{u}^{(n+1)}$ *et* $p^{(n+1)}$ *tels que*

$$\begin{array}{rcrcrcll} \dfrac{\rho}{\Delta t}\mathbf{u}^{(n+1)} & - & \eta\Delta\mathbf{u}^{(n+1)} & + & \nabla p^{(n+1)} & = & \rho\mathbf{g} + \dfrac{\rho}{\Delta t}\mathbf{u}^{(n)} \circ X^{(n)} & \textit{dans } \Omega \\ & - & \operatorname{div}\mathbf{u}^{(n+1)} & & & = & 0 & \textit{dans } \Omega \\ & & & & \mathbf{u}^{(n+1)} & = & \mathbf{u}_\Gamma(t_{n+1}) & \textit{sur } \partial\Omega \end{array}$$

1.7 Problème de Stokes

À chaque étape de l'algorithme précédent, nous avons à résoudre un système linéaire de type Stokes, de la forme :

(S) : *trouver* $\mathbf{u}$ *et* p *tels que*

$$\left\{ \begin{array}{rcrcll} (\alpha I - \eta\Delta)\mathbf{u} & + & \nabla p & = & \mathbf{f} & \text{dans } \Omega \\ -\operatorname{div}\mathbf{u} & & & = & 0 & \text{dans } \Omega \\ & & \mathbf{u} & = & \mathbf{u}_\Gamma & \text{sur } \partial\Omega \end{array} \right.$$

où α et η sont des constantes positives et $\mathbf{f} \in (H^{-1}(\Omega))^3$ et $\mathbf{u}_\Gamma \in (H^{1/2}(\partial\Omega))^3$ sont donnés.

Lemme **1.1** *(*relèvement à divergence nulle*)*
si $\mathbf{u}_\Gamma \in (H^{1/2}(\partial\Omega))^3$ *et*

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{u}_\Gamma.\mathbf{n}\, ds = 0$$

alors il existe un relèvement $\tilde{\mathbf{u}}_\Gamma \in (H^1(\Omega))^3$ *de* $\mathbf{u}_\Gamma$ *vérifiant* $\operatorname{div}\tilde{\mathbf{u}}_\Gamma = 0$.

Démonstration : Voir [GR86], page 24. □ Utilisant ce lemme, nous pouvons, par translation, nous ramener sans perte de généralité à un problème avec une condition aux limites homogène.

Introduisons les formes bilinéaires :

$$\begin{array}{rcl} a(\mathbf{u},\, \mathbf{v}) & = & \alpha(\mathbf{u},\, \mathbf{v}) + \eta(\nabla\mathbf{u},\, \nabla\mathbf{v}) \\ b(\mathbf{v}, q) & = & -(\operatorname{div}\mathbf{v},\, q) \end{array}$$

et où la notation $(.,.)$ désigne le produit scalaire de L^2.

La formulation variationnelle du problème homogène s'énonce :

(FVS) : *trouver* $\mathbf{u} \in H_0^1(\Omega)^3$ *et* $p \in L^2(\Omega)$ *tels que*

$$\left\{ \begin{array}{rcrcl} a(\mathbf{u},\, \mathbf{v}) & + & b(\mathbf{v},\, p) & = & (\mathbf{f},\, \mathbf{v}) \\ b(\mathbf{u},\, q) & & & = & 0 \end{array} \right.$$

pour tout $\mathbf{v} \in H_0^1(\Omega)^3$ et $q \in L^2(\Omega)$.

Pour des résultats d'existence et d'unicité, on pourra consulter [GR86], page 80 ou bien [Pir88], page 101.

1.8 Approximation en espace du problème de Stokes

Soient $V_h \subset H_0^1(\Omega)^3$ et $Q_h \subset L^2(\Omega)$ deux espaces vectoriels de dimension finie. L'approximation variationnelle du problème précédent s'écrit :

$(FVS)_h$: *trouver* $\mathbf{u}_h \in V_h$ *et* $p_h \in Q_h$ *tels que*

$$\left\{ \begin{array}{rcrcl} a(\mathbf{u}_h,\, \mathbf{v}_h) & + & b(\mathbf{v}_h,\, p_h) & = & (\mathbf{f},\, \mathbf{v}_h) \\ b(\mathbf{u}_h,\, q_h) & & & = & 0 \end{array} \right.$$

pour tout $\mathbf{v}_h \in V_h$ et $q_h \in Q_h$.

La construction par éléments finis de V_h et Q_h doit être faite avec soin : on pourra consulter [BF91], page 207 et suivantes, pour des combinaisons satisfaisantes d'approximations des vitesses et pressions. Nous présentons ici la combinaison proposée initialement dans [HT74] et largement utilisée : les vitesses sont approchées par des fonctions continues quadratiques par morceaux et les pressions par des fonctions continues affines par morceaux.

Soit $\mathcal{T}_h$ une triangulation de Ω. Les espaces V_h et Q_h sont alors définis par

$$V_h = \{\mathbf{v}_h \in C^0(\Omega)^3;\ \mathbf{v}_h = 0 \text{ sur } \partial\Omega \text{ et } \mathbf{v}_{h|K} \in (P_2)^3,\ \forall K \in \mathcal{T}_h\} \tag{7}$$

$$Q_h = \{q_h \in C^0(\Omega);\ q_{h|K} \in P_1,\ \forall K \in \mathcal{T}_h\} \tag{8}$$

$$\tag{9}$$

1.9 Résolution du problème de Stokes discret

Soit $(\boldsymbol{\varphi}_i)_{1 \le i \le n}$ une base de V_h et $(\xi_i)_{1 \le i \le m}$ une base de Q_h. Décomposons $\mathbf{u}_h$ et p_h sur ces bases respectives :

$$\mathbf{u}_h = \sum_{j=1}^{n} u_j \boldsymbol{\varphi}_j$$

$$p_h = \sum_{j=1}^{m} q_j \xi_j$$

et posons :

$$\begin{array}{rcl} A_{ij} & = & a(\boldsymbol{\varphi}_i,\, \boldsymbol{\varphi}_j),\ 1 \leq i, j \leq n \\ B_{ij} & = & b(\boldsymbol{\varphi}_i,\, \xi_j),\ \ 1 \leq i \leq n,\ 1 \leq j \leq m \\ f_i & = & (\mathbf{f},\, \boldsymbol{\varphi}_i),\ \ 1 \leq i \leq n \end{array}$$

Le problème de Stokes discret se ramène à résoudre le système linéaire suivant :

$(S)_h$: *trouver* $u = (u_i)_{1 \leq i \leq n}$ *et* $p = (p_i)_{1 \leq i \leq m}$ *tels que*

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ 0 \end{pmatrix}$$

où la matrice A est symétrique définie positive $n \times n$ et B est rectangulaire $n \times m$. Étendons le problème précédent en introduisant $g \in Im(B) \subset \mathbb{R}^m$:

$$\begin{array}{rcrcl} Au & + & B^T p & = & f \\ Bu & & & = & g \end{array}$$

De la première équation, il vient

$$u = A^{-1}(f - B^T p)$$

et alors de la seconde :

$$(BA^{-1}B^T)p = BA^{-1}f - g$$

En posant $\mathcal{A} = BA^{-1}B^T$ et $\beta = BA^{-1}f - g$, ceci s'écrit encore :

$$\mathcal{A}p = \beta$$

La solution $p \in \mathbb{R}^m$ est caractérisée comme étant l'unique minimum de la fonctionnelle convexe

$$\mathcal{J}(q) = \frac{1}{2}(\mathcal{A}q,\, q) - (\beta,\, q)$$

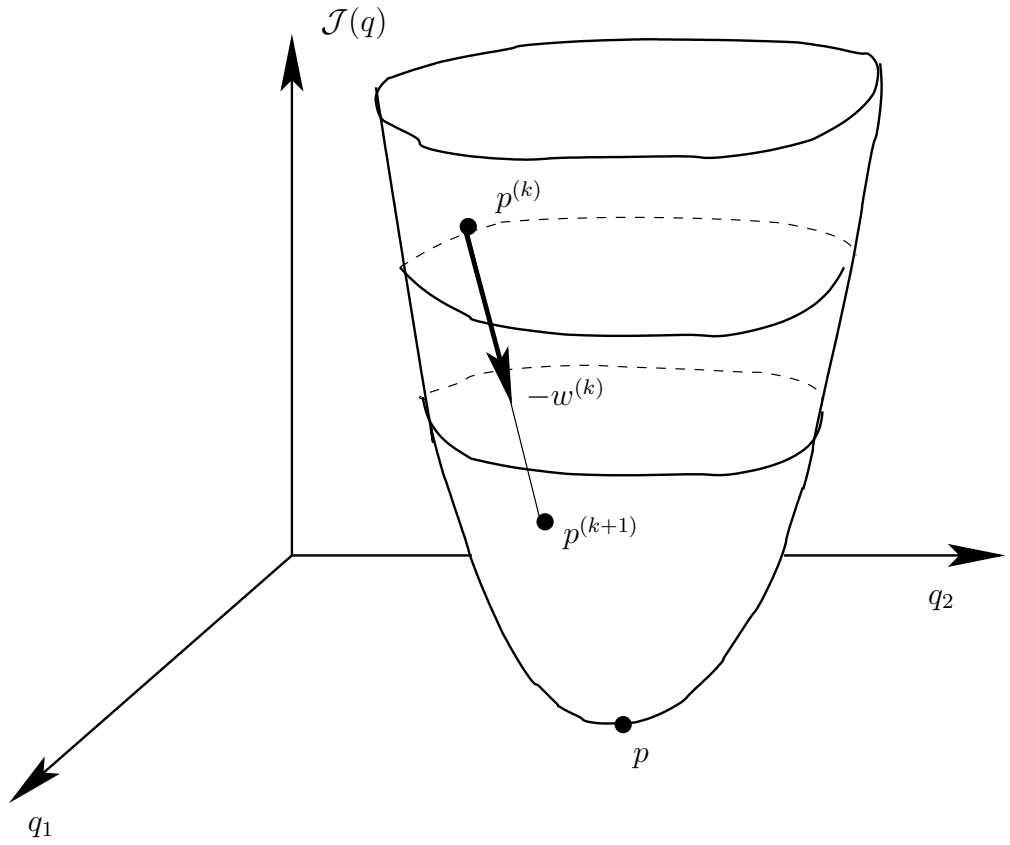


FIG. 3 – Algorithme de descente.

Le minimum de $\mathcal{J}$ peut être obtenu par un algorithme de type descente et est représenté sur la figure 3 :

ALGORITHME **1.2** *(*descente – version abstraite*)*

- $k = 0$ *:* $p^{(0)} \in \mathbb{R}^m$ *donné, quelconque.*
- $k \geq 0$ *:* $p^{(k)}$ *connu, calculer*

$$p^{(k+1)} := p^{(k)} - \rho_k w^{(k)}$$

où
ρ_k *est le* **pas** *de descente*
$w^{(k)}$ *est la* **direction** *de descente*

L'algorithme de plus profonde descente à pas fixe, appelé aussi algorithme d'Uzawa, consiste à choisir pour le pas de descente une valeur constante $\rho_k = \lambda > 0$ et pour la direction de

descente $w^{(k)}$, l'opposée du gradient,

$$\begin{aligned} w^{(k)} &= \mathcal{A}p^{(k)} - \beta \\ &= BA^{-1}B^T p^{(k)} - BA^{-1}f + g \\ &= BA^{-1}(B^T p^{(k)} - f) + g \\ &= -Bu^{(k)} + g \end{aligned}$$

où nous avons posé

$$u^{(k)} = A^{-1}(f - B^T p^{(k)})$$

Ainsi, $w^{(k)}$ représente le résidu de la deuxième équation du système linéaire.

ALGORITHME **1.3** *(*Uzawa*)*

- $k = 0$ *: $p^{(0)} \in \mathbb{R}^m$ étant donné, trouver $u^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ tel que*

$$Au^{(0)} = f - B^T p^{(0)}$$

- $k \geq 0$ *: $(u^{(k)}, p^{(k)})$ étant connu, calculer successivement :*

$$\begin{aligned} w^{(k)} &:= g - B^T u^{(k)} \\ p^{(k+1)} &:= p^{(k)} - \lambda w^{(k)} \end{aligned}$$

puis trouver $u^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$Au^{(k+1)} = f - B^T p^{(k+1)}$$

Le pas de descente $\lambda > 0$ est un paramètre de cet algorithme. Le test d'arrêt peut être effectué sur le résidu : $\|w^{(k)}\| < \varepsilon$, où ε est une tolérance.

Lorsque le problème est de grande taille, l'algorithme converge très lentement. Pour accélérer la convergence, remplaçons le système linéaire par le problème équivalent suivant :

$$\begin{array}{lcl} (A + rB^T B)u \;+\; B^T p & = & f + rB^T g \\ Bu & = & g \end{array}$$

où $r > 0$ est appelé paramètre d'augmentation. Appliquons alors l'algorithme d'Uzawa avec un pas $\lambda = r$. L'algorithme converge alors d'autant plus vite que r est grand [FG83]. Dans la pratique, afin d'éviter les erreurs dûes aux propagations d'arrondis, nous choisirons $r = 1/\sqrt{\varepsilon_{mach}}$ où ε_{mach} est la précision de la machine pour les calculs en virgule flottante. La matrice A pourra être factorisée une fois pour toute sous la forme LDL^T lors de l'initialisation de l'algorithme d'Uzawa.

De plus, remarquons que lors de des itérations de l'algorithme 1.1 d'Euler implicite, page 9, seuls les second membres des problèmes de Stokes changent. Ainsi, cette factorisation de la matrice A pourra être effectuée une seule fois lors de l'initialisation de la version discrète de l'algorithme d'Euler implicite pour résolution du problème de Navier-Stokes.

Voir le code RHEOLEF [SR01a, SR01b] pour la programmation de ces algorithmes dans un contexte d'éléments finis en dimension 1, 2 et 3.

2 Interface entre deux fluides non miscibles

2.1 Équation de l'interface

Considérons l'écoulement de deux fluides non-miscibles dans un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. À un instant t, notons $\Omega_1(t) \subset \Omega$ le sous-domaine contenant le premier fluide et $\Omega_2(t)$ contenant le second, si bien que $\overline{\Omega} = \overline{\Omega_1}(t) \cup \overline{\Omega_2}(t)$. L'interface entre les deux fluides sera noté $\Gamma(t) = \partial\Omega_1(t) \cap \partial\Omega_2(t)$, et est représenté sur la figure 4.

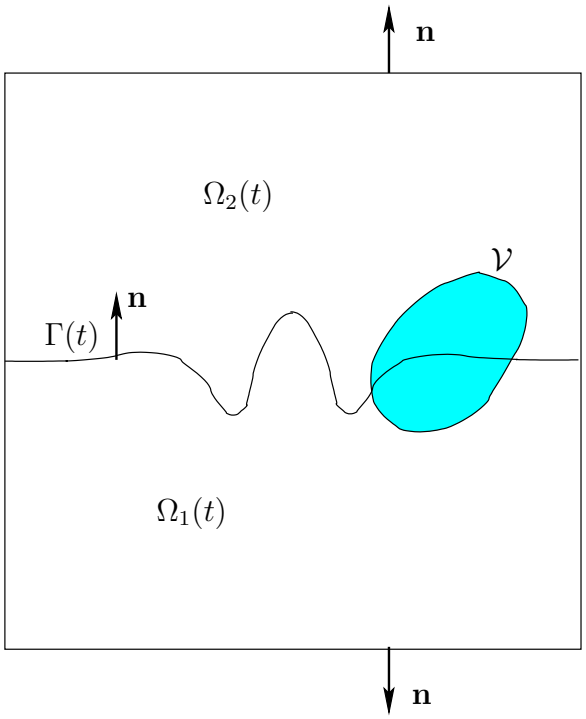


FIG. 4 – Modélisation de l'interface.

À $t = 0$, nous supposerons que l'interface est une surface paramétrée par $\mathcal{X}_0$ connue :

$$\Gamma(0) = \{\mathbf{x} = \mathcal{X}_0(\xi) \in \Omega;\ \xi \in [0,1]^2\}$$

À $t > 0$, l'interface sera décrit par une surface paramétrée par $\mathcal{X}$ inconnue :

$$\Gamma(t) = \{\mathbf{x} = \mathcal{X}(\xi, t) \in \Omega;\ \xi \in [0,1]^2\}$$

Sachant que la position $\mathcal{X}(\xi, t)$ de l'interface est convecté par la vitesse $\mathbf{u}$ du fluide, nous en déduisons que :

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{d\mathcal{X}}{dt}(\xi, t) & = & \mathbf{u}(\mathcal{X}(\xi, t), t) \\ \mathcal{X}(\xi, t{=}0) & = & \mathcal{X}_0(\xi) \end{array}$$

2.2 Équation sur l'interface

Sur l'interface, les équations sont :

$$\begin{array}{rcll} [\mathbf{u}] & = & 0 & \text{sur } \Gamma(t)\times]0,T[\\ [\sigma_{\text{tot}}\mathbf{n}] & = & \alpha\kappa\mathbf{n} & \text{sur } \Gamma(t)\times]0,T[\end{array}$$

où $[\varphi] = \varphi_{|\Omega_2(t)} - \varphi_{|\Omega_1(t)}$ est le saut d'une quantité φ à travers l'interface $\Gamma(t)$, σ_{tot} représente le tenseur des contraintes totales, $\mathbf{n}$ est la normale unitaire sur $\Gamma(t)$ orientée de $\Omega_1(t)$ vers $\Omega_2(t)$, $\alpha > 0$ est le coefficient de tension de surface et $\kappa(\mathbf{x}, t)$ est la courbure de la surface $\Gamma(t)$.

Ces relations expriment que le champs des vitesses est continu à la traversée de l'interface tandis que les contraintes normales sont discontinues. En effet, l'interface exerce une force surfacique d'autant plus grande que la courbure est élevée, et tendant à ce que l'interface redevienne plan.

2.3 Conservation de la masse

Nous supposons que la densité du premier (resp. deuxième) fluide, notée ρ_1 (resp. ρ_2), est constante, si bien que la conservation de la masse conduit à :

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega_i(t)\times]0,T[, i = 1,2$$

ce qui se réduit à

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[$$

2.4 Conservation de la quantité de mouvement

La conservation de la quantité de mouvement pour le i-ième fluide, $i = 1, 2$ s'écrit :

$$\rho_i \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} - \mathbf{div}\, \sigma_{\text{tot}} = \rho_i \mathbf{g} \quad \text{dans } \Omega_i(t) \times]0, T[, i = 1, 2$$

De plus, nous supposons les deux fluides newtoniens. Le tenseur des contraintes totales est alors donné par

$$\sigma_{\text{tot}} = -pI + 2\eta D(\mathbf{u})$$

où

$$\eta = \begin{cases} \eta_1 & \text{dans } \Omega_1(t) \\ \eta_2 & \text{dans } \Omega_2(t) \end{cases}$$

avec η_1 et η_2 deux constantes positives.

2.5 Problème aux limites

Le problème est complété par des conditions initiales et aux limites.

(P) : *trouver* $\mathcal{X}$, $\mathbf{u}$ *et* p *tels que*

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{X}}{dt}(\xi, t) &= \mathbf{u}(\mathcal{X}(\xi, t), t) \quad \text{dans }]0, 1[^2 \times]0, T[\\
\rho_i \frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}(2\eta_i D(\mathbf{u})) + \nabla p &= \rho_i \mathbf{g} \quad \text{dans } \Omega_i(t) \times]0, T[, i = 1, 2 \\
\operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 \quad \text{dans } \Omega \times]0, T[\\
[\mathbf{u}] &= 0 \quad \text{sur } \Gamma(t) \times]0, T[\\
[(-pI + 2\eta D(\mathbf{u}))\mathbf{n}] &= \alpha\kappa\mathbf{n} \quad \text{sur } \Gamma(t) \times]0, T[\\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_\Gamma \quad \text{sur } \partial\Omega \times]0, T[\\
\mathcal{X}(\xi, t{=}0) &= \mathcal{X}_0(\xi) \quad \text{dans }]0, 1[^2 \\
\mathbf{u}(t{=}0) &= \mathbf{u}_0 \quad \text{dans } \Omega
\end{aligned}$$

2.6 Formulation par ensemble de niveaux

Ce problème n'est pas facile à résoudre lorsqu'il est formulé de cette façon, car la frontière peut être constituée de composantes multiples au bout de quelques temps, alors que la topologie initiale de l'écoulement était simple à l'instant initial. Pour cela nous allons introduire une formulation différente.

Soit $\mathcal{V} \subset \Omega$ un sous-domaine régulier quelconque de Ω. Introduisons $\mathcal{V}_i(t) = \mathcal{V} \cap \Omega_i(t)$. La conservation de la quantité de mouvement pour le i-ième fluide, $i = 1, 2$ s'écrit :

$$\int_{\mathcal{V}_i(t)} \rho_i \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{g} \right) dx - \int_{\partial \mathcal{V}_i(t)} \sigma_{\text{tot}} \mathbf{n}_i \, ds = 0$$

où $\mathbf{n}_i$ est la normale unitaire extérieure à $\mathcal{V}_i(t)$ sur $\partial \mathcal{V}_i(t)$. En sommant ces deux dernières égalités pour $i = 1, 2$, nous obtenons :

$$\int_{\mathcal{V}} \rho \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{g} \right) dx - \int_{\partial \mathcal{V}} \sigma_{\text{tot}} \mathbf{n} \, ds + \int_{\mathcal{V} \cap \Gamma(t)} [\sigma_{\text{tot}} \mathbf{n}] \, ds = 0$$

où $\mathbf{n}$ désigne sur $\partial \mathcal{V}$ la normale unitaire extérieure à $\mathcal{V}$. D'autre part, nous avons introduit :

$$\rho = \begin{cases} \rho_1 & \text{dans } \Omega_1(t) \\ \rho_2 & \text{dans } \Omega_2(t) \end{cases}$$

La formule de Stokes nous permet de ramener l'intégrale de bord sur $\partial \mathcal{V}$ à une intégrale de volume sur $\mathcal{V}$:

$$\int_{\mathcal{V}} \left(\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}\, \sigma_{\text{tot}} \right) dx + \int_{\mathcal{V} \cap \Gamma(t)} [\sigma_{\text{tot}} \mathbf{n}] \, ds = \int_{\mathcal{V}} \rho \, \mathbf{g} \, dx$$

En utilisant l'équation sur l'interface il vient :

$$\int_{\mathcal{V}} \left(\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}\, \sigma_{\text{tot}} \right) dx + \alpha \int_{\mathcal{V} \cap \Gamma(t)} \kappa \mathbf{n} \, ds = \int_{\mathcal{V}} \rho \, \mathbf{g} \, dx \tag{10}$$

Soit ϕ une fonction définie dans $\Omega \times]0, T[$ telle que

$$\phi(\mathbf{x}, t) \begin{cases} = 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma(t) \\ > 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1(t) \\ < 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2(t) \end{cases}$$

Remarquons que $\Gamma(t)$ est alors caractérisé par

$$\Gamma(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega;\ \phi(\mathbf{x}, t) = 0\}$$

Soit $\tilde{\kappa}$ une extension de κ à tout Ω, c'est-à-dire satisfaisant :

$$\tilde{\kappa}(\mathbf{x}, t) = \kappa(\mathbf{x}, t) \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \Omega \text{ et } t \in]0, T[$$

En appliquant le théorème A.1, page 55, nous obtenons :

$$\int_{\Gamma(t) \cap \mathcal{V}} \kappa(\mathbf{x}, t) \, \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) \, ds = \int_{\mathcal{V}} \tilde{\kappa}(\mathbf{x}, t) \, \delta(\phi(\mathbf{x}, t)) \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \, dx$$

Dans la relation précédente, δ désigne la mesure de Dirac. Ainsi, la relation (10) devient

$$\int_{\mathcal{V}} \left(\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}\, \sigma_{\text{tot}} + \alpha \tilde{\kappa}\, \delta(\phi) \nabla \phi - \rho\, \mathbf{g} \right) dx = 0$$

Cette relation étant vraie pour tout voisinage $\mathcal{V}$ d'un point quelconque $\mathbf{x}$ de l'ouvert Ω, et à tout instant t d'un intervalle de temps $]0, T[$, nous obtenons une expression locale de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}\, \sigma_{\text{tot}} + \alpha \tilde{\kappa}\, \delta(\phi) \nabla \phi = \rho\, \mathbf{g} \quad \text{dans} \quad \Omega \times]0, T[\tag{11}$$

D'autre part, l'équation de l'interface se réduit à exprimer que l'interface est convecté par la vitesse :

THÉORÈME **2.1** *(interface)*

$$\frac{d\phi}{dt} = 0 \ \textit{sur}\ \Gamma(t) \times]0, T[$$

Démonstration : Partons de la description de l'interface à l'aide de la fonction de niveau :

$$\phi(\mathbf{x}, t) = 0, \ \text{pour presque tout } \mathbf{x} \in \Gamma(t) \text{ et } t \in]0, T[$$

soit encore

$$\phi(\mathcal{X}(\xi, t), t) = 0, \ \text{pour presque tout } \xi \in]0, 1[^2 \text{ et } t \in]0, T[$$

et, après dérivation en temps :

$$\left(\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \mathcal{X}_i}{\partial t}(\xi, t) \frac{\partial \phi}{\partial x_i}(\mathcal{X}(\xi, t), t) \right) + \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathcal{X}(\xi, t), t) = 0, \ \text{p.p.} \xi \in]0, 1[^2 \text{ et } t \in]0, T[$$

En utilisant l'équation de l'interface :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathcal{X}(\xi, t), t) + \sum_{i=1}^{3} u_i \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathcal{X}(\xi, t), t) = 0, \ \text{p.p.} \xi \in]0, 1[^2 \text{ et } t \in]0, T[$$

Le résultat découle de la définition de la dérivée totale. □

L'extension de ϕ de $\Gamma(t)$ à tout Ω étant arbitraire, nous prolongeons cette équation à tout Ω :

$$\frac{d\phi}{dt} = 0 \text{ dans } \Omega \times]0, T[$$

Le problème est complété par des conditions initiales et aux limites pour ϕ.

(Q) : *trouver* ϕ, $\mathbf{u}$ *et* p *tels que*

$$\begin{aligned}
\frac{d\phi}{dt} &= 0 \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[\\
\rho(\phi)\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}(2\eta(\phi)D(\mathbf{u})) + \nabla p + \alpha\tilde{\kappa}\,\delta(\phi)\nabla\phi &= \rho(\phi)\,\mathbf{g} \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[\\
\operatorname{div}\mathbf{u} &= 0 \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[\\
\phi &= \phi_\Gamma \quad \text{sur } \partial\Omega_-\times]0,T[\\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_\Gamma \quad \text{sur } \partial\Omega\times]0,T[\\
\phi(t{=}0) &= \phi_0 \quad \text{dans } \Omega \\
\mathbf{u}(t{=}0) &= \mathbf{u}_0 \quad \text{dans } \Omega
\end{aligned}$$

où $\partial\Omega_-$ représente la frontière amont :

$$\partial\Omega_-(t) = \{\mathbf{x}\in\partial\Omega;\ (\mathbf{u}_\Gamma.\mathbf{n})(\mathbf{x},t) < 0\}$$

et

$$\begin{aligned}
\rho(\varphi) &= \rho_1 + (\rho_2-\rho_1)H(\varphi) \\
\eta(\varphi) &= \eta_1 + (\eta_2-\eta_1)H(\varphi)
\end{aligned}$$

La fonction H représente la fonction de Heaviside, définie pour presque tout $\varphi\in\mathbb{R}$ par :

$$H(\varphi) = \begin{cases} 1 & \text{si } \varphi > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

2.7 Discrétisation en temps

Utilisons le schéma d'Euler implicite du type de celui introduit paragraphe 1.6, page 7, avec :

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y} &= \begin{pmatrix} \phi \\ \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix} \\
\mathcal{M} &= \operatorname{diag}(1,\,\rho,\,0) \\
\mathcal{F}(\mathcal{Y}) &= \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha\tilde{\kappa}\,\delta\circ\phi\,\nabla\phi - \eta\Delta\mathbf{u} + \nabla p \\ -\operatorname{div}\mathbf{u} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ce schéma conduit à :

Algorithme **2.1** *(*schéma d'Euler implicite*)*
paramètre numérique *:* Δt

- $n = 0$ *:* $(\phi^{(0)}, \mathbf{u}^{(0)}) := (\phi_0, \mathbf{u}_0)$ *est donné.*
- $n \geq 0$ *:* $(\phi^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)})$ *étant connu, calculer* $\phi^{(n+1)}$ *tel que*

$$\phi^{(n+1)} := \phi^{(n)} \circ X^{(n)}$$

puis calculer successivement :

$$\begin{array}{rcl}
\rho^{(n+1)} & := & \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) H \circ \phi^{(n+1)} \\
\eta^{(n+1)} & := & \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1) H \circ \phi^{(n+1)} \\
\tilde{\kappa}^{(n+1)} & = & \mathcal{K}(\nabla \phi^{(n+1)}, \nabla \otimes \nabla \phi^{(n+1)}) \\
\mathbf{f}^{(n+1)} & := & \rho^{(n+1)} \left(\mathbf{g} + \dfrac{\mathbf{u}^{(n)} \circ X^{(n)}}{\Delta t} \right) + \alpha \tilde{\kappa}^{(n+1)} \, \delta \circ \phi^{(n+1)} \, \nabla \phi^{(n+1)}
\end{array}$$

et enfin, trouver $\mathbf{u}^{(n+1)}$ *et* $p^{(n+1)}$ *tels que*

$$\begin{array}{rcrcrcll}
\dfrac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t} \mathbf{u}^{(n+1)} & - & \mathbf{div}(2\eta^{(n+1)} D(\mathbf{u}^{(n+1)})) & + & \nabla p^{(n+1)} & = & \mathbf{f}^{(n+1)} & \textit{dans } \Omega \\
 & - & \operatorname{div} \mathbf{u}^{(n+1)} & & & = & 0 & \textit{dans } \Omega \\
 & & & & \mathbf{u}^{(n+1)} & = & \mathbf{u}_\Gamma(t_{n+1}) & \textit{sur } \partial\Omega
\end{array}$$

La notation $X^{(n)}(\mathbf{x})$, introduite auparavant page 8 représente la position de la particule au temps t_n qui est à la position $\mathbf{x}$ au temps t_{n+1}.

L'expression de la courbure $\mathcal{K}$ en fonction des dérivées de ϕ est donnée par les relations (27) et (28), page 56.

Remarquons qu'à chaque étape de l'algorithme précédent, nous avons à résoudre un système linéaire de type Stokes.

2.8 Exemple d'initialisation de la fonction de niveau

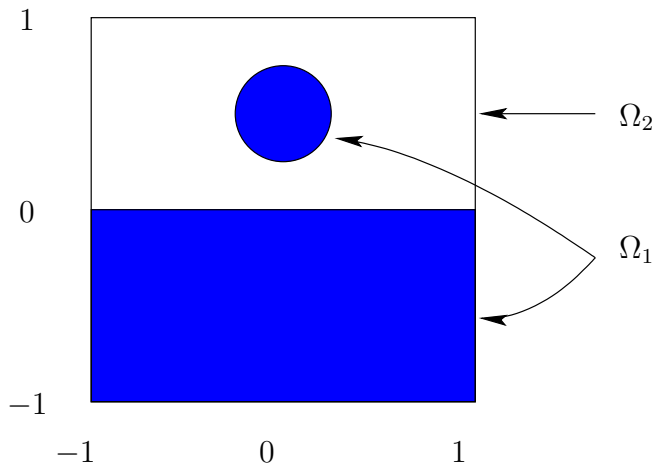


FIG. 5 – État initial des deux fluides.

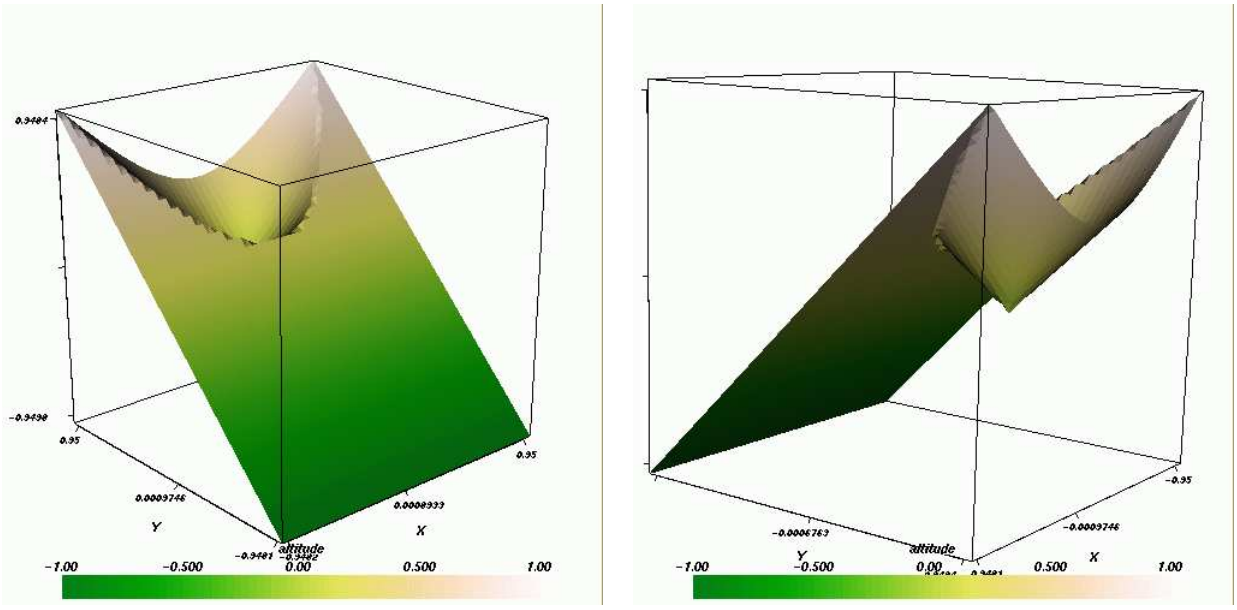


FIG. 6 – Initialisation de la fonction niveau : vue en élévation de face et arrière (grille 40×40).

La fonction ϕ est initialisée à $t = 0$ à la distance à l'interface, compté négativement dans Ω_1 et positivement dans Ω_2.

Soit $\mathbf{x}_c = (0, 1/2)$ le centre et $r_0 = 1/10$ le rayon de la goutte, ainsi que $x_2 = 0$ le plan du

liquide. Si $\mathbf{x}$ est situé dans la goutte, la distance de $\mathbf{x}$ à l'interface est

$$d_{drop} = r_0 - |\mathbf{x} - \mathbf{x}_c|$$

et sera compté négativement par la fonction de niveau.

La projection d'un point $\mathbf{x} \in \Omega$, situé hors de la goutte, sur la bordure de la goutte est

$$\mathbf{x}_p = \mathbf{x}_c + r_0 \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_c}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_c|}$$

La distance de $\mathbf{x}$, situé hors de la goutte, à la frontière de la goutte est alors

$$d_{drop} = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_p| = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_c| - r_0$$

La distance signée au plan $x_2 = 0$ est $d_{plan} = x_2$, si bien que

$$\phi_0(\mathbf{x}) = \min(x_2, |\mathbf{x} - \mathbf{x}_c| - r_0)$$

2.9 Évaluation de l'intégrale de bord

Supposons ϕ et $\tilde{\kappa}$ connus, et étudions le calcul de

$$\mathbf{f} = \tilde{\kappa}\, \delta \circ \phi\, \nabla \phi$$

dans le cadre d'une approximation par éléments finis.

Soient V_h et Q_h donnés par (7)-(8) et introduisons $\Phi_h \subset H^1(\Omega)$ un espace de dimension finie :

$$\Phi_h = \{\varphi_h \in C^0(\bar{\Omega});\ \varphi_{h|K} \in P_k,\ \forall K \in \mathcal{T}_h\}$$

avec $k = 1$ ou 2. Le problème peut être approché par éléments finis de façon analogue aux équations de Navier-Stokes. Supposons que ϕ_h et $\tilde{\kappa}_h$ sont dans Φ_h,

Le calcul précédent est approché par $\mathbf{f}_h \in V_h$ vérifiant pour tout $\mathbf{v}_h \in V_h$

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \mathbf{f}_h.\mathbf{v}_h\, dx &= \int_\Omega \tilde{\kappa}_h\, \delta \circ \phi_h\, \nabla \phi_h.\mathbf{v}_h\, dx \\
&= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \tilde{\kappa}_h\, \delta \circ \phi_h\, \nabla \phi_h.\mathbf{v}_h\, dx \\
&= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{K \cap \{\phi_h = 0\}} \tilde{\kappa}_h\, \delta \circ \phi\, \mathbf{v}_h.\mathbf{n}\, ds
\end{aligned}$$

où $\mathbf{n}$ désigne ici la normale unitaire à $\Gamma_h = \{\phi_h = 0\}$ sortant du fluide 1 et entrant dans le fluide 2.

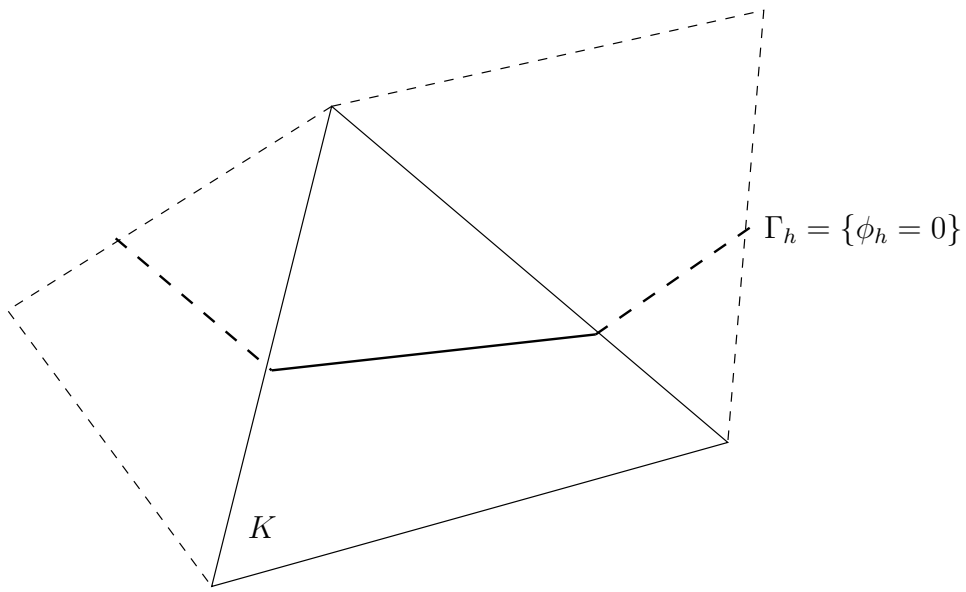


FIG. 7 – Approximation de l'interface.

Dans chaque élément $K \in \mathcal{T}_h$, l'interface approché $\{\phi_h = 0\}$ est un segment de droite pour $k = 1$ et un arc de parabole pour $k = 2$, ceci en dimension 2 (voir figure 7). Dans le cas de la dimension 3, il s'agit d'un morceau de surface plane ($k = 1$) ou de surface quadratique ($k = 2$). Dans tous les cas, l'intégrale relative à K peut être calculée de façon exacte ou approchée par une formule de quadrature d'ordre k sur K.

2.10 Régularisation pour l'intégrale de bord

L'évaluation du terme précédent peut s'avérer délicate dans des codes qui ne sont pas prévus pour cela. Dans ce cas, une méthode couramment utilisée consiste à remplacer la mesure de Dirac δ par une fonction δ_ε qui converge vers δ lorsque $\varepsilon \to 0$. Ainsi $\varepsilon > 0$ devient un nouveau paramètre d'approximation du problème.

Dans cet esprit, la fonction de Heaviside H est remplacée par H_ε plus régulière :

$$H_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \varphi < -\varepsilon \\ (1 + \dfrac{\varphi}{\varepsilon} + \dfrac{\sin(\pi\varphi/\varepsilon)}{\pi})/2 & \text{si } |\varphi| \leq \varepsilon \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$$

ce qui conduit à :

$$\delta_\varepsilon(\varphi) = \frac{dH}{d\varphi}(\varphi) = \begin{cases} \dfrac{1 + \cos(\pi\varphi/\varepsilon)}{2\epsilon} & \text{si } |\varphi| \leq \varepsilon \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

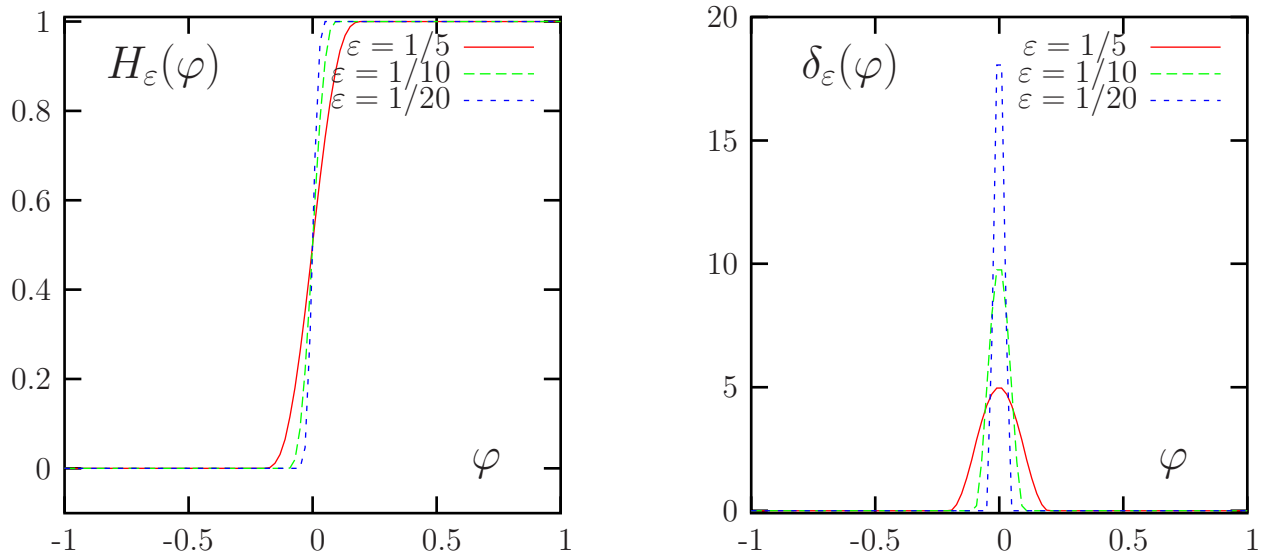


FIG. 8 – Approximations de la fonction de Heaviside et la mesure de Dirac.

L'intégrale préc'edente devient alors une intégrale de volume, plus classique. De même, nous remplacerons les fonctions ρ et η par :

$$\begin{aligned} \rho_\varepsilon &= \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) H_\varepsilon \circ \phi \\ \eta_\varepsilon &= \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1) H_\varepsilon \circ \phi \end{aligned}$$

L'**épaisseur de l'interface** est alors 2ε, et s'interprète comme une zone de mélange des deux fluides :

$$\begin{aligned} 1 - H_\varepsilon \circ \phi(\mathbf{x}, t) \qquad & \text{fraction de fluide 1} \\ H_\varepsilon \circ \phi(\mathbf{x}, t) \qquad & \text{fraction de fluide 2} \end{aligned}$$

Dans le cas d'une triangulation quasi-uniforme de pas h, nous prendrons soin de prendre $\varepsilon > h$ si l'intégrale est évaluée par une formule de quadrature, ce qui est généralement le cas. Dans le cas d'une triangulation non-structurée, où h varie fortement, ε est choisis localement de façon à être de l'ordre d'un pas local.

$(Q)_\varepsilon$: *trouver* ϕ, $\mathbf{u}$ *et* p *tels que*

$$
\begin{aligned}
\frac{d\phi}{dt} &= 0 \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[\\
\rho_\varepsilon(\phi)\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \mathbf{div}(2\eta_\varepsilon(\phi)D(\mathbf{u})) + \nabla p + \alpha\tilde{\kappa}\,\delta_\varepsilon(\phi)\nabla\phi &= \rho_\varepsilon(\phi)\,\mathbf{g} \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[\\
\operatorname{div}\mathbf{u} &= 0 \quad \text{dans } \Omega\times]0,T[\\
\phi &= \phi_\Gamma \quad \text{sur } \partial\Omega_-\times]0,T[\\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_\Gamma \quad \text{sur } \partial\Omega\times]0,T[\\
\phi(t=0) &= \phi_0 \quad \text{dans } \Omega \\
\mathbf{u}(t=0) &= \mathbf{u}_0 \quad \text{dans } \Omega
\end{aligned}
$$

Nous pouvons alors appliquer l'algorithme précédent pour résoudre ce problème.

2.11 Fonction de niveau comme fonction distance

La fonction de niveau ϕ est initialisée comme une fonction distance signée. En particulier, nous avons $|\nabla\phi| = 1$ à l'instant initial.

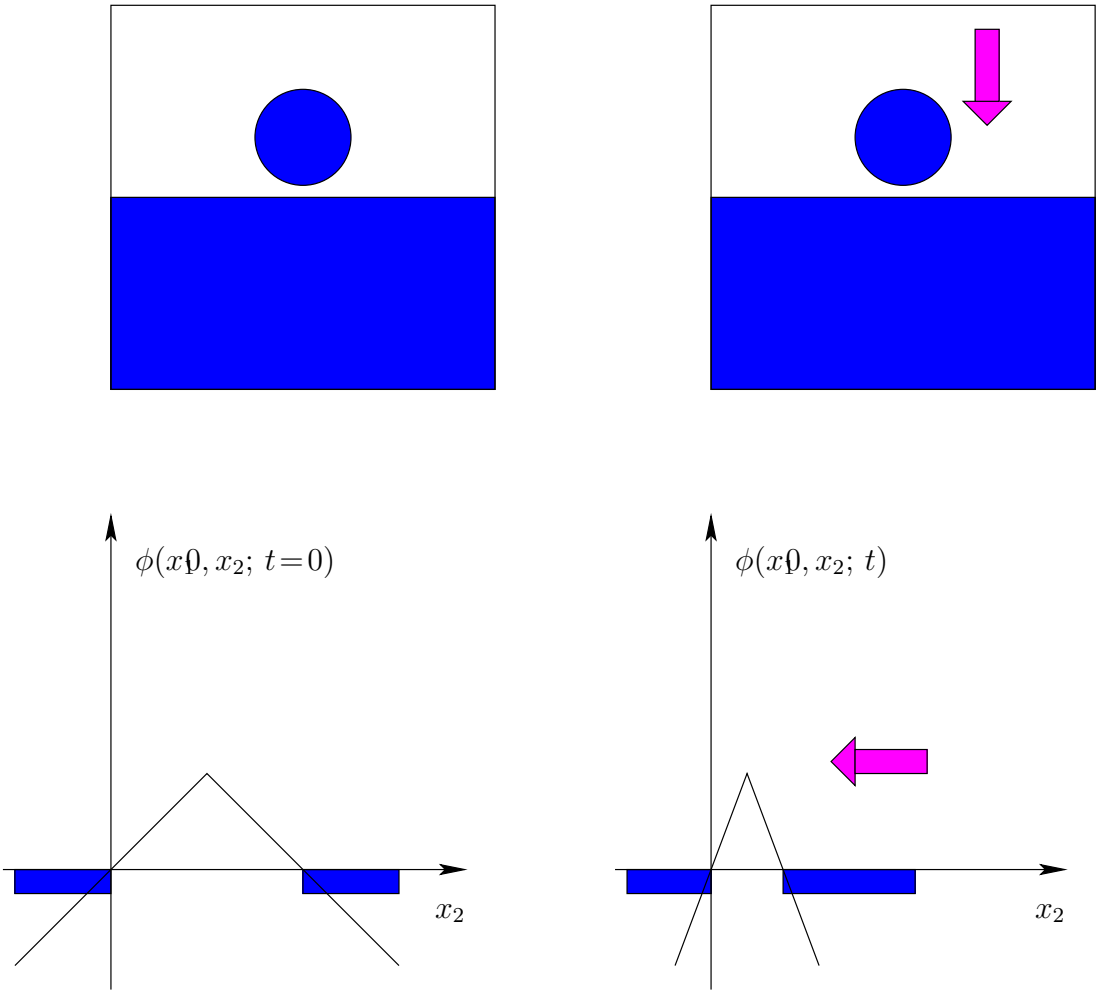


FIG. 9 – Le gradient $|\nabla\phi|$ n'est pas borné en temps.

Cependant cette propriété n'est pas conservée au cours du temps : la fonction ϕ étant transportée par le champs de vitesse $\mathbf{u}$ au cours du temps, il se peut que $|\nabla\phi|$ devienne très grand en temps fini (voir figure 9). Par exemple quand la goutte vient à toucher le plan à t_0, alors $\nabla\phi| \to +infty$ lorsque $t \to t_0$. Au voisinage de cet instant, le calcul numérique va rencontrer des problèmes : il sera alors difficile de poursuivre les calculs au delà de t_0. Ainsi, l'idéal est d'avoir pour ϕ une fonction distance signée à chaque instant.

Le problème s'énonce : à un instant t fixé, connaissant $\phi(t)$, construire une distance signée $\tilde{\phi}(t)$ qui ait la même isovaleur zéro : $\Gamma(t) = \{\tilde{\phi}(t) = 0\}$.

Alors $\tilde{\phi}(t)$ est la solution stationnaire $\psi_t(\tau=\infty)$ de

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_t}{\partial \tau}(\mathbf{x},\tau) &= \text{signe}(\phi(\mathbf{x},t))\,(1-|\nabla\psi_t(\mathbf{x},\tau)|), \quad \text{p.p. } (\mathbf{x},\tau)\in\Omega\times]0,+\infty[\\
\psi_t(\mathbf{x},\tau=0) &= \phi(\mathbf{x},t)
\end{aligned}$$

où τ est un pseudo-temps et

$$\text{signe}(\varphi) = \begin{cases} -1 & \text{if } \varphi < 0 \\ 0 & \text{if } \varphi = 0 \\ 1 & \text{if } \varphi > 0 \end{cases}$$

Puisque signe$(0) = 0$, pour tout $\tau \geq 0$, $\psi_t(\mathbf{x},\tau)$ possède la même isovaleur zéro que $\phi(t)$.

Ainsi, il reste à résoudre le problème précédent jusqu'à obtenir un état stationnaire. Or, il suffit d'obtenir une fonction distance signée, c'est-à-dire de gradient unité uniquement dans un voisinage du front.

Pour $\nu > 0$ petit, nous avons atteint un état τ *suffisamment stationnaire* lorsque

$$|\nabla\psi_t(\mathbf{x},\tau)| = 1, \quad \text{pour } \mathbf{x}\in\Gamma_\nu(t) = \{\mathbf{x}\in\Omega;\ |\psi_t(\mathbf{x},\tau)|\leq\nu\}$$

En pratique $\nu \approx ch$, de l'ordre de la taille d'un élément du maillage au voisinage de l'interface ; c est une constante, de l'ordre de 2 ou 3.

Une propriété agréable est que $\psi_t(\tau)$ converge au plus vite vers une solution stationnaire dans la région proche de l'interface. En effet, le problème s'écrit encore

$$\begin{aligned}
\mathbf{w}(\mathbf{x},\tau) &= \text{signe}(\phi(\mathbf{x},t))\,\frac{\nabla\psi_t}{|\nabla\psi_t|}(\mathbf{x},\tau) \\
\left(\frac{\partial\psi_t}{\partial\tau} + \mathbf{w}.\nabla\psi_t\right)(\mathbf{x},\tau) &= \text{signe}(\phi(\mathbf{x},t)) \quad \text{p.p. } (\mathbf{x},\tau)\in\Omega\times]0,+\infty[\\
\psi_t(\mathbf{x},\tau=0) &= \phi(\mathbf{x},t) \quad \text{p.p. } \mathbf{x}\in\Omega
\end{aligned}$$

Il s'agit d'un problème hyperbolique non-linéaire où la *vitesse caractéristique* $\mathbf{w}$ est portée par une direction orthogonale à l'interface, c'est-à-dire par $\mathbf{n}$. Ainsi, $\psi_t(\tau)$ va converger pour $\tau\to+\infty$ avec $|\nabla\psi_t(\mathbf{x},\tau)|\to 1$ assez rapidement lorsque $\mathbf{x}$ est près de l'interface. Puisque la fonction niveau n'a besoin d'être une distance signée qu'au voisinage de l'interface, il n'est pas besoin de résoudre jusqu'à atteindre l'état stationnaire sur tout le domaine ; seul le voisinage de l'interface importe. En pratique, seulement deux ou trois itérations de pas $\Delta\tau \approx \nu \approx ch$ seront nécessaires car de plus la condition initiale $\phi(t)$ sera déjà proche d'une distance signée.

Algorithme **2.2** *(*distance signée*)*
paramètres numériques *:* $\Delta\tau$, K

- $k = 0$ *:* $\psi^{(0)} := \phi(t)$ *est donné.*
- $0 \leq k < K$ *:* $\psi^{(k)}$ *étant connu, calculer*

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{(k)} &:= \text{signe}(\phi(t)) \frac{\nabla \psi^{(k)}}{|\nabla \psi^{(k)}|} \quad \textit{dans } \Omega \\ \psi^{(k+1)} &:= \psi^{(k)} \circ X^{(k)}_{\mathbf{w}^{(k)}} + \Delta\tau \ \text{signe}(\phi(t)) \quad \textit{dans } \Omega \end{aligned}$$

- $k = K$ *:* $\tilde{\phi}(t) := \psi^{(K)}$.

Afin d'éviter toute ambiguïté, nous noterons $X^{(n)}_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})$ la position de la particule au temps t_n qui est à la position $\mathbf{x}$ au temps t_{n+1} et qui a été transportée par le vecteur $\mathbf{w}$.

Ceci conduit à un algorithme global pour le problème, avec deux boucles imbriquées :

Algorithme **2.3** *(*schéma d'Euler implicite avec distance signée*)*
paramètres numériques *:* Δt, $\Delta\tau$, K
- $n = 0$ *:* $(\phi^{(0)}, \mathbf{u}^{(0)}) := (\phi_0, \mathbf{u}_0)$ *est donné.*
- $n \geq 0$ *:* $(\phi^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)})$ *étant connu, calculer* ϕ^* *tel que*

$$\phi^* := \phi^{(n)} \circ X^{(n)}_{\mathbf{u}^{(n)}}$$

ensuite, calculer $\phi^{(n+1)}$ *selon :*
- $k = 0$ *:* $\psi^{(0)} := \phi^*$ *est donné.*
- $0 \leq k < K$ *:* $\psi^{(k)}$ *étant connu, calculer*

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{(k)} &:= \text{signe}(\phi^*) \frac{\nabla \psi^{(k)}}{|\nabla \psi^{(k)}|} \quad \textit{dans } \Omega \\ \psi^{(k+1)} &:= \psi^{(k)} \circ X^{(k)}_{\mathbf{w}^{(k)}} + \Delta\tau \ \text{signe}(\phi^*) \quad \textit{dans } \Omega \end{aligned}$$

- $k = K$ *:* $\phi^{(n+1)} := \psi^{(K)}$.

puis calculer successivement :

$$\begin{aligned} \rho^{(n+1)} &:= \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) H \circ \phi^{(n+1)} \\ \eta^{(n+1)} &:= \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1) H \circ \phi^{(n+1)} \\ \tilde{\kappa}^{(n+1)} &= \mathcal{K}(\nabla \phi^{(n+1)}, \nabla \otimes \nabla \phi^{(n+1)}) \\ \mathbf{f}^{(n+1)} &:= \rho^{(n+1)} \left(\mathbf{g} + \frac{\mathbf{u}^{(n)} \circ X^{(n)}}{\Delta t} \right) + \alpha \tilde{\kappa}^{(n+1)} \, \delta \circ \phi^{(n+1)} \, \nabla \phi^{(n+1)} \end{aligned}$$

et enfin, trouver $\mathbf{u}^{(n+1)}$ *et* $p^{(n+1)}$ *tels que*

$$\begin{array}{rcrcrcll} \dfrac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t} \mathbf{u}^{(n+1)} & - & \mathbf{div}(2\eta^{(n+1)} D(\mathbf{u}^{(n+1)})) & + & \nabla p^{(n+1)} & = & \mathbf{f}^{(n+1)} & \textit{dans } \Omega \\ & - & \operatorname{div} \mathbf{u}^{(n+1)} & & & = & 0 & \textit{dans } \Omega \\ & & & & \mathbf{u}^{(n+1)} & = & \mathbf{u}_\Gamma(t_{n+1}) & \textit{sur } \partial\Omega \end{array}$$

Ici encore, il est possible de calculer exactement l'intégrale de bord ou bien d'introduire une régularisation de l'interface.

3 Mélange de deux fluides

3.1 Définitions et notations

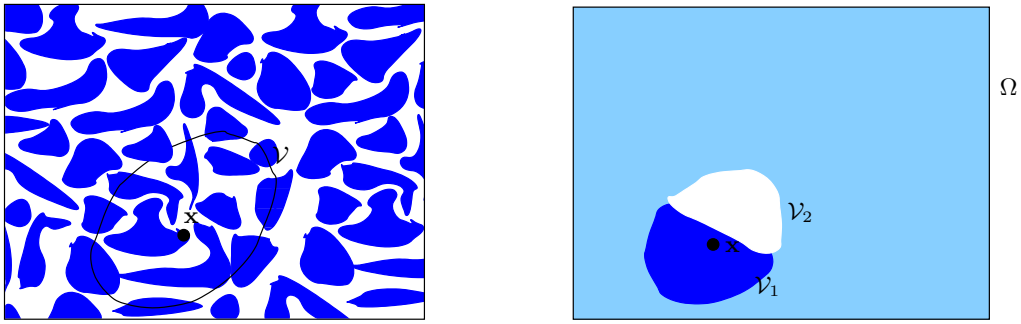


FIG. 10 – Écoulement contenant deux constituants.

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ le domaine ouvert borné occupé par le fluide et $\mathcal{V} \subset \Omega$ un sous-domaine ouvert régulier quelconque, comme représenté sur la figure 10. Le domaine Ω est supposé contenir deux constituants. Soient v_1 et v_2 les volumes occupés par ces deux constituants dans $\mathcal{V}$, et $v = \text{mes}(\mathcal{V}) = v_1 + v_2$ le volume de $\mathcal{V}$. Pour fixer les idées, le constituant 1 sera par exemple de l'encre et le constituant 2 sera de l'eau.

Afin de mieux se représenter ces volumes, le sous-domaine $\mathcal{V}$ peut être partitioné en deux (voir figure 10) :

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 \cup \mathcal{V}_2$$

de façon à avoir uniquement du fluide 1 dans le volume $\mathcal{V}_1$ et uniquement du fluide 2 dans $\mathcal{V}_2$. Ainsi, $v_i = \text{mes}(\mathcal{V}_i)$, $i = 1, 2$.

La **fraction volumique** du fluide 1 dans le volume $\mathcal{V}$ à l'instant t est définie par

$$\psi(\mathcal{V}, t) = \frac{\text{mes}(\mathcal{V}_1)}{\text{mes}(\mathcal{V})}$$

Cette définition étant possible pour tout voisinage $\mathcal{V}$ contenant $\mathbf{x} \in \Omega$, nous définissons la fraction volumique en $\mathbf{x}$ par

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \lim_{\substack{\text{mes}(\mathcal{V})\to 0 \\ \mathbf{x}\in\mathcal{V}}} \frac{\text{mes}(\mathcal{V}_1)}{\text{mes}(\mathcal{V})}$$

La fraction volumique est à valeurs dans l'intervalle $[0, 1]$. Par la suite, et pour des raisons de commodité, cette fraction volumique est renormalisée dans l'intervalle $[-1, 1]$:

$$\varphi = 2\psi - 1$$

Ainsi, $\varphi(\mathbf{x}, t) = 1$ si seul le constituant 1 est présent, et $\varphi(\mathbf{x}, t) = -1$ si seul le constituant 2 est présent en $\mathbf{x}$ à l'instant t.

Soient ρ_1 et $\rho_2 > 0$ les densités, supposées constantes des constituants 1 et 2, respectivement. La densité du mélange est :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \lim_{\text{mes}(\mathcal{V})\to 0, \mathbf{x}\in\mathcal{V}} \frac{\rho_1 \text{mes}(\mathcal{V}_1) + \rho_2 \text{mes}(\mathcal{V}_2)}{\text{mes}(\mathcal{V})} = \rho_1\psi + \rho_2(1-\psi) = \rho_1\frac{1+\varphi}{2} + \rho_2\frac{1-\varphi}{2}$$

Suivant [Boy01], nous supposerons de façon générale que chaque constituant possède un champs de vitesse propre $\mathbf{u}_i$, $i = 1, 2$. La **vitesse du mélange** est défini par la moyenne volumique des champs de vitesse de chaque constituant :

$$\mathbf{u} = \frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1 + \frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2 \tag{12}$$

La **vitesse relative** du fluide 1 par rapport au fluide 2 est notée :

$$\mathbf{w} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2 \tag{13}$$

De (12) et (13), on peut aussi exprimer les vitesses de chaque constituants en fonction de la vitesse du mélange et de la vitesse relative :

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u} + \frac{1-\varphi}{2}\mathbf{w} \tag{14}$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{u} - \frac{1+\varphi}{2}\mathbf{w} \tag{15}$$

3.2 Conservation de la masse

Les conservation de la masse pour les constituant 1 et 2 s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\right) + \text{div}\left(\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1\right) = 0 \tag{16}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\right) + \text{div}\left(\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\right) = 0 \tag{17}$$

En divisant (16) par ρ_1 et (17) par ρ_2, puis en sommant, nous obtenons que la vitesse du mélange, donnée par (12) est à divergence nulle :

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \tag{18}$$

D'autre part, de (16) et en utilisant (14) et (18), il vient :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\varphi + \operatorname{div}\left(\frac{1-\varphi^2}{2}\mathbf{w}\right) = 0 \tag{19}$$

Les deux premiers termes expriment que la fraction volumique φ est soumise à un phénomène de transport pour la vitesse du mélange $\mathbf{u}$. Le troisième terme exprime un phénomène de type diffusion dont le vecteur flux est porté par la vitesse relative du mélange $\mathbf{w}$.

3.3 Conservation de la quantité de mouvement

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\rho_1 \frac{1+\varphi}{2}\left(\frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} + \mathbf{u}_1.\nabla\mathbf{u}_1\right) - \operatorname{div}\sigma_{1,\text{tot}} = \mathbf{f}_1 \tag{20}$$

$$\rho_2 \frac{1-\varphi}{2}\left(\frac{\partial \mathbf{u}_2}{\partial t} + \mathbf{u}_2.\nabla\mathbf{u}_2\right) - \operatorname{div}\sigma_{2,\text{tot}} = \mathbf{f}_2 \tag{21}$$

où $\sigma_{1,\text{tot}}$ et $\sigma_{2,\text{tot}}$ sont les contraintes des constituants dans le mélange et $\mathbf{f}_1$ et $\mathbf{f}_2$ sont les forces volumiques extérieures exercées sur chaque constituant.

3.4 Lois de comportement

Nous supposerons que chaque constituant est un fluide newtonien. Alors $\sigma_{i,\text{tot}}$ dépend de façon affine de $\mathbf{u}_i$:

$$\sigma_{i,\text{tot}} = -p_i + 2\eta_i(\varphi)\Sigma(\mathbf{u}_2)$$

où p_i est la pression partielle de la phase i dans le mélange, η_i est la viscosité du constituant i et pour tout champ de vecteur $\mathbf{v}$:

$$\Sigma(\mathbf{v}) = D(\mathbf{v}) - \frac{1}{3}\operatorname{div}(\mathbf{v}).I$$

Nous supposerons que :

$$\begin{aligned} \eta_1(\varphi) &= \frac{1+\varphi}{2}\eta(\varphi) \\ \eta_2(\varphi) &= \frac{1-\varphi}{2}\eta(\varphi) \end{aligned}$$

où $\eta(\varphi)$ est la viscosité du mélange uniforme de composition φ. Cette viscosité de mélange uniforme dépend généralement de la fraction volumique φ et vérifie $\eta(\varphi = -1) = \eta_0$, où η_0 est la viscosité du deuxième constituant (ex. l'eau ; encre-eau). Par exemple :

$$\eta(\varphi) = \eta_0 e^{a\frac{1+\varphi}{2}}$$

avec $a > 0$ constante. Ainsi, un mélange $eau - glucose$ sera plus visqueux que l'eau ($a > 0$), tandis qu'un mélange eau-glycérine sera moins visqueux que de l'eau ($a < 0$).

Nous supposerons de plus que les pressions partielles de chaque phase sont reliées à la pression totale du mélange $p = p_1 + p_2$ via :

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{1+\varphi}{2} p \\ p_2 &= \frac{1-\varphi}{2} p \end{aligned}$$

3.5 Forces extérieures

Les forces extérieures sont supposées être de la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_1 &= \rho_1 \frac{1+\varphi}{2} (\mathbf{g} - \nabla\mu_1) - \xi(\varphi)\mathbf{w} \\ \mathbf{f}_2 &= \rho_2 \frac{1-\varphi}{2} (\mathbf{g} - \nabla\mu_1) + \xi(\varphi)\mathbf{w} \end{aligned}$$

où $\mathbf{g}$ est le vecteur gravité, constant, $\xi(\varphi)$ est le coefficient de frottement d'un constituant sur l'autre et μ_i sont les **potentiels termodynamiques** des deux constituants, $i = 1, 2$. En particulier, $\xi(\varphi)$ doit s'annuler pour $\varphi = \pm 1$. Un choix classique est

$$\xi(\varphi) = (1 - \varphi^2)^k, \quad 0 < k < 2$$

et $k = 1$ est très classique.

3.6 Potentiels termodynamiques

Les potentiels termodynamiques des deux phases sont données par :

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{1-\varphi}{2\rho(\varphi)} \mu(\varphi) \\ \mu_2 &= \frac{1+\varphi}{2\rho(\varphi)} \mu(\varphi) \end{aligned}$$

avec $\rho(\varphi) = \dfrac{1+\varphi}{2}\rho_1 + \dfrac{1-\varphi}{2}\rho_2$.

Le potentiel thermodynamique $\mu(\varphi)$ est de la forme :

$$\mu(\varphi) = \mathcal{J}'(\varphi)$$

Il dérive de la fonctionnelle $\mathcal{J}$ est appelée **énergie libre** de Cahn-Hilliard :

$$\mathcal{J}(\varphi) = \int_\Omega \left(\frac{\beta}{2}|\nabla\varphi|^2 + \gamma j(\varphi) \right) dx$$

où $\beta, \gamma > 0$ sont des constantes et j est une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$.

De sorte que

$$\mu(\varphi) = \mathcal{J}'(\varphi) = -\beta\Delta\varphi + \gamma j'(\varphi)$$

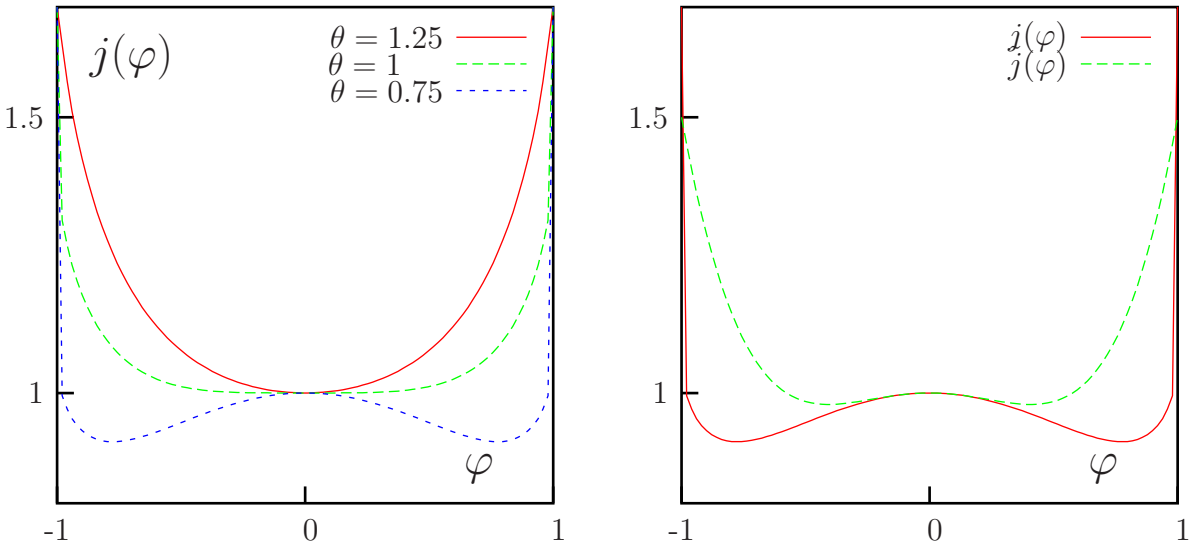


FIG. 11 – Potentiel de Cahn-Hilliard : (a) pour $\theta_c = 1$; (b) et approximation pour $\theta_c = 1$ et $\theta = 3/4$.

La fonction j est appelée **potentiel de Cahn-Hilliard** (voir figure 11.a). Un choix classique est :

$$j(\varphi) = \theta_c(1-\varphi^2) + \theta\left\{(1+\varphi)\log(1+\varphi) + (1-\varphi)\log(1-\varphi)\right\}, \quad -1 \le \varphi \le 1$$

où θ est la température du mélange, supposée constante, et θ_c une température critique.

En particulier

$$\begin{aligned} j''(\varphi) &= -\frac{2(\theta_c\varphi^2+\theta-\theta_c)}{(1+\varphi)(1-\varphi)} \\ &= -2\theta_c\frac{\varphi^2-\varphi_c^2}{(1+\varphi)(1-\varphi)} \end{aligned}$$

où $\varphi_c^2 = (\theta_c - \theta)/\theta_c$. Ainsi j est convexe dans $[-1, 1]$ dès que $\theta \geq \theta_c$.

Le cas intéressant où $\theta < \theta_c$ prévoit que les constituants vont tendre à se séparer dans les régions où $|\varphi| \leq \varphi_c$, de sorte que $|\varphi| > \varphi_c$ presque partout dans Ω.

Une approximation souvent utilisée de ce potentiel est donné par un développement limité de j à l'ordre 4 au voisinage de $\varphi = 0$ (voir figure 11.b) :

$$\tilde{j} = \theta_c - (\theta_c - \theta)\varphi^2 + \theta\varphi^4$$

C'est cette dernière forme qui est utilisée dans la suite.

3.7 Exemple en dimension un

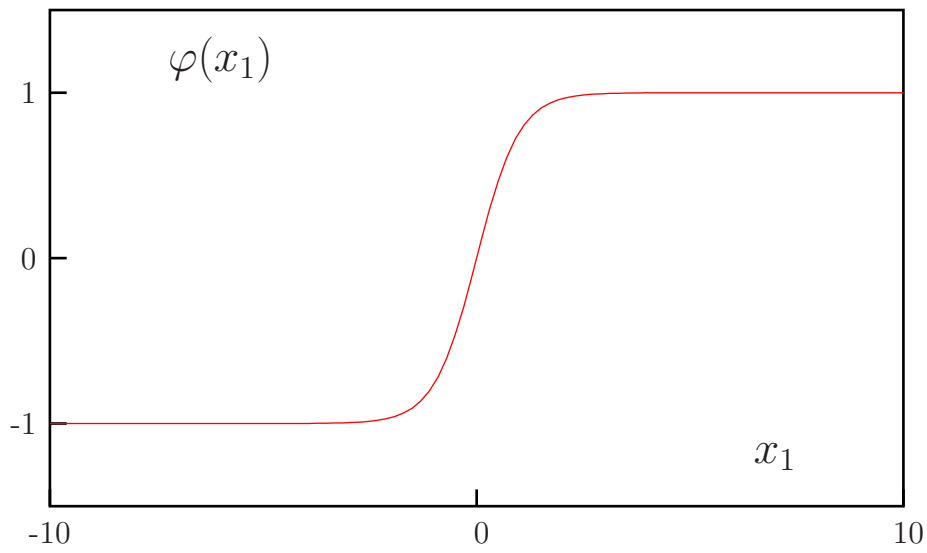


FIG. 12 – Exemple en dimension un ($\beta = \gamma = 1, \theta = 1/2, \theta_c = 3/2$).

Considérons un mélange orienté suivant la direction du plan $x_1 = 0$:

$$\varphi(x_1 = -\infty) = -1, \quad \varphi(x_1 = +\infty) = 1$$

Nous supposons le mélange à l'équilibre : la solution ne dépend plus du temps, ni de x_2 et x_3, et les vitesses des deux constituants sont nulles. Pour cela, nous cherchons un mélange $\varphi(x_1)$ annulant les forces extérieures, c'est-à-dire annulant le terme $\mu(\varphi)$ dans $]-\infty,+\infty[$:

$$-\beta\varphi'' \ -2\gamma(\theta_c-\theta)\varphi+4\gamma\theta\varphi^3=0, \quad \forall\varphi\in\mathbb{R}$$

En choisissant $\theta=\theta_c/3$, la solution est explicite (voir annexe C, page 57) :

$$\varphi(x_1)=\tanh(x_1/\varepsilon)$$

où ε est l'**épaisseur de l'interface** :

$$\varepsilon=\sqrt{\frac{\beta}{2\gamma\theta}}$$

Nous obtenons le coefficient de **tension de surface** en calculant l'énergie contenue dans l'interface :

$$\alpha=\frac{\beta}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi'(x_1)|^2\,dx_1=\sqrt{\frac{8\beta\gamma\theta}{9}}$$

Nous avons obtenu (α,ε) en fonction de $(\beta,\gamma\theta)$. Inversement :

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{3}{2}\alpha\varepsilon\\ \gamma\theta &= \frac{3}{4}\frac{\alpha}{\varepsilon}\end{aligned}$$

Ainsi, à coefficient de tension de surface α fixé, il est possible de faire tendre l'épaisseur de l'interface ε vers zéro. Alors, le modèle de mélange s'interprète comme une méthode de régularisation d'un interface localisé.

3.8 Le système obtenu

Le système obtenu comporte quatre inconnues $(\varphi,\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,p)$ et quatre équations :

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\left(\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1+\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\right).\nabla\varphi+\operatorname{div}\left(\frac{1-\varphi^2}{2}(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2)\right)=0 \tag{22}$$

$$\begin{aligned}&\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\left(\frac{\partial\mathbf{u}_1}{\partial t}+\mathbf{u}_1.\nabla\mathbf{u}_1\right)-\operatorname{div}\left(\frac{1+\varphi}{2}\eta(\varphi)\Sigma(\mathbf{u}_1)\right)+\xi(\varphi)(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2)\\ &=\ \rho_1\frac{1+\varphi}{2}\left(\mathbf{g}-\nabla\left(\frac{1-\varphi}{2\rho}\mu(\varphi)\right)\right)-\nabla\left(\frac{1+\varphi}{2}p\right)\end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned}&\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\left(\frac{\partial\mathbf{u}_2}{\partial t}+\mathbf{u}_2.\nabla\mathbf{u}_2\right)-\operatorname{div}\left(\frac{1-\varphi}{2}\eta(\varphi)\Sigma(\mathbf{u}_2)\right)+\xi(\varphi)(\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_1)\\ &=\ \rho_2\frac{1+\varphi}{2}\left(\mathbf{g}+\nabla\left(\frac{1+\varphi}{2\rho}\mu(\varphi)\right)\right)-\nabla\left(\frac{1-\varphi}{2}p\right)\end{aligned} \tag{24}$$

$$\operatorname{div}\left(\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1+\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\right)=0 \tag{25}$$

Nous sommes tentés de compléter ce système par des conditions initiales et aux limites.

3.9 Équation en vitesse de mélange

En utilisant (14)-(15), le système (22)-(25) s'écrira de faqn équivalente en faisant intervenir $(\mathbf{u}, \mathbf{w})$ au lieu de $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$.

Pour cela, commençons par quelques notations et propriétés. Soit $\mathbf{v}$ un champs de vecteur de composantes v_i, $1 \leq i \leq 3$. Notons $\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$ le tenseur de composantes $v_i v_j$, $1 \leq i, j \leq 3$. Remarquons que le tenseur $\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$ n'est pas symétrique.

LEMME **3.1** *(*divergence de produit tensoriel*)*
Soient $\mathbf{u}$ *et* $\mathbf{v}$ *deux champs de vecteur. Alors, nous avons l'identité*

$$\mathbf{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = \mathbf{v}.\nabla \mathbf{u} + \operatorname{div}(\mathbf{v})\, \mathbf{u}$$

Démonstration : Par expansion sur les composantes :

$$\begin{aligned}
(\mathbf{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}))_i &= \sum_j \partial_j (u_i v_j) \\
&= \sum_j v_j \partial_j u_i + \partial_j v_j u_i \\
&= (\mathbf{v}.\nabla \mathbf{u} + \operatorname{div}(\mathbf{v})\, \mathbf{u})_i
\end{aligned}$$

□

LEMME **3.2** *(*forme conservative*)*
Soient $\mathbf{v}$ *un champs de vecteur et* λ *un champs scalaire. Alors, nous avons l'identité*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda \mathbf{v}) + \mathbf{div}(\lambda \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \lambda \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla \mathbf{v} \right) + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial t} + \operatorname{div}(\lambda \mathbf{v}) \right) \mathbf{v}$$

Démonstration : Par application du lemme précédent. □

En utilisant les équations de conservation de la masse (16)-(17), les équations (20)-(21) de conservation de la quantité de mouvement peuvent s'écrire sous la forme conservative suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{u}_1 \right) + \operatorname{div}\left(\rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 \right) &= \mathbf{f}_1 + \operatorname{div} \sigma_{1,\mathrm{tot}} \\
\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{u}_2 \right) + \operatorname{div}\left(\rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 \right) &= \mathbf{f}_2 + \operatorname{div} \sigma_{2,\mathrm{tot}}
\end{aligned}$$

En faisant la somme des deux équations précédentes, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1+\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\right)+\mathrm{div}\left(\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1\otimes\mathbf{u}_1+\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\otimes\mathbf{u}_2\right)$$
$$+\mathrm{div}(\sigma_{1,\mathrm{tot}}+\sigma_{2,\mathrm{tot}})$$

Après développement :

$$\mathbf{f}_1+\mathbf{f}_2=\rho(\varphi)\mathbf{g}+\frac{\mu(\varphi)}{2}\nabla\varphi-(\rho_1-\rho_2)\frac{1-\varphi^2}{4}\nabla\left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)}\right)$$

où nous avons posé

$$\rho(\varphi)=\rho_1\frac{1+\varphi}{2}+\rho_2\frac{1-\varphi}{2}$$

En utilisant (14)-(15), nous remplaçons $\mathbf{u}_1$ et $\mathbf{u}_2$ par leurs expressions en fonction de $\mathbf{u}$ et $\mathbf{w}$. Par ailleurs, nous négligeons les termes en $\mathbf{w}$ supposés petits devant les termes en $\mathbf{u}$.

$$\begin{aligned}
&\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1+\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\\
&\quad= \rho(\varphi)\mathbf{u}+(\rho_1-\rho_2)\frac{1-\varphi^2}{4}\mathbf{w}\\
&\quad\approx \rho(\varphi)\mathbf{u}\\
&\rho_1\frac{1+\varphi}{2}\mathbf{u}_1\otimes\mathbf{u}_1+\rho_2\frac{1-\varphi}{2}\mathbf{u}_2\otimes\mathbf{u}_2\\
&\quad= \rho(\varphi)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}+\frac{1-\varphi^2}{4}(\rho_1-\rho_2)(\mathbf{u}\otimes\mathbf{w}+\mathbf{w}\otimes\mathbf{u})+\frac{1-\varphi^2}{4}(\rho_1+\rho_2-\rho(\varphi))\mathbf{w}\otimes\mathbf{w}\\
&\quad\approx \rho(\varphi)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}\\
&\sigma_{1,\mathrm{tot}}+\sigma_{2,\mathrm{tot}}\\
&\quad= -p.I+2\eta(\varphi)\Sigma(\mathbf{u})+\frac{\eta(\varphi)}{2}\left(\nabla\varphi\otimes\mathbf{w}+\mathbf{w}\otimes\nabla\varphi-\frac{2}{3}(\mathbf{w}.\nabla\varphi)I\right)\\
&\quad\approx -p.I+2\eta(\varphi)D(\mathbf{u})
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que $\Sigma(\mathbf{u})=D(\mathbf{u})$, puisque $\mathrm{div}(\mathbf{u})=0$.

D'autre part, en repassant de la forme conservative à la forme classique pour $\mathbf{u}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho(\varphi)\mathbf{u})+\mathbf{div}(\rho(\varphi)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})=\rho(\varphi)\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)$$

si bien que l'équation en vitesse moyenne est approchée par :

$$\begin{aligned}
&\rho(\varphi)\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right)-\mathbf{div}(2\eta(\varphi)D(\mathbf{u}))+\nabla p\\
&=\rho(\varphi)\mathbf{g}+\frac{\mu(\varphi)}{2}\nabla\varphi-(\rho_1-\rho_2)\frac{1-\varphi^2}{4}\nabla\left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)}\right)
\end{aligned}$$

3.10 Équation en vitesse relative

En utilisant (14)-(15), le système (22)-(25) devient :

$$\begin{aligned}
\rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\mathbf{u} + \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{w} \right) + \mathbf{u}_1.\nabla \mathbf{u}_1 \right\} - \operatorname{div} \sigma_{1,\text{tot}} &= \mathbf{f}_1 \\
\rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\mathbf{u} - \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{w} \right) + \mathbf{u}_2.\nabla \mathbf{u}_2 \right\} - \operatorname{div} \sigma_{2,\text{tot}} &= \mathbf{f}_2
\end{aligned}$$

Afin d'éliminer les dérivées de $\mathbf{u}$ par rapport au temps, multiplions la première équation par $\rho_2(1-\varphi)/2$ et la deuxième par $\rho_1(1+\varphi)/2$ et soustrayons :

$$\begin{aligned}
\rho_1 \rho_2 \frac{1-\varphi^2}{4} \left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \mathbf{u}_1.\nabla \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2.\nabla \mathbf{u}_2 \right) & \\
- \rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{div}\, \sigma_{1,\text{tot}} + \rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{div}\, \sigma_{2,\text{tot}} & \\
= \rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{f}_1 - \rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{f}_2 &
\end{aligned}$$

Une analyse dimensionnelle montre que le membre de gauche est négligeable, et cette équation sera approchée par

$$0 \approx \rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{f}_1 - \rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{f}_2$$

or

$$\rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \mathbf{f}_1 - \rho_1 \frac{1+\varphi}{2} \mathbf{f}_2 = -\rho(\varphi)\xi(\varphi)\mathbf{w} - \rho_1 \rho_2 \frac{1-\varphi^2}{4} \nabla \left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)} \right)$$

d'où

$$\mathbf{w} \approx -\rho_1 \rho_2 \frac{1-\varphi^2}{4\xi(\varphi)\rho} \nabla \left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho} \right)$$

Le système sera approché par un problème où la vitesse relative pourra être éliminée.

3.11 Problème en vitesse moyenne

En remplaçant l'expression précédente dans (19), nous obtenons le système de trois équations à trois inconnues $(\varphi, \mathbf{u}, p)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla \varphi \qquad -\operatorname{div} \left(\frac{b(\varphi)}{\rho(\varphi)} \nabla \left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)} \right) \right) &= 0 \\
\rho(\varphi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla \mathbf{u} \right) \quad -\mathbf{div}(2\eta(\varphi) D(\mathbf{u})) + \nabla p &= \mathbf{f}(\varphi) \\
\operatorname{div} \mathbf{u} &= 0
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
\rho(\varphi) &= \rho_1 \frac{1+\varphi}{2} + \rho_2 \frac{1-\varphi}{2} \\
b(\varphi) &= \rho_1 \rho_2 \frac{(1-\varphi^2)^2}{8\xi(\varphi)} \\
\mu(\varphi) &= -\beta\Delta\varphi + 4\gamma\theta\varphi^3 - 2\gamma(\theta_c - \theta)\varphi \\
\mathbf{f}(\varphi) &= \rho(\varphi)\mathbf{g} + \frac{\mu(\varphi)}{2}\nabla\varphi - (\rho_1 - \rho_2)\frac{1-\varphi^2}{4}\nabla\left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)}\right)
\end{aligned}$$

où $\rho_1, \rho_2, \beta, \gamma, \theta, \theta_c$ des constantes positives. et $\xi(\varphi)$ et $\eta(\varphi)$ sont des fonctions données, positives, pouvant être constantes.

Nous complétons ce système par des conditions initiales

$$\begin{aligned}
\varphi(t=0) &= \varphi_0 \text{ dans } \Omega \\
\mathbf{u}(t=0) &= \mathbf{u}_0 \text{ dans } \Omega
\end{aligned}$$

et aux limites :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}}(t) &= 0 \text{ sur }]0,T[\times\partial\Omega \\
\frac{\partial\mu(\varphi)}{\partial\mathbf{n}}(t) &= 0 \text{ sur }]0,T[\times\partial\Omega \\
\mathbf{u}(t) &= \mathbf{u}_\Gamma(t) \text{ sur }]0,T[\times\partial\Omega
\end{aligned}$$

3.12 Algorithme de résolution

Utilisons le schéma d'Euler implicite du type de celui introduit paragraphe 1.6, page 7, avec :

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y} &= \begin{pmatrix} \varphi \\ \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix} \\
\mathcal{M}(\mathcal{Y}) &= \mathrm{diag}(1,\ \rho(\varphi),\ 0) \\
\mathcal{F}(\mathcal{Y}) &= \begin{pmatrix} -\mathrm{div}\left(\frac{b(\varphi)}{\rho(\varphi)}\nabla\left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)}\right)\right) \\ -\mathbf{div}(2\eta(\varphi)D(\mathbf{u})) + \nabla p - \mathbf{f}(\varphi) \\ -\mathrm{div}\,\mathbf{u} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ainsi, le schéma :

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}(\mathcal{Y}^{n+1})\frac{\mathcal{Y}^{(n+1)} - \mathcal{Y}^{(n)} \circ X^{(n)}}{\Delta t} + \mathcal{F}(\mathcal{Y}^{(n+1)}) &= 0 \\
\mathcal{Y}^{(0)} &= \mathcal{Y}_0
\end{aligned}$$

conduit à :

ALGORITHME **3.1** *(*schéma d'Euler implicite pour le mélange*)*
paramètre numérique *:* Δt
- $n = 0$ *:* $(\varphi^{(0)}, \mathbf{u}^{(0)}) := (\varphi_0, \mathbf{u}_0)$ *est donné.*
- $n \geq 0$ *:* $(\varphi^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)})$ *étant connu, calculer* $\varphi^{(n+1)}$ *tel que*

$$\begin{aligned}
\frac{\varphi^{(n+1)}}{\Delta t} - \operatorname{div}\left(\frac{b(\varphi^{(n+1)})}{\rho(\varphi^{(n+1)})}\nabla\left(\frac{\mu(\varphi^{(n+1)})}{\rho(\varphi^{(n+1)})}\right)\right) &= \frac{\varphi^{(n)} \circ X^{(n)}_{\mathbf{u}^{(n)}}}{\Delta t} && \textit{dans } \Omega \\
\frac{\partial \varphi^{(n+1)}}{\partial \mathbf{n}} &= 0 && \textit{sur } \partial\Omega \\
\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}(\mu(\varphi^{(n+1)})) &= 0 && \textit{sur } \partial\Omega
\end{aligned}$$

puis calculer explicitement :

$$\begin{aligned}
\rho^{(n+1)} &:= \rho(\varphi^{(n+1)}) \\
\eta^{(n+1)} &:= \eta(\varphi^{(n+1)}) \\
\mathbf{f}^{(n+1)} &:= \mathbf{f}(\varphi^{(n+1)})
\end{aligned}$$

et enfin trouver $(\mathbf{u}^{(n+1)}, p^{(n+1)})$ *tels que*

$$\begin{aligned}
\frac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t}\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{div}(2\eta^{(n+1)})D(\mathbf{u}^{(n+1)})) + \nabla p^{(n+1)} &= \frac{\rho^{(n+1)}}{\Delta t}\mathbf{u}^{(n)} \circ X^{(n)}_{\mathbf{u}^{(n)}} + \mathbf{f}^{(n+1)} \ \textit{dans } \Omega \\
-\operatorname{div} \mathbf{u}^{(n+1)} &= 0 \ \textit{dans } \Omega \\
\mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{u}_\Gamma(t_{n+1}) \ \textit{sur } \partial\Omega
\end{aligned}$$

Comme précédemment, nous avons noté $X^{(n)}_{\mathbf{u}^{(n)}}(\mathbf{x})$ la position de la particule au temps t_n qui est à la position $\mathbf{x}$ au temps t_{n+1} et qui a été transportée par le vecteur $\mathbf{u}^{(n)}$.

Le second sous-problème est un problème de type Stokes que nous savons résoudre.

Le premier problème est un problème de type diffusion-convection non-linéaire d'ordre quatre en φ, ce qui fait sa particularité.

3.13 Sous-problème de Cahn-Hilliard

(CH) : chercher φ tel que

$$
\begin{aligned}
\frac{\varphi}{\Delta t} - \operatorname{div}\left(\frac{b(\varphi)}{\rho(\varphi)}\nabla\left(\frac{\mu(\varphi)}{\rho(\varphi)}\right)\right) &= f \quad \text{dans } \Omega \\
\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}} &= 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \\
\frac{\partial}{\partial\mathbf{n}}(\mu(\varphi)) &= 0 \quad \text{sur } \partial\Omega
\end{aligned}
$$

où f est donnés.

Afin d'abaisser le degré (quatre) de ce problème, nous introduisons la variable auxiliaire

$$
\lambda = \frac{1}{\rho(\varphi)}\left(-\beta\Delta\varphi + \gamma j(\varphi)\right)
$$

si bien que le problème s'énonce sous forme mixte :

(CHM) : chercher (λ, φ) tels que

$$
\begin{array}{rcrcll}
\rho(\varphi)\lambda & + & \beta\Delta\varphi & = & \gamma j(\varphi) & \text{dans } \Omega \\
\operatorname{div}\left(\dfrac{b(\varphi)}{\rho(\varphi)}\nabla\lambda\right) & - & \dfrac{\varphi}{\Delta t} & = & -f & \text{dans } \Omega \\
 & & \dfrac{\partial\lambda}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega \\
 & & \dfrac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega
\end{array}
$$

Il s'agit d'un problème quasi-linéaire : les coefficients et le second-membre dépendent de φ.

Soit $\mathcal{G}$ l'opérateur linéaire qui à (b^*, ρ^*, g^*) associe $\varphi = \mathcal{G}(b^*, \rho^*, g^*)$ tel que (λ, φ) soit solution du problème linéaire :

$$
\begin{array}{rcrcll}
\rho^*\lambda & + & \beta\Delta\varphi & = & g^* & \text{dans } \Omega \\
\operatorname{div}\left(\dfrac{b^*}{\rho^*}\nabla\lambda\right) & - & \dfrac{\varphi}{\Delta t} & = & -f & \text{dans } \Omega \\
 & & \dfrac{\partial\lambda}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega \\
 & & \dfrac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega
\end{array}
$$

Posons

$$
\mathcal{F}(\varphi) \stackrel{\text{déf}}{=} \mathcal{G}(b(\varphi), \rho(\varphi), \gamma j'(\varphi))
$$

Nous cherchons alors φ satisfaisant

$$
\varphi = \mathcal{F}(\varphi)
$$

Il s'agit d'un problème de point fixe, que nous pouvons résoudre par

$$
\begin{array}{rcl}
\varphi^{(0)} & & \text{donné} \\
\varphi^{(k+1)} & := & \mathcal{F}(\varphi^{(k)}),\ k \geq 0
\end{array}
$$

Soit encore, après expansion des notations

Algorithme **3.2** *(*point fixe pour Cahn-Hilliard*)*
paramètre numérique *: k^**
- $k = 0$ *: $\varphi^{(0)}$ donné*
- $0 \leq k \leq k^*$ *: $\varphi^{(k)}$ connu, calculer explicitement :*

$$\begin{aligned} b^{(k)} &:= b(\varphi^{(k)}) \\ \rho^{(k)} &:= \rho(\varphi^{(k)}) \\ g^{(k)} &:= \gamma j'(\varphi^{(k)}) \end{aligned}$$

puis trouver $(\lambda^{(k+1)}, \varphi^{(k+1)})$ tels que

$$\begin{array}{rcrcll} \rho^{(k)}\lambda^{(k+1)} & + & \beta\Delta\varphi^{(k+1)} & = & g^{(k)} & \textit{dans } \Omega \\ \operatorname{div}\left(\dfrac{b^{(k)}}{\rho^{(k)}}\nabla\lambda^{(k+1)}\right) & - & \dfrac{\varphi^{(k+1)}}{\Delta t} & = & -f & \textit{dans } \Omega \\ & & \dfrac{\partial\lambda^{(k+1)}}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 & \textit{sur } \partial\Omega \\ & & \dfrac{\partial\varphi^{(k+1)}}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 & \textit{sur } \partial\Omega \end{array}$$

3.14 Discrétisation du sous-problème du quatrième ordre

Dans ce paragraphe, l'indice k de l'itération du point fixe est fixé, et sera omis lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté.

Notons $(.,.)$ le produit scalaire de L^2

$$(\xi, \mu) = \int_\Omega \xi\mu \, dx$$

La formulation du sous-problème linéaire s'écrit :

(FVQ) : trouver $(\lambda, \varphi) \in (H^1(\Omega))^2$ tels que

$$\begin{array}{rcrcl} (\rho\lambda, \mu) & - & \beta(\nabla\varphi, \nabla\mu) & = & (g, \mu), \quad \forall\mu \in H^1(\Omega) \\ -\left(\dfrac{b}{\rho}\nabla\lambda, \nabla\xi\right) & - & \dfrac{1}{\Delta t}(\varphi, \xi) & = & -(f, \xi), \quad \forall\xi \in H^1(\Omega) \end{array}$$

où b, ρ, f et g sont des données définies dans Ω, et Δt et β sont des constantes positives.

Supposons que les vitesses et les pressions soient approchés par la méthode des éléments finis de Taylor-Hood : P_2 continu pour la vitesse et P_1 continu pour la pression. Introduisons $\Phi_h \subset H^1(\Omega)$ l'espace de dimension finie :

$$\Phi_h = \{\varphi_h \in C^0(\bar{\Omega});\ \varphi_{h|K} \in P_1,\ \forall K \in \mathcal{T}_h\}$$

déjà utilisé au paragraphe 2.9, page 22. C'est le même espace que pour les pressions : le potentiel μ se comporte comme une pression.

L'approximation par éléments finis s'écrit

$(FVQ)_h$: trouver $(\lambda_h, \varphi_h) \in \Phi_h^2$ tels que

$$\begin{array}{rcrcl} (\rho\lambda_h, \xi_h) & - & \beta(\nabla\varphi_h, \nabla\xi_h) & = & (g, \xi_h), \quad \forall \xi_h \in \Phi_h \\ -\left(\dfrac{b}{\rho}\nabla\lambda_h, \nabla\mu_h\right) & - & \dfrac{1}{\Delta t}(\varphi_h, \mu_h) & = & -(f, \mu_h), \quad \forall \mu_h \in \Phi_h \end{array}$$

3.15 Résolution matricielle

Soit $n = \dim(\Phi_h)$ la dimension de Φ_h, et $(\xi_i)_{1\leq i\leq n}$ la base de Φ_h associée au sommets du maillage $\mathcal{T}_h$:

$$\xi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$$

où $\mathbf{x}_i$ est le i-ème sommet du maillage.

Dans la pratique, on évalue les intégrales sur Ω à l'aide de la formule des trapèzes. Pour le produit scalaire L^2 :

$$\begin{aligned} (\mu, \xi) &= \int_\Omega \mu\xi \, dx \\ &= \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \int_K \mu\xi \, dx \\ &= \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \int_K \mu\xi \, dx \\ &\approx \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \frac{\mathrm{mes}(K)}{3} \sum_{r=1}^{3} \mu(\mathbf{x}_{r,K})\xi(\mathbf{x}_{r,K}) \end{aligned}$$

On introduit la forme bilinéaire notée $(.,.)_h$:

$$(\mu_h, \xi_h)_h = \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \frac{\mathrm{mes}(K)}{3} \sum_{r=1}^{3} \mu_h(\mathbf{x}_{r,K})\xi_h(\mathbf{x}_{r,K}), \quad \forall \mu_h, \xi_h \in \Phi_h$$

Le problème approché avec formule des trapèzes est obtenu en remplaçant les produits scalaires $(.,.)$ de L^2 par $(.,.)_h$:

$(FVQ)_h^*$: trouver $(\lambda_h, \varphi_h) \in \Phi_h^2$ tels que

$$\begin{array}{rcrcl} (\rho\lambda_h, \xi_h)_h & - & \beta(\nabla\varphi_h, \nabla\xi_h)_h & = & (g, \xi_h)_h, \quad \forall \xi_h \in \Phi_h \\ -\left(\dfrac{b}{\rho}\nabla\lambda_h, \nabla\mu_h\right)_h & - & \dfrac{1}{\Delta t}(\varphi_h, \mu_h)_h & = & -(f, \mu_h)_h, \quad \forall \mu_h \in \Phi_h \end{array}$$

On décompose les inconnues (λ_h, φ_h) sur la base de Φ_h :

$$\begin{aligned}
\lambda_h(\mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \xi_j(\mathbf{x}) \\
\varphi_h(\mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^{n} \varphi_j \xi_j(\mathbf{x})
\end{aligned}$$

Le problème admet la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} R & -A \\ -C & -M/\Delta t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\lambda] \\ [\varphi] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G \\ -F \end{pmatrix}$$

où on a noté $[\lambda] = (\lambda_i)_{1 \leq i \leq n}$ et $[\varphi] = (\varphi_i)_{1 \leq i \leq n}$ les vecteurs des degrés de liberté de λ_h et φ_h et

$$\begin{aligned}
M_{i,j} &= (\xi_h, \xi_j)_h \\
R_{i,j} &= (\rho \xi_h, \xi_j)_h \\
A_{i,j} &= \beta \left(\nabla \xi_h, \nabla \xi_j\right)_h \\
C_{i,j} &= \left(\frac{b}{\rho} \nabla \xi_h, \nabla \xi_j\right)_h
\end{aligned}$$

Remarquant que $\xi_i(\mathbf{x}_{r,K})$ vaut 1 si $\mathbf{x}_{r,K}$ est le i-ème sommet du maillage, et 0 sinon, les matrices M et R sont diagonales :

$$\begin{aligned}
M_{i,i} &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h, \mathbf{x}_i \in K} \frac{\text{mes}(K)}{3} \\
R_{i,i} &= M_{i,i} \rho(\mathbf{x}_i)
\end{aligned}$$

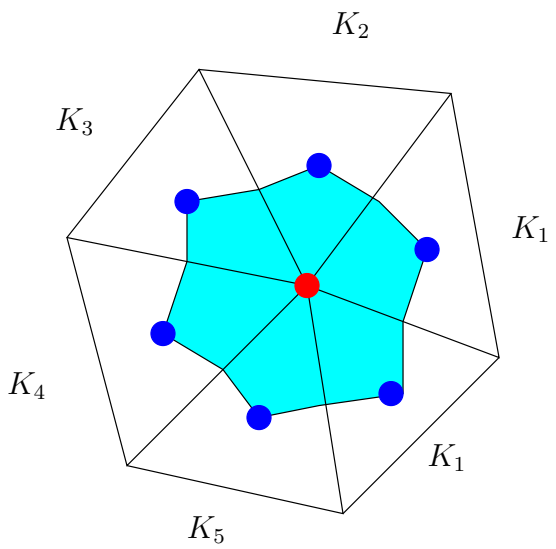


FIG. 13 – Cellule centrée autour d'un sommet du maillage.

Le coefficient $M_{i,i}$ correspond à l'aire de la cellule C_i centrée autour du sommet $\mathbf{x}_i$. La cellule C_i contient un tiers des éléments adjacents au sommet $\mathbf{x}_i$ (voir figure 13). Une telle cellule est obtenue en reliant les barycentres des éléments adjacents au sommet $\mathbf{x}_i$ avec les milieux des arêtes.

Les second membres sont donnés par

$$\begin{aligned} F_{i,i} &= M_{i,i} f(\mathbf{x}_i) \\ G_{i,i} &= M_{i,i} g(\mathbf{x}_i) \end{aligned}$$

Ainsi

$$\begin{aligned} R &= M \mathrm{diag}([\rho]) \\ F &= M[f] \\ G &= M[g] \end{aligned}$$

où $[\rho] = (\rho(\mathbf{x}_i))_{1 \leq i \leq n}$, $[f] = (f(\mathbf{x}_i))_{1 \leq i \leq n}$ et $[g] = (g(\mathbf{x}_i))_{1 \leq i \leq n}$.

$$\begin{pmatrix} R & -A \\ -C & -M/\Delta t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\lambda] \\ [\varphi] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M[g] \\ -M[f] \end{pmatrix}$$

On peut éliminer $[\lambda]$ du système en inversant la matrice R explicitement : $R^{-1} = M^{-1} *$ diag$([1/\rho])$, ce qui donne :

$$\left(\frac{M}{\Delta t} + CR^{-1}A \right) [\varphi] = M[f] - CR^{-1}M[g]$$

La matrice $M/Deltat+CR^{-1}A$ peut donc être formée explicitement, et le système matriciel correspondant est alors résolu pour obtenir Y, le vecteur des degrés de liberté de φ_h.

3.16 Discrétisation des flux

Dans ce paragraphe, on pose $\nu = b/\rho$. La discrétisation de la forme bilinéaire $a(\xi, \mu) = (\nu \nabla \xi, \nabla \mu)$ par la méthode précédente conduit au schéma différences finies en dimension un :

$$\left\{ \begin{array}{ccccc} h^2 \rho_i \lambda_i & + & -\beta(-\varphi_{i+1} + 2\varphi_i - \varphi_{i-1}) & = & h^2 g_i \\ \tilde{\nu}_{i+\frac{1}{2}}(\lambda_{i+1} - \lambda_i) - \tilde{\nu}_{i-\frac{1}{2}}(\lambda_i - \lambda_{i-1}) & - & \dfrac{h^2}{\Delta t} \varphi_i & = & -h^2 f_i \end{array} \right.$$

avec

$$\tilde{\nu}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\nu_i + \nu_{i+1}}{2}$$

obtenu par une moyenne arithmétique, et $\nu_i = \nu(\mathbf{x}_i)$

Mais on souhaiterait obtenir le schéma suivant :

$$\left\{\begin{array}{rcrcl} h^2\rho_i\lambda_i & + & \beta(\varphi_{i+1}-2\varphi_i+\varphi_{i-1}) & = & h^2 g_i \\ \nu_{i+\frac{1}{2}}(\lambda_{i+1}-\lambda_i)-\nu_{i-\frac{1}{2}}(\lambda_i-\lambda_{i-1}) & - & \dfrac{h^2}{\Delta t}\varphi_i & = & -h^2 f_i \end{array}\right.$$

avec $\nu_{i+\frac{1}{2}}$ obtenu par une moyenne harmonique

$$\nu_{i+\frac{1}{2}} = \frac{2}{\dfrac{1}{\nu_{i+1}}+\dfrac{1}{\nu_i}}$$

Les flux $\mathbf{q} = \nu\nabla\lambda$ ont été calculés par un schéma centré à l'ordre deux. Ce dernier schéma est beaucoup plus précis lorsque $\nu = b/\rho$ varie fortement. Il est possible d'obtenir ce schéma par

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcl} \dfrac{h^2}{2}\left(\dfrac{1}{\nu_{i+1}}+\dfrac{1}{\nu_i}\right)q_{i+\frac{1}{2}} & - & h(\lambda_{i+1}-\lambda_i) & & & = & 0 \\ h(q_{i+\frac{1}{2}}-q_{i-\frac{1}{2}}) & & & - & \dfrac{h^2}{\Delta t}\varphi_i & = & -h^2 f_i \\ & & -h^2\rho_i\lambda_i & - & \beta(\varphi_{i+1}-2\varphi_i+\varphi_{i-1}) & = & -h^2 g_i \end{array}\right.$$

Ce dernier schéma peut être généralisé comme la discrétisation du problème :

(M) : trouver $(\mathbf{q},\lambda,\varphi)$ tels que

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcl} \dfrac{1}{\nu}\mathbf{q} & - & \nabla\lambda & & & = & 0 \text{ dans } \Omega \\ \operatorname{div}\mathbf{q} & & & - & \dfrac{1}{\Delta t}\varphi & = & -f \text{ dans } \Omega \\ & & -\rho\lambda & - & \beta\Delta\varphi & = & -g \text{ dans } \Omega \\ & & \dfrac{\partial\lambda}{\partial\mathbf{n}} & = & \dfrac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}} & = & 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{array}\right.$$

en ayant soin d'utiliser la formule des trapèzes. Les flux $\mathbf{q}$ sont approchés par des fonctions discontinues constantes par éléments :

$$Z_h = \{\mathbf{z}_h \in (L^2(\bar{\Omega}))^d;\ \mathbf{z}_{h|K} \in (P_0)^d,\ \forall K \in \mathcal{T}_h\}$$

Le problème approché s'énonce

$(FVM)_h^*$: trouver $(\mathbf{q}_h,\lambda_h,\varphi_h) \in Z_h \times \Phi_h^2$ tels que

$$\begin{array}{rcrcrcl} \left(\dfrac{1}{\nu}\mathbf{q}_h,\mathbf{z}_h\right)_h & - & (\mathbf{z}_h,\nabla\lambda_h)_h & & & = & 0,\quad \forall \mathbf{z}_h \in Z_h \\ -(\mathbf{q}_h,\nabla\mu_h)_h & & & - & \dfrac{1}{\Delta t}(\varphi_h,\mu_h)_h & = & -(f,\mu_h)_h,\quad \forall \mu_h \in \Phi_h \\ & & -(\rho\lambda_h,\xi_h)_h & + & \beta(\nabla\varphi_h,\nabla\xi_h)_h & = & -(g,\xi_h)_h,\quad \forall \xi_h \in \Phi_h \end{array}$$

Soit $m = \dim(Z_h)$ la dimension de Z_h. Si n_e est le nombre d'éléments du maillage, on a $m = dn_e$. Une base $(\mathbf{z}_i)_{1\leq i\leq m}$ est donnée par

$$\begin{aligned}
\mathbf{z}_{d(p-1)+1}(\mathbf{x}) &= (I_{K_p}(\mathbf{x}), 0, \ldots, 0) \\
\mathbf{z}_{d(p-2)+2}(\mathbf{x}) &= (0, I_{K_p}(\mathbf{x}), \ldots, 0) \\
&\ldots \\
\mathbf{z}_{dp}(\mathbf{x}) &= (0, \ldots, 0, I_{K_p}(\mathbf{x})
\end{aligned}$$

avec $1 \leq p \leq n_e$ et où I_{K_p} est la fonction indicatrice du p-ème élément K_p. Décomposons $\mathbf{q}_h$ sur la base $((\mathbf{z}_i)_{1\leq i\leq m}$:

$$\mathbf{q}_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} q_i \mathbf{z}_i(\mathbf{x})$$

et notons $[q] = (q_i)_{1\leq i\leq m}$ le vecteur de ses composantes. Le problème admet la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} D & B^T & 0 \\ B & 0 & -M/\Delta t \\ 0 & -R & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [q] \\ [\lambda] \\ [\varphi] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -M[f] \\ -M[g] \end{pmatrix}$$

où

$$\begin{aligned}
D_{i,j} &= \left(\frac{1}{\nu}\mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j\right)_h, \quad 1 \leq i, j \leq m \\
B_{i,j} &= -\left(\mathbf{z}_j, \nabla\xi_i\right)_h, \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq m
\end{aligned}$$

La matrice B est rectangulaire $n \times m$ tandis que D est diagonale et

$$D_{i,i} = \frac{\mathrm{mes}(K_p)}{d+1} \sum_{r=1}^{d+1} \frac{1}{\nu(\mathbf{x}_{r,K_p})}, \quad p = 1 + \lfloor (i-1)/d \rfloor$$

Nous pouvons éliminer successivement les variables $[\lambda]$ et $[q]$ du système :

$$\begin{aligned}
[\lambda] &= R^{-1}(A\,[\varphi] + M\,[g] \\
[q] &= -D^{-1}B^T\,[\lambda] \\
&= -D^{-1}B^T R^{-1} A\,[\varphi] - D^{-1}B^T R^{-1} M\,[g]
\end{aligned}$$

si bien que

$$\left(\frac{M}{\Delta t} + BD^{-1}B^T R^{-1} A\right)[\varphi] = M\,[f] - BD^{-1}B^T R^{-1} M[g]$$

Ce problème est semblable au précédent, mais où la matrice C est ici remplacée par $BD^{-1}B^T$. Ce schéma est plus précis pour le calcul des flux. Il est dit conservatif : c'est l'approximation par volume finis. L'approche éléments finis permet d'augmenter le degré, par exemple P_2 continu pour φ et λ et P_1 discontinu pour $\mathbf{q}$.

Références

[BF91] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and hybrid finite element methods.* Springer Verlag, 1991.

[Boy01] F. Boyer. *Écoulements diphasiques de type Cahn-Hilliard.* thèse de l'université de Bordeaux 1, 2001.

[CHMO95] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. submitted to *J. Comput. Phys.*, 1995.

[DPT01] O. Devillers, S. Pion, and M. Teillaud. Walking in a triangulation. *Rapport de recherche INRIA 4120,* `ftp://ftp.inria.fr/INRIA/publication/RR/RR-4120.ps.gz`, 2001.

[FB74] R. A. Finkel and J. L. Bentley. Quad tree, a data structure for retrieval on composite keys. *Acta Informatica*, pages 1–9, 1974.

[FG83] M. Fortin and R. Glowinski. *Augmented Lagrangian methods – application to the numerical solution of boundary-value problems.* Elsevier, 1983.

[GR86] V. Girault and P. A. Raviart. *Finite element methods for the Navier-Stokes equations – Theory and algorithms.* Springer Verlag, 1986.

[Hec97] F. Hecht. *Bidimensional anisotropic mesh generator.* INRIA, `http://www-rocq.inria.fr/gamma/cdrom/www/bamg/eng.htm`, 1997.

[HT74] P. Hood and G. Taylor. Navier-Stokes equations using mixed interpolation. In Finite element in flow problems*, Oden ed., UAH Press*, 1974.

[Lio68] J. L. Lions. *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non-linéaires.* Dunod, 1968.

[PHBO01] O. Pironneau, F. Hecht, D. Bernardi, and K. Ohtsuka. FREEFREM+ : an implementation of a language dedicated to the finite element method. `http://www-rocq.inria.fr/Frederic.Hecht/FreeFemPlus.htm`, 2001.

[Pir88] O. Pironneau. *Méthode des éléments finis pour les fluides.* Masson, 1988.

[Pir00] O. Pironneau. The method of characteristics with gradients and integrals. *Proc Euro days 2000, J. Periaux ed., Wiley 2001,* `http://www.ann.jussieu.fr/~pironneau/publi/publications/mantel.pdf`, 2000.

[RT01] H. Rui and M. Tabata. A second order characteristic finite element scheme for convection diffusion problems. *Numer. Math. (*to appear*)*, 2001.

[Sam90] H. Samet. *The design and analysis of spatial data structure.* Addison-Wesley, 1990.

[SR01a] P. Saramito and N. Roquet. **rheolef** *: A finite element environment, i.e. some* `C++` *classes and unix commands.* `http://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef`, 2001.

[SR01b] P. Saramito and N. Roquet. **rheolef** *: User's manual, (*64 pages*).* `http://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef/usrman.ps.gz`, 2001.

Table des matières

1 Introduction aux équations de Navier-Stokes **3**

1.1 Conservation de la masse 3

1.2 Conservation de la quantité de mouvement 4

1.3 Loi de comportement 5

1.4 Hypothèse d'incompressibilité 6

1.5 Problème aux limites 7

1.6 Approximation en temps 7

1.7 Problème de Stokes 9

1.8 Approximation en espace du problème de Stokes 10

1.9 Résolution du problème de Stokes discret 10

2 Interface entre deux fluides non miscibles **14**

2.1 Équation de l'interface 14

2.2 Équation sur l'interface 15

2.3 Conservation de la masse 15

2.4 Conservation de la quantité de mouvement 16

2.5 Problème aux limites 16

2.6 Formulation par ensemble de niveaux 16

2.7 Discrétisation en temps 19

2.8 Exemple d'initialisation de la fonction de niveau 21

2.9 Évaluation de l'intégrale de bord 22

2.10 Régularisation pour l'intégrale de bord 23

2.11 Fonction de niveau comme fonction distance 25

3 Mélange de deux fluides **29**

3.1 Définitions et notations 29

3.2 Conservation de la masse 30

3.3 Conservation de la quantité de mouvement 31

3.4 Lois de comportement 31

3.5 Forces extérieures 32

3.6 Potentiels termodynamiques 32

3.7 Exemple en dimension un 34

3.8 Le système obtenu 35

3.9 Équation en vitesse de mélange 36

3.10 Équation en vitesse relative 38

3.11 Problème en vitesse moyenne 38

3.12 Algorithme de résolution 39

3.13 Sous-problème de Cahn-Hilliard 40

3.14 Discrétisation du sous-problème du quatrième ordre 42

3.15 Résolution matricielle 43

3.16 Discrétisation des flux 45

A Démonstration du théorème 2.1 **53**

B Expression de la courbure **56**

C Résolution de l'équation de mélange en dimension un **57**

D Méthode des caractéristiques **58**

D.1 Notations 58

D.2 Approximation d'ordre un en temps 58

D.3 Approximation d'ordre deux en temps 59

D.4 Interpolation sur un maillage 60

D.5 Dimension un, maillage uniforme 61

D.6 Dimension un, cas général 61

D.7 Dimension deux et trois, maillages structurés 61

D.8 Dimension deux et trois, cas général 62

D.9 Accélération par les arbres de recherche 63

A Démonstration du théorème 2.1

La démonstration du théorème 2.1, présenté page 18 est ici présentée.

Il s'agit d'une extension au cas tridimensionnel de la démonstration proposée par [CHMO95] pour le cas bidimensionnel.

Soit $t \in]0, t[$ fixé. Afin d'alléger les notations, et lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté, nous omettrons la dépendance en t.

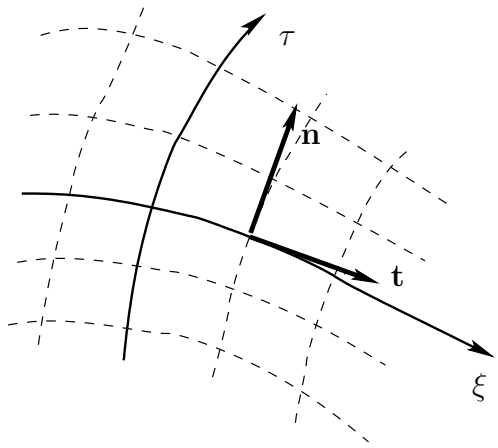


FIG. 14 – Prolongement de la paramétrisation de l'interface en un réseau orthogonal.

LEMME **A.1** *(prolongement)*
Soit $\phi \in C^1(\bar{\Omega})$. Alors la paramétrisation $\mathcal{X}(s)$ de l'interface $S = \{\mathbf{x} \in \Omega;\ \phi(\mathbf{x}) = 0\}$ est prolongeable en une transformation $\tilde{\mathcal{X}}(\xi, \tau)$ sur un voisinage de S.

Démonstration : Nous allons montrer qu'il existe $\tau_0 > 0$ tel que l'application $\tilde{\mathcal{X}}$ définie par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_i}{\partial \tau}(\xi, \tau) &= \frac{\partial \phi}{\partial x_i}(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, \tau)),\ 1 \leq i \leq 3,\ \xi \in \Sigma,\ \tau \in]-\tau_0, \tau_0[\\ \tilde{\mathcal{X}}(\xi, \tau{=}0) &= \mathcal{X}(\xi),\ \xi \in \Sigma \end{aligned}$$

est bijective.

Pour cela, calculons le déterminant de la jacobienne de la transformation $\tilde{\mathcal{X}}$:

$$D(\xi, \tau) = \text{dét} \left(\frac{\partial(\tilde{\mathcal{X}}_1, \tilde{\mathcal{X}}_2, \tilde{\mathcal{X}}_3)}{\partial(\xi_1, \xi_2, \tau)} \right) (\xi, \tau)$$

De la définition de $\tilde{\mathcal{X}}$, il vient, d'une part :

$$\left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_1}{\partial \tau}, \frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_2}{\partial \tau}, \frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_3}{\partial \tau}\right)(\xi, \tau) = \nabla\phi(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, 0)) + \mathcal{O}(\tau) = |\nabla\phi(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, 0))|\, \mathbf{n}(\xi) + \mathcal{O}(\tau)$$

car $\nabla\phi(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, 0))$ est porté par la normale $\mathbf{n}(\xi)$ sur S.

D'autre part, pour $k = 1, 2$:

$$\left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_1}{\partial \xi_k}, \frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_2}{\partial \xi_k}, \frac{\partial \tilde{\mathcal{X}}_3}{\partial \xi_k}\right)(\xi, \tau) = \left(\frac{\partial \mathcal{X}_1}{\partial \xi_k}, \frac{\partial \mathcal{X}_2}{\partial \xi_k}, \frac{\partial \mathcal{X}_3}{\partial \xi_k}\right)(\xi) + \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial \xi_k}\left(\nabla\phi(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, \tau'))\right) d\tau' = \mathbf{t}_k + \mathcal{O}(\tau)$$

car $\dfrac{\partial \mathcal{X}}{\partial \xi_k}$ est tangent à S.

Ainsi :

$$D(\xi, \tau) = |\nabla\phi(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, 0))|\, (\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n})(\xi) + \mathcal{O}(\tau)$$

Or $\mathbf{t}_1, \wedge \mathbf{t}_2$ est porté par la normale $\mathbf{n}$, c'est-à-dire qu'il existe $\alpha(\xi)$ tel que $\mathbf{t}_1, \wedge \mathbf{t}_2 = \alpha(\xi)\mathbf{n}(\xi)$. Quitte à permuter ξ_1 et ξ_2, nous supposerons (ξ_1, ξ_2, τ) direct, si bien que $\alpha(\xi) > 0$. Ainsi

$$(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n}) = \alpha > 0$$

et donc

$$D(\xi, \tau) = \alpha(\xi)\, |\nabla\phi(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, 0))| + \mathcal{O}(\tau)$$

Puisque $\alpha\, |\nabla\phi| \neq 0$ le long de S, pour τ assez petit, nous avons $D(\xi, \tau) \neq 0$. □

Lemme **A.2** *(réseau orthogonal)*
Soit $\phi \in C^1(\bar{\Omega})$. Alors il existe ψ_1 et ψ_2, définies dans un voisinage de la surface $S = \{\mathbf{x} \in \Omega;\ \phi(\mathbf{x}) = 0\}$, et vérifiant, $k = 1, 2$:

$$\begin{aligned} \nabla\phi.\nabla\psi_k &= 0 \\ |\nabla\psi_k| &\neq 0 \end{aligned}$$

Démonstration : Soit $\tilde{\mathcal{X}}$ le prolongement de la paramétrisation de S. On se donne $\bar{\psi}_1(\xi_1)$ et $\bar{\psi}_2(\xi_2)$ deux fonctions strictement croissantes. On définit alors ψ_k, $k = 1, 2$ par

$$\psi_k(\tilde{\mathcal{X}}(\xi_1, \xi_2, \tau)) = \bar{\psi}_k(\xi_k),\ \forall(\xi_1, \xi_2) \in \Sigma,\ \forall\tau \in]-\tau_0, \tau_0[\tag{26}$$

En dérivant (26) par rapport à τ, il vient

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\psi_k(\tilde{\mathcal{X}}(\xi, \tau)\right) = 0$$

Or le membre de droite s'écrit encore

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\psi_k(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau)\right) &= \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\psi_k}{\partial x_i}(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau))\frac{\partial\tilde{\mathcal{X}}_i}{\partial\tau}(\xi,\tau)\\ &= \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\psi_k}{\partial x_i}(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau))\frac{\partial\phi}{\partial x_i}(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau))\\ &= (\nabla\psi_k.\nabla\phi)(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau))\end{aligned}$$

Donc $\nabla\phi.\nabla\psi_k = 0$ dans le voisinage de S où $\tilde{\mathcal{X}}$ est définie.

En dérivant (26) par rapport à ξ_k, il vient

$$\frac{\partial}{\partial\xi_k}\left(\psi_k(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau)\right) = \frac{d\bar{\psi}_k}{\partial\xi_k}(\xi_k) \neq 0$$

car $\bar{\psi}_k$ est strictement croissante. Or le membre de droite s'écrit encore

$$\frac{\partial}{\partial\xi_k}\left(\psi_k(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau)\right) = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\psi_k}{\partial x_i}(\tilde{\mathcal{X}}(\xi,\tau))\frac{\partial\tilde{\mathcal{X}}_i}{\partial\xi_k}(\xi,\tau)$$

Remarquons que $\dfrac{\partial\tilde{\mathcal{X}}_i}{\partial\xi_k}$ sont des fonctions non-singulières car $\tilde{\mathcal{X}}$ est une transformation bijective. Donc $|\nabla\psi_k| \neq 0$ dans le voisinage de S où $\tilde{\mathcal{X}}$ est définie. □

THÉORÈME **A.1** *(transformation d'intégrale)*
Soit f une fonction intégrable sur S. Soit $\phi \in C^1(\bar{\Omega})$. Alors il existe un voisinage $\mathcal{V} \subset \Omega$ de la surface $S = \{\mathbf{x} \in \Omega;\ \phi(\mathbf{x}) = 0\}$ tel que

$$\int_S f\,\mathbf{n}ds = \int_{\mathcal{V}} \tilde{f}\,\delta\circ\phi\,\nabla\phi dx$$

où $\tilde{f}$ désigne une extension de f à $\mathcal{V}$.

Démonstration : En utilisant le lemme précédent, on introduit la transformation :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{F}}_1(\mathbf{x}) &= \psi_1(\mathbf{x})\\ \tilde{\mathcal{F}}_2(\mathbf{x}) &= \psi_2(\mathbf{x})\\ \tilde{\mathcal{F}}_3(\mathbf{x}) &= \phi(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Le déterminant de la jacobienne de cette transformation est

$$\text{dét}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right) = (\nabla\psi_1, \nabla\psi_2, \nabla\phi)$$

Or $\nabla\psi_1$ et $\nabla\psi_2$ sont tangents à la surface S si bien que

$$\text{dét}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right) = |\nabla\psi_1 \wedge \nabla\psi_2|\,|\nabla\phi|$$

D'après le lemme précédent, ce produit est non nul sur un voisinage noté $\mathcal{V}$. Soit $\mathcal{V}' = \tilde{\mathcal{X}}(\mathcal{V})$ l'image de ce voisinage par la transformation. Soit $\mathbf{x}' = F(\mathbf{x})$ le système de coordonné image par F. On a

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{V}} \delta(\phi(\mathbf{x})\,\tilde{f}(\mathbf{x})\,\nabla\phi(\mathbf{x})\,dx &= \int_{\mathcal{V}'} \delta(x_3')\,(f\nabla\phi)(F^{-1}(\mathbf{x}'))\,dx' \\
&= \int_{\mathcal{V}'} \delta(x_3')\left(\frac{f\nabla\phi}{|\nabla\psi_1 \wedge \nabla\psi_2|\,|\nabla\phi|}\right)(F^{-1}(\mathbf{x}'))\,dx' \\
&= \int_{\mathcal{V}'} \delta(x_3')\left(\frac{f}{|\nabla\psi_1 \wedge \nabla\psi_2|}\right)(F^{-1}(\mathbf{x}'))\,\mathbf{n}\,dx' \\
&= \int_S f\,\mathbf{n}\,ds
\end{aligned}$$

car $\mathbf{n} = \dfrac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ et $ds = \dfrac{dx_1' dx_2'}{|\nabla\psi_1 \wedge \nabla\psi_2|}$ est une mesure superficielle sur S. □

B Expression de la courbure

La courbure est donnée par l'expression :

$$\kappa = \operatorname{div}\mathbf{n}$$

En utilisant l'expression de la normale $\mathbf{n}$ en fonction de ϕ :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$$

il vient en dimension deux :

$$\kappa = \frac{\phi_1^2\phi_{22} + \phi_{11}\phi_2^2 - 2\phi_1\phi_2\phi_{12}}{(\phi_1^2 + \phi_2^2)^{3/2}} \tag{27}$$

en dimension trois :

$$\begin{aligned}
\kappa \;&= \frac{1}{(\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3)^{3/2}} \quad (\phi_1^2\phi_{22} + \phi_{11}\phi_2^2 + \phi_1^2\phi_{33} + \phi_{11}\phi_3^2 + \phi_2^2\phi_{33} + \phi_{22}\phi_3^2 \\
&\qquad -2\phi_1\phi_2\phi_{12} - 2\phi_1\phi_3\phi_{13} - 2\phi_2\phi_3\phi_{23})
\end{aligned} \tag{28}$$

Dans les expressions précédentes, nous avons noté :

$$\phi_i = \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad \phi_{ij} = \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i \partial x_j}$$

C Résolution de l'équation de mélange en dimension un

La fraction volumique vérifie :

$$\begin{aligned} -\beta\varphi'' \; - 2\gamma(\theta_c - \theta)\varphi + 4\gamma\theta\varphi^3 &= 0, \quad \forall\varphi \in \mathbb{R} \\ \varphi(x_1 = -\infty) &= -1 \\ \varphi(x_1 = +\infty) &= 1 \end{aligned}$$

En multipliant par φ et en intégrant :

$$-\frac{\beta}{2}(\varphi')^2 - \gamma(\theta_c - \theta)\varphi^2 + \gamma\theta\varphi^4 = c_1$$

où c est une constante. Lorsque $|x_1| \to \infty$, nous avons $|\varphi| \to 1$ et $|\varphi'| \to 0$ si bien que

$$c_1 = -\gamma(\theta_c - \theta) + \gamma\theta = \gamma(2\theta - \theta_c)$$

L'équation précédente s'écrit encore :

$$\frac{\varphi'}{\sqrt{(1-\varphi^2)\left|\dfrac{\theta_c}{\theta} - 2 - \varphi^2\right|}} = \frac{1}{\varepsilon} \overset{\text{déf}}{=} \sqrt{\frac{2\gamma\theta}{\beta}}$$

Dans le cas particulier où $\theta = \theta_c/3$, cette équation se ramène à :

$$\frac{\varphi'}{1-\varphi^2} = \frac{1}{\varepsilon}$$

qui s'intègre de façon explicite en

$$\frac{1}{2}\log\left(\frac{1+\varphi}{1-\varphi}\right) = \frac{1}{\varepsilon}x_1 + c_2$$

La solution doit vérifier $\varphi(-x_1) = -\varphi(x_1)$ d'après le problème initial, nous avons donc $\varphi(0) = 0$, soit, dans l'équation précecente $c_2 = 0$. D'où finalement

$$\varphi(x_1) = \tanh(x_1/\varepsilon)$$

Le paramètre ε est apellé d'épaisseur de l'interface. L'énergie contenue dans l'interface est

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\beta}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi'(x_1)|\, dx_1 \\ &= \frac{\beta}{2}\left[-\frac{4(1+3\exp(2x_1/\varepsilon))}{3\varepsilon(1+\exp(2x_1/\varepsilon))^3}\right]_{x_1=-\infty}^{x_1=+\infty} \\ &= \frac{2\beta}{3\varepsilon} \\ &= \sqrt{\frac{8\beta\gamma\theta}{9}} \end{aligned}$$

Ainsi, à α et ε fixés, il est possible de choisir β, γ et θ tels que

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{3\alpha\varepsilon}{2} \\ \gamma\theta &= \frac{3\alpha}{4\varepsilon} \end{aligned}$$

En faisant tendre ε vers zéro à α fixé, nous retrouvons un interface localisé et de coefficient de tension superficielle α. Le modèle s'interprète ainsi comme une régularisation par un mélange de l'interface entre deux fluides.

D Méthode des caractéristiques

D.1 Notations

La méthode présentée ici est tirée de [Pir00] et son analyse numérique est réalisée dans [RT01].

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$.

Soit $\mathbf{u}$ un champs de vecteur défini dans $]0, T[\times\Omega$ et satisfaisant

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$$

Soient $\Delta t > 0$ un pas de temps et $t_n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$.

Soient $\mathbf{x} \in \Omega$ et $X(\mathbf{x}, .) :]t_n, t_{n+1}[\to \mathbb{R}^d$ la solution de l'équation différentielle :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dX}{dt}(\mathbf{x}, t) &=& \mathbf{u}(X(\mathbf{x}, t), t), \quad \text{p.p. } t \in]t_n, t_{n+1}[\\ X(\mathbf{x}, t_{n+1}) &=& \mathbf{x} \end{array} \right.$$

La dérivée totale d'un champs φ défini dans $]t_n, t_{n+1}[\times\Omega$ s'écrit :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\right) \varphi(\mathbf{x}, t) = \frac{d}{dt} \left(\varphi(X(\mathbf{x}, t), t)\right)$$

Notons $X^{(n)}(\mathbf{x}) = X(\mathbf{x}, t_n)$ la position de la particule qui était en $\mathbf{x}$ à l'instant t_{n+1} et qui a été transporté par $\mathbf{u}$.

D.2 Approximation d'ordre un en temps

Nous supposerons le champs de vecteur $\mathbf{u}$ connu à l'instant t_n, mais pas encore à l'instant t_{n+1} et nous noterons $\mathbf{u}^{(n)}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$. Nous noterons également : $\varphi^{(n)}(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}, t_n)$.

L'équation différentielle est approchée par le schéma d'Euler du premier ordre suivant :

$$\frac{X(\mathbf{x}, t_{n+1}) - X(\mathbf{x}, t_n)}{\Delta t} = \mathbf{u}^{(n)}(X(\mathbf{x}, t_{n+1}))$$

En utilisant $X(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \mathbf{x}$ et $X(\mathbf{x}, t_{n+1}) = X^{(n)}(\mathbf{x})$, nous obtenons :

$$X^{(n)}(\mathbf{x}) := \mathbf{x} - \Delta t \times \mathbf{u}^{(n)}(\mathbf{x})$$

La dérivée totale est approchée au premier ordre sur $]t_n, t_{n+1}[\times\Omega$ selon :

$$\frac{d}{dt}\left(\varphi(X^{(n)}(\mathbf{x}, t), t)\right) \approx \frac{\varphi^{(n+1)}(\mathbf{x}) - \varphi^{(n)} \circ X^{(n)}(\mathbf{x})}{\Delta t}$$

Ainsi, pour un opérateur A, un problème du type

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\varphi + A(\varphi) &= 0 \\ \varphi^{(0)} &= \varphi_0 \end{aligned}$$

sera approchée au premier ordre en temps par

$$\begin{aligned} \frac{\varphi^{(n+1)}}{\Delta t} + A(\varphi^{(n+1)}) &= \frac{\varphi^{(n)} \circ X^{(n)}}{\Delta t} \\ \varphi^{(0)} &= \varphi_0 \end{aligned}$$

Lors d'une discrétisation par éléments finis, $X^{(n)}(\mathbf{x})$ n'est pas en général un sommet du maillage, même si $\mathbf{x}$ l'est. Il faudra donc savoir interpoler $\varphi^{(n)}$ un point quelconque du maillage de Ω.

D.3 Approximation d'ordre deux en temps

L'équation différentielle est approchée par le schéma de Runge-Kutta du second ordre suivant :

$$\begin{aligned} \frac{X(\mathbf{x}, t_{n+1}) - X(\mathbf{x}, t_{n+\frac{1}{2}})}{\Delta t/2} &= \mathbf{u}^{(n)}(X(\mathbf{x}, t_{n+1})) \\ \frac{X(\mathbf{x}, t_{n+1}) - X(\mathbf{x}, t_n)}{\Delta t} &= \mathbf{u}^{(n)}(X(\mathbf{x}, t_{n+\frac{1}{2}})) \end{aligned}$$

En notant $X^* = X(\mathbf{x}, t_{n+\frac{1}{2}})$, il vient

$$\begin{aligned} X^*(\mathbf{x}) &:= \mathbf{x} - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{u}^{(n)}(\mathbf{x}) \\ X^{(n)}(\mathbf{x}) &:= \mathbf{x} - \Delta t \times \mathbf{u}^{(n)}(X^*(\mathbf{x})) \end{aligned}$$

Soit encore

$$X^{(n)}(\mathbf{x}) := \mathbf{x} - \Delta t \times \mathbf{u}^{(n)}\left(\mathbf{x} - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{u}^{(n)}(\mathbf{x})\right)$$

Le problème précédent sera approchée par

$$\begin{aligned} \frac{\varphi^{(n+1)}}{\Delta t} + A(\theta\varphi^{(n+1)} + (1-\theta)\varphi^{(n)}) &= \frac{\varphi^{(n)} \circ X^{(n)}}{\Delta t} \\ \varphi^{(0)} &= \varphi_0 \end{aligned}$$

Ce schéma est stable pour $\theta \geq \frac{1}{2}$ et d'ordre deux pour $\theta = \frac{1}{2}$. Pour $\theta \in]\frac{1}{2}, 1]$, le schéma est d'ordre un. Pour $\theta = 1$ on retrouve le schéma d'Euler implicite. Dans la pratique, on prend θ proche de $\frac{1}{2}$, par exemple $\theta = 0.55$ ou bien $\theta = 0.6$ Ceci garantis la stabilité pour tout Δt et est proche d'un schéma d'ordre deux.

Lors d'une discrétisation par éléments finis, $X^*(\mathbf{x})$ et $X^{(n)}(\mathbf{x})$ ne sont pas en général des sommets du maillage, même si $\mathbf{x}$ l'est. Il faudra donc savoir interpoler $\varphi^{(n)}$ et $\mathbf{u}^{(n)}$ en un point quelconque du maillage de Ω.

D.4 Interpolation sur un maillage

Soit φ_h une fonction polynomiale de degré k par morceaux sur un maillage $\mathcal{T}_h$. La fonction φ_h est déterminée par la connaissance dans chaque élément $K \in \mathcal{T}_h$ du polynôme de degré k noté $\varphi_{h|K}$.

Le problème de l'évaluation de $\varphi_h(\mathbf{x})$ en un point quelconque $\mathbf{x} \in \Omega$ se ramène à trouver un élément $K \in \mathcal{T}_h$ contenant $\mathbf{x}$. L'évaluation est alors simplement celle d'un polynôme : $\varphi_{h|K}(\mathbf{x})$.

ALGORITHME **D.1** *(naïf)*
  trouvé := **faux**
  pour tout $K \in \mathcal{T}_h$ **et tant que non** *trouvé* **faire**
    si $\mathbf{x} \in K$ **alors**
      trouvé := **vrai**
    fin si
  fin pour

Cet algorithme effectue en moyenne $ne/2$ tests du type $\mathbf{x} \in K$, et est donc extrèment coûteux. En effet, les évaluations du type $\varphi_h(X^{(n)}(\mathbf{x}))$ sont effectuées pour tous les $\mathbf{x}$ degré de liberté de φ_h. Par exemple si φ_h est continue affine par morceaux, les degrés de liberté sont les ns sommets du maillage. Le coût total est donc $ns \times ne$ qui est très grand. Nous allons voir qu'il est possible de réduire ce coût.

D.5 Dimension un, maillage uniforme

Soit $\Omega =]0,1[$ et $h = 1/(n+1)$, $n \geq 0$. Soit $x_i = ih$, $0 \leq i \leq n+1$ et $K_i = [x_i, x_{i+1}]$. Le maillage est définit par $\mathcal{T}_h = \{K_0, \ldots, K_n\}$.

L'élément contenant $x \in [0,1]$ est K_i où $i = \lfloor x/h \rfloor$, la notation $\lfloor . \rfloor$ désignant la partie entière d'un réel.

Cette fois donc, le coût de l'algorithme est constant indépendant de la taille n du maillage.

D.6 Dimension un, cas général

Soit $x_0 = 0 < x_1 < \ldots < x_n < x_{n+1} = 1$ une subdivision quelconque de $\Omega = [0,1]$. Soit $K_i = [x_i, x_{i+1}]$ et $\mathcal{T}_h = \{K_0, \ldots, K_n\}$.

La recherche de l'élément K_i contenant $x \in [0,1]$ peut s'effectuer par dichotomie, de façon similaire à la recherche dans un dictionnaire.

ALGORITHME **D.2** *(dictionnaire)*

$i_{\min} := 0$
$i_{\max} := n$
tant que $i_{\min} < i_{\max}$ **faire**
  $i := \lfloor (i_{\min} + i_{\max})/2 \rfloor$
  si $x \geq x_i$ **alors**
    $i_{\max} := i$
  sinon
    $i_{\min} := i$
  fin si
fin tant que

Le coût de l'algorithme est en $\mathcal{O}(\log n)$, ce qui représente une réduction logarithmique avec l'algorithme naïf.

D.7 Dimension deux et trois, maillages structurés

Pour fixer les idées, on étudie la cas de la dimension deux, l'extension à la dimension trois étant immédiate. Soient $\Omega =]0,1[^2$, $x_0 = 0 < x_1 < \ldots < x_n < x_{n+1} = 1$ et $y_0 = 0 < y_1 < \ldots < y_n < y_{m+1} = 1$ deux subdivisions quelconque de $\Omega = [0,1]$. Soit $K_{i,j} = [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, j_{j+1}]$ et $\mathcal{T}_h = \{K_{i,j}, 1 \leq i \leq n,\ 1 \leq j \leq m\}$.

La recherche de $K_{i,j}$ contenant un point $(x, y) \in \Omega$ s'effectue par deux dichotomies, et le coût de l'algorithme est $\mathcal{O}(\log n + \log m)$.

Dans le cas de la dimension trois, nous effectuerons donc trois recherches par dichotomies.

D.8 Dimension deux et trois, cas général

L'idée la plus simple pour trouver un élément qui contient $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - \Delta t \times \mathbf{u}_0$ est de partir d'un élément K_0 contenant $\mathbf{x}_0$ et de cheminer dans le maillage pour arriver dans un élément K contenant $\mathbf{x}$. Nous sortons d'un élément par une face S si cette face voit le sommet $\mathbf{x}$.

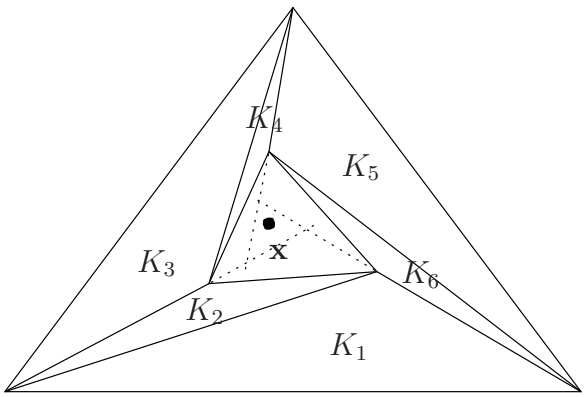


FIG. 15 – Un cycle pour la marche à vue déterministe

ALGORITHME **D.3** *(marche à vue)*
$K := K_0$ donné
trouvé := **faux**
tant que $K \neq \perp$ **et** $\mathbf{x} \notin K$ **faire**
  $K_{\text{succ}} := \perp$
  pour tout $S \subset \partial K$ **et tant que** $K_{\text{succ}} = \perp$ **faire**
    si S voit $\mathbf{x}$ **et** voisin$(K, S) \neq \perp$ **alors**
      K_{succ} := voisin(K,S)
    fin si
  fin pour
  $K := K_{\text{succ}}$
fin tant que

Ce cheminement peut faire apparaître des cycles (voir figure 15), et pour garantir que l'algorithme s'arrête, nous choisissons au hasard parmi les faces qui voient le sommet $\mathbf{x}$ (voir [DPT01] pour l'étude de cet algorithme). Lorsque cet algorithme se termine nous avons au choix :

– soit $K = \perp$
– soit $\mathbf{x} \in K$

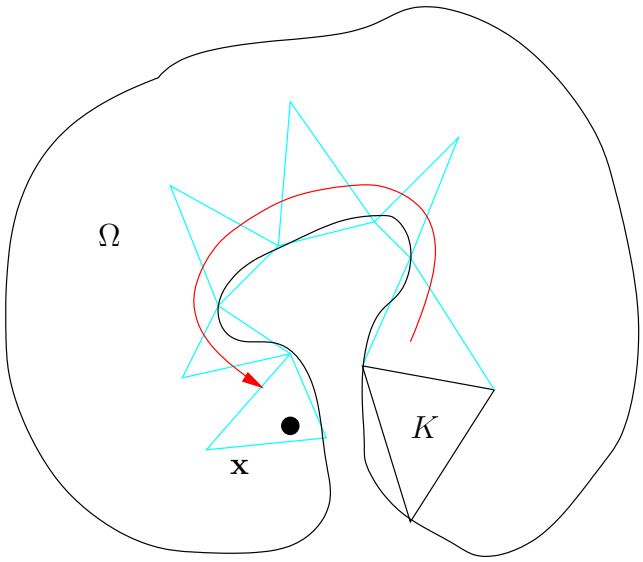


FIG. 16 – Cas non-convexe : déblocage par cheminement sur la frontière

Le cas $K = \perp$ signifie que l'élément contenant $\mathbf{x}$ n'est pas trouvé. Ceci signifie que par exemple que $\mathbf{x} \notin \Omega$ ou bien que $\mathbf{x}$ est séparé de $\mathbf{x}_0$ par une zone non convexe (voir figure 16).

Lorsque Δt tends vers zéro, le nombre d'éléments traversés diminue (donc le temps de calcul), et le nombre d'échec diminue. En cas d'échec, nous pouvons interpoler $\varphi_h(\mathbf{x}$ à partir polynôme du dernier élément étudié.

Une stratégie plus fine peut être de cheminer sur la frontière du maillage pour lever le problème dans le cas non-convexe. Dans ce cas, nous repartons du dernier élément étudié, qui est nécessairement sur la frontière, et nous cheminons le long de celle-ci. Voir le code FREEFEM [PHBO01] pour la programmation d'un tel algorithme.

D.9 Accélération par les arbres de recherche

Lorsque $\Delta t \times \mathbf{u}_0$ est grand, ou bien que le maillage très resséré, l'algorithme de cheminement devient long, et nous pouvons accélérer la recherche en partant d'un sommet du maillage plus proche de $\mathbf{x}$ que le point $\mathbf{x}_0$. Un sommet proche de $\mathbf{x}_0$ est obtenu par une recherche de type dichotomique dans un arbre. Le cheminement débute ensuite à partir d'un élément du maillage contenant ce sommet.

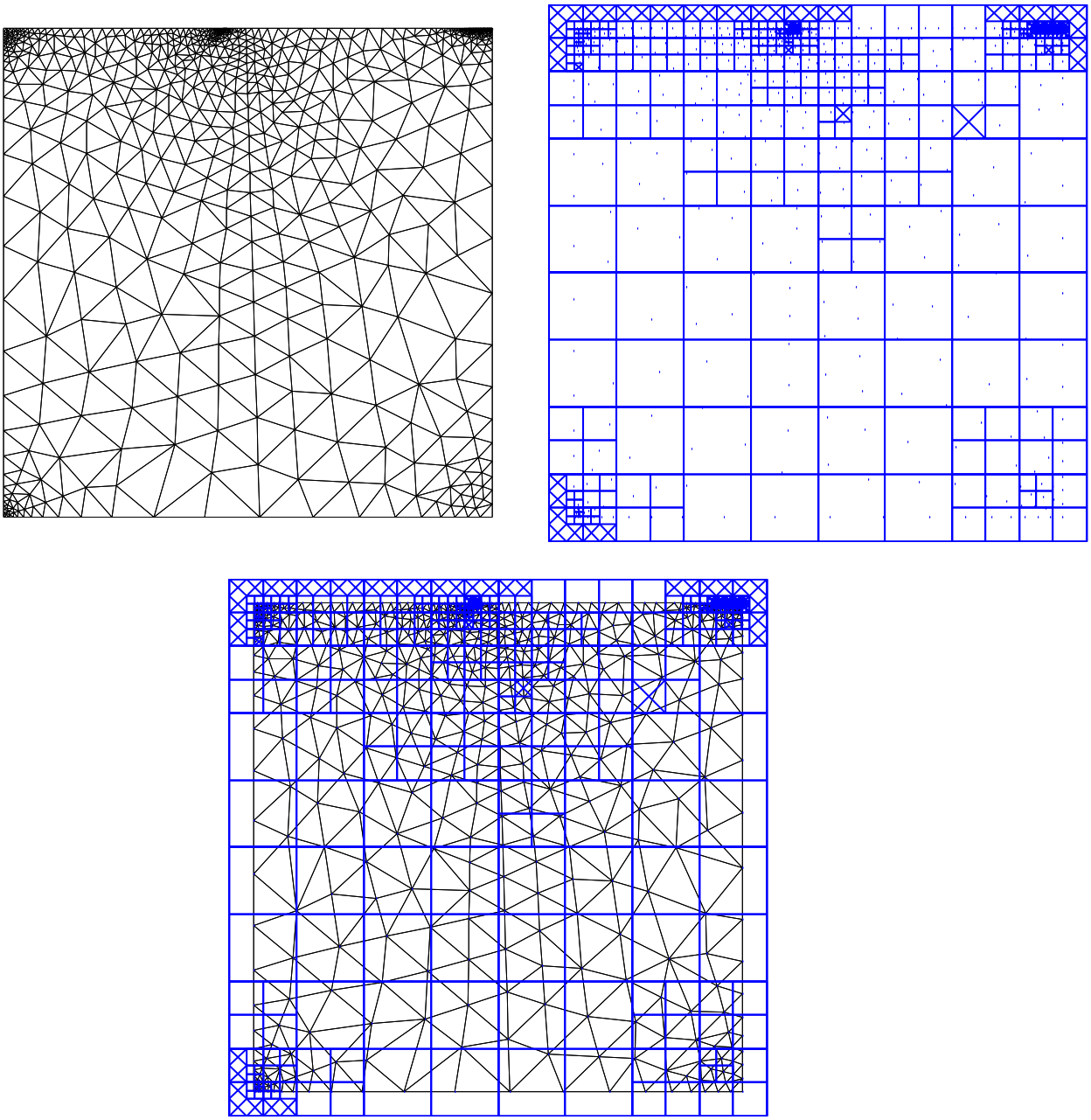


Fig. 17 – Maillage et arbre de recherche associé.

La structure d'arbre quaternaire est la représentation hiérarchique fondamentale des données de type point en dimension $d \geq 2$. Ces arbres quaternaire (*quadtree* en anglais) ont été inventés par Finkel et Bentley en 1974 [FB74]. Il s'agit d'une généralisation naturelle des arbres de recherche binaire au cas multi-dimensionnel. Une présentation claire de ce domaine de l'algorithique géométrique est présenté dans [Sam90].

Cette structure de donnée garantis que la recherche de l'élément K contenant un point s'effectue en un temps de calcul wau plus en $\mathcal{O}(n \log n)$, où n est le nombre de sommets du maillage. Il s'agit d'un coût analogue à celui obtenu dans le cas de la dimension un pour un maillage non-uniforme. Voir le code BAMG [Hec97] pour une programmation dans le cadre des maillages éléments finis en dimension deux.