



---

# Rapport de Stage de Fin d'Études

---

## Sujet :

Optimisation de la méthode de Galerkin discontinue  
pour un écoulement diphasique eau-hydrogène en milieu poreux

Par Philippe UNG  
Encadré par: Mme Magdalena DYMITROWSKA

Fontenay-aux-Roses, dimanche 23 septembre 2012



# Remerciements

Avant tout, je tiens à remercier mon maître de stage, Madame Magdalena Dymitrowska, pour son encadrement, son suivi et sa disponibilité mais également pour m'avoir permis de travailler sur un sujet m'initiant à de nouvelles méthodes numériques et mettant en pratique des connaissances acquises. Ses connaissances et son intuition physique ont pu me guider tout au long de l'étude menée durant le stage et ses explications m'ont particulièrement sensibilisé à l'importance d'une approche physique dans la modélisation que l'on a pu construire ensemble et les résultats obtenus.

Mes remerciements vont également à l'ensemble de l'équipe du BERIS pour leur accueil chaleureux et la bonne ambiance générale du service qui ont facilité mon adaptation dans cet environnement agréable de travail.

Enfin, je remercie amicalement mes camarades de bureau, Camille Espivent et Mario Caruso, ainsi que Arnaud Rivet, pour leur sympathie, leurs conseils, la bonne humeur et la franche camaraderie qu'ils ont su maintenir dans le bureau (malgré la période de hautes températures!).



# Sommaire

<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>1 IRSN</b>	<b>9</b>
1.1 Présentation . . . . .	9
1.2 Quelques chiffres-clés . . . . .	10
1.3 Organisation . . . . .	10
<b>2 Modélisation d'un écoulement liquide-gaz à <math>N</math>-gaz</b>	<b>11</b>
2.1 Introduction . . . . .	11
2.2 Modélisation physique de l'écoulement diphasique . . . . .	11
2.2.1 Notations . . . . .	12
2.2.2 Relations entre les quantités introduites . . . . .	12
2.2.3 Conservation de la masse et termes de transport . . . . .	12
2.2.4 Equilibres locaux entre les phases . . . . .	13
2.2.5 Grandeurs physiques . . . . .	14
2.3 Formulation mathématique de l'écoulement isotherme . . . . .	14
2.3.1 Choix des variables principales . . . . .	14
2.3.2 Formulation suivant les variables principales . . . . .	15
a. Expression des flux . . . . .	15
b. Forme canonique - Termes "elliptiques" et "hyperboliques" . . . . .	16
c. Formulation mathématique . . . . .	18
2.3.3 Méthode de résolution . . . . .	19
a. Discrétisation en temps . . . . .	19
b. Résolution de la non-linéarité . . . . .	19
<b>3 Formulation variationnelle</b>	<b>23</b>
3.1 Définitions et notations . . . . .	23
3.2 Discrétisation en espace . . . . .	24
3.2.1 Propriétés de la forme bilinéaire . . . . .	26
a. Consistance . . . . .	26
b. Stabilité . . . . .	32
c. Continuité . . . . .	32

<b>4</b>	<b>Implémentation</b>	<b>35</b>
4.1	Introduction de l'élément de référence . . . . .	35
4.2	Fonctions de base . . . . .	36
4.3	Formules de quadrature . . . . .	37
4.4	Matrices locales et second membre . . . . .	38
4.5	Principales classes de l'implémentation . . . . .	45
4.6	Fonctions implémentées . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Résultats numériques</b>	<b>49</b>
5.1	Précisions sur la discrétisation en temps . . . . .	49
5.2	Cas test 1 : Injection de gaz dans un milieu saturé en eau pure . . . . .	50
5.3	Cas test 2 : Injection de gaz dans un milieu non saturé . . . . .	54
5.4	Cas test 3 : Injection de gaz dans un matériau non homogène saturé en liquide . . . . .	57
	<b>Conclusion</b>	<b>63</b>
<b>6</b>	<b>Annexes</b>	<b>65</b>
6.1	Annexe A : Calcul pour l'obtention du modèle . . . . .	65
6.2	Annexe B : Calculs pour la résolution de la non-linéarité . . . . .	71
6.3	Annexe C : Calculs pour l'obtention de la formulation variationnelle . . . . .	73
6.3.1	Développement de $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v$ . . . . .	73
6.3.2	Développement de $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) v$ . . . . .	74
6.3.3	Etude des intégrales sur les faces intérieures . . . . .	76
6.3.4	Expression de la forme bilinéaire . . . . .	80
6.3.5	Formulation variationnelle . . . . .	81
6.4	Annexe D : Outils de développement . . . . .	84
6.4.1	Langage C++ . . . . .	84
6.4.2	LibMesh . . . . .	84
6.5	Annexe E : Compléments à la méthode de Galerkin Discontinue . . . . .	85
6.5.1	Théorème de Lax-Wendroff . . . . .	85
6.5.2	Espace de Sobolev brisé . . . . .	85
6.5.3	Inégalité inverse . . . . .	86
	<b>Bibliographie</b>	<b>87</b>

# Introduction

Ce travail s'inscrit dans le cadre de l'évaluation de la sûreté de stockage de déchets radioactifs en formation géologique profonde. Un des enjeux est l'évaluation de l'impact éventuel de la migration des gaz à l'intérieur du stockage et dans son environnement. Le gaz (principalement l'hydrogène) est produit essentiellement par la corrosion des colis en acier. La montée en pression de la phase gazeuse et la migration du gaz pourraient influencer certains phénomènes, tels que la resaturation en eau des ouvrages, ou provoquer des perturbations (fracturation de la roche hôte et des barrières ouvragées, ouverture des interfaces) pouvant contribuer à diminuer les capacités de confinement du stockage. L'objectif du stage vise à améliorer l'outil de simulation développé au BERIS pour l'estimation de la migration des gaz au sein d'une telle installation, dans la continuité d'études précédentes (en particulier, un précédent stage effectué d'avril 2011 à septembre 2011).

A l'issue de ces études, un modèle mathématique et numérique décrivant la migration de gaz dans le champ proche d'une installation de stockage a été mis en place et celui-ci repose sur les équations d'écoulement de deux fluides miscibles (eau-gaz), incompressible-compressible, en milieux poreux.

La méthode de Galerkin Discontinue (méthode DG) a été utilisée pour la résolution du problème.

Le travail effectué consistait à compléter et améliorer la résolution des équations d'écoulement par le schéma Galerkin Discontinue, en particulier une variante appelée "Interior Penalty Galerkin" stable par l'introduction d'un terme de pénalisation pour les sauts de la solution sur le bord des éléments. Il s'agit d'une part d'appliquer la méthode pour les cas non-stationnaires et d'autre part, d'introduire d'autres modifications au schéma telles que le décentrement amont des flux dits convectifs entre autres.

Pour commencer, on présentera la modélisation physique d'un écoulement diphasique ainsi que le modèle mathématique avant d'exprimer la formulation variationnelle discontinue par la méthode DG, pour ensuite décrire l'implémentation pour la résolution du problème et enfin, les résultats numériques obtenus.





# Chapitre 1

## IRSN

### 1.1 Présentation

Créé le 9 mai 2001, l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (**IRSN**) s'impose depuis comme un expert public en matière de recherche et d'expertise sur les risques nucléaires et radiologiques.

Cet établissement public à caractère industriel et commercial est placé sous la tutelle conjointe de 5 ministères ("de l'Ecologie, du développement durable et de l'énergie", "du Redressement productif", "de l'Enseignement supérieur et de la Recherche", "de la Défense" et "des Affaires sociales et de la santé").

L'IRSN exerce ses missions d'expertise et de recherche dans les domaines suivants :

- Surveillance radiologique de l'environnement et intervention en situation d'urgence radiologique,
- Radioprotection de l'homme,
- Prévention des accidents majeurs dans les installations nucléaires,
- Sûreté des réacteurs,
- Sûreté des usines, des laboratoires, des transports et des déchets,
- Expertise nucléaire de défense.

L'IRSN s'est vu confier **7 missions** en matières de radioprotection, de sûreté et de sécurité nucléaires. Elles s'organisent en trois domaines :

- **Recherche et missions de service public**
  - Définition et mise en oeuvre de programmes de recherche nationaux et internationaux.
  - Contribution à la formation et à l'enseignement en radioprotection.
  - Veille permanente en matière de radioprotection.
  - Contribution à l'information du public.
- **Appui et concours technique et opérationnel aux pouvoirs publics et aux autorités**
  - Appui technique en matière de risques nucléaires et radiologiques.
  - Appui opérationnel en cas de crise ou de situation d'urgence radiologique.
- **Prestations contractuelles d'expertise, de recherche et de mesure**
  - Réalisation d'expertises, de recherches et d'analyses, mesures ou dosages pour des organismes publics ou privés.

## 1.2 Quelques chiffres-clés

Pour faire simple, l'IRSN réunit 1718 **collaborateurs** pour une proportion de 45.6% de femmes et 54.4% d'hommes répartis sur 11 sites. Le principal corps de métier est constitué d'ingénieurs, de chercheurs et de cadres (73.5% de l'effectif) alors que les techniciens et employés de support technique et administratif représentent 26.5% de l'effectif.

L'IRSN compte 23 brevets français en vigueur ainsi que 50 brevets en vigueur à l'étranger et 16 logiciels et bases de données déposés à l'*Agence pour la Protection des Programmes* (APP).

40.2% du budget de l'IRSN est consacré à la recherche. Durant l'année 2011, les recettes s'élevaient à 293 millions d'euros pour des dépenses de 282 millions d'euros, dont 18 millions d'euros d'investissements en équipements.

## 1.3 Organisation

En parallèle aux métiers de directions fonctionnelles et de support, on dénombre 3 pôles opérationnels :

- **Défense, sécurité et non-prolifération** : expertise nucléaire de défense ;
- **Radioprotection, environnement, déchets et crise** : protection de l'Homme, environnement, déchets et géosphère, crise ;
- **Sûreté nucléaire** : expertise de sûreté, recherche en sûreté, systèmes, nouveaux réacteurs et démarches de sûreté.

Le stage s'est déroulé dans les locaux du **B**ureau d'**E**xpertise et de **R**echerche sur les Installations de **S**tockage (**BERIS**) du **S**ervice d'**E**xpertise des **D**échets **R**adioactifs et de la radioactivité **N**aturelle (**SEDRAN**), unité de la direction des **D**échets-**G**éosphère (**DGE**) faisant partie intégrante du **P**ôle **R**adio**P**rotection (**PRP**).

L'équipe du BERIS compte 11 personnes, pour la plupart ingénieurs-chercheurs dont un Chef de bureau et deux chargés d'affaires. Le BERIS est chargé de l'expertise de sûreté des stockages de déchets radioactifs de surface et des projets de stockage de déchets radioactifs en subsurface ou en couches géologiques profondes. Il assure également l'évaluation des capacités de confinement des différentes barrières de stockage de déchets radioactifs (barrière géologique et composants ouvragés). Ces travaux font intervenir une équipe pluridisciplinaire : hydrogéologues, géo-mécaniciens, géologues, géochimistes, ingénieurs de calcul, développeurs entre autres.

## Chapitre 2

# Modélisation d'un écoulement liquide-gaz à $N$ -gaz

### 2.1 Introduction

Afin de simuler le comportement d'un site de stockage profond et de son voisinage lors de la génération d'une grande quantité d'hydrogène au sein du stockage, on a mis au point une modélisation mathématique des écoulements diphasiques liquide-gaz en milieu poreux d'un mélange de  $N + 1$  composants ( $N$  composants gazeux et 1 solvant - ici, l'eau -). Ces composants sont susceptibles d'être présents dans chaque phase (sous forme de vapeur d'eau pour le solvant dans la phase gazeuse, et dissoute dans la phase liquide pour les composants gazeux).

Typiquement, dans le cadre du stockage, le solvant considéré sera l'*eau* et on pourra ainsi modéliser l'écoulement *eau/hydrogène* ( $N = 1$ ) mais aussi des situations plus complexes ( $N > 1$ ) telles que *eau/hydrogène/air*.

Le but de cette modélisation étant de prendre en compte l'apparition, l'évolution et la disparition d'une phase gazeuse dans la roche environnant le stockage, on y intègre pour cela les aspects multi-phase (liquide et gaz) et multi-composant. Par ailleurs, cela signifie que les effets capillaires sont pris en compte ainsi que les échanges de matières entre les phases, qui sont régis par l'équilibre thermodynamique.

On exposera par la suite une formulation mathématique du problème après avoir présenté le modèle.

#### Remarque

Il est nécessaire de bien distinguer le nombre de composants  $N + 1$  qui prend en compte le solvant, et le nombre de composants gazeux  $N$  qui ne le considère pas.

### 2.2 Modélisation physique de l'écoulement diphasique

On présente ici les éléments constitutifs de la modélisation physique de l'écoulement d'un mélange *eau/hydrogène* dans un milieu poreux.

### 2.2.1 Notations

On emploiera les indices  $l$  et  $g$  afin de désigner respectivement toute quantité relative à la phase liquide et à la phase gazeuse. Les grandeurs physiques que sont la *pression*, la *saturation*, la *densité massique* et la *concentration molaire (ou molarité) de la phase  $\alpha \in \{l, g\}$*  seront respectivement notées  $P_\alpha$ ,  $S_\alpha$ ,  $\rho_\alpha$  et  $c_\alpha$ .

On notera par l'exposant  $i \in \{0, \dots, N\}$  les quantités relatives au composant  $i$ . Par convention,  $i = 0$  correspondra au solvant, et  $i \in \{1, \dots, N\}$ , au  $i^{\text{me}}$  composant gazeux. Ainsi, on note  $M^i$  la masse molaire du composant  $i \in \{0, \dots, N\}$ , ainsi que  $\rho_\alpha^i$ ,  $c_\alpha^i$ ,  $v_\alpha^i$  et  $x_\alpha^i$  respectivement la *densité massique*, la *concentration molaire*, le *volume molaire partiel* et la *fraction molaire du composant  $i \in \{0, \dots, N\}$  dans la phase  $\alpha \in \{l, g\}$* .

### 2.2.2 Relations entre les quantités introduites

Par définition, les saturations vérifient

$$S_l + S_g = 1 \quad (2.1)$$

Les quantités relatives aux composants sont liées par les relations suivantes :

$$\rho_\alpha^i = M^i c_\alpha^i \quad ; \quad x_\alpha^i = \frac{c_\alpha^i}{c_\alpha} \quad ; \quad \rho_\alpha = \sum_{k=0}^N \rho_\alpha^k \quad ; \quad c_\alpha = \sum_{k=0}^N c_\alpha^k \quad ; \quad \sum_{k=0}^N x_\alpha^k v_\alpha^k = \frac{1}{c_\alpha} \quad (2.2)$$

### 2.2.3 Conservation de la masse et termes de transport

Le principe de conservation de la masse appliqué à chaque composant du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Phi S_l \rho_l^i + \Phi S_g \rho_g^i) + \text{div} (\rho_l^i q_l + \rho_g^i q_g + j_l^i + j_g^i) = \mathcal{F}^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}, \quad \alpha \in \{l, g\} \quad (2.3)$$

Cette equation fait intervenir les grandeurs suivantes :

- **Vitesse de Darcy** La vitesse d'écoulement effective de la phase  $\alpha \in \{l, g\}$  dans le milieu poreux est donnée par

$$q_\alpha = -\frac{k_{r,\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbb{K} (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha g) \quad (2.4)$$

$$\text{avec} \begin{cases} \mathbb{K} & \text{le tenseur de perméabilité absolue,} \\ k_{r,\alpha} & \text{la perméabilité relative de la phase } \alpha, \\ \mu_\alpha & \text{la viscosité dynamique de la phase } \alpha, \\ g & \text{l'accélération gravitationnelle.} \end{cases}$$

- **Flux massique de diffusion du composant  $i$  dans la phase  $\alpha$**

$$j_\alpha^i = -\Phi M^i S_\alpha C_\alpha D_\alpha^i \nabla x_\alpha^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}, \quad \alpha \in \{l, g\} \quad (2.5)$$

$$\text{avec} \begin{cases} \Phi & \text{la porosité de la roche,} \\ D_\alpha^i & \text{le coefficient de diffusion moléculaire du composant } i \text{ dans la phase } \alpha. \end{cases}$$

À travers cette équation, on peut définir de nouvelles quantités :

- **Flux massique du composant  $i$**

$$\phi^i = \rho_l^i q_l + \rho_g^i q_g + j_g^i + j_l^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}, \quad \alpha \in \{l, g\} \quad (2.6)$$

- **Densité massique moyenne dans le mélange de phases du composant  $i$**

$$X^i = S_l \rho_l^i + S_g \rho_g^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.7)$$

### 2.2.4 Equilibres locaux entre les phases

On se propose d'énumérer les lois physiques ainsi que les hypothèses sous lesquelles l'étude se place qui vont permettre la modélisation de l'écoulement.

**Equilibre mécanique et loi de pression capillaire** Les phases sont localement à l'équilibre mécanique. Compte tenu de la capillarité des pores, les pressions des phases liquide et gazeuse ne sont pas nécessairement égales et on définit la pression capillaire comme :

$$P_c = P_g - P_l \quad (2.8)$$

On supposera également que la pression capillaire dépend de manière univoque et monotone de la saturation du milieu poreux.

**Equilibre thermique** Les phases liquide et gazeuse sont localement à la même température  $T$ .

**Loi des gaz parfaits et loi de Dalton pour le mélange de gaz** Le mélange gazeux se comporte comme un mélange de gaz parfaits :

$$\begin{aligned} P_g^i &= x_g^i P_g \\ &= \frac{\rho_g^i}{M^i} RT, \quad i \in \{0, \dots, N\} \end{aligned} \quad (2.9)$$

avec  $\begin{cases} P_g^i & \text{La pression partielle du composant } i \text{ dans le gaz,} \\ R & \text{La constante universelle des gaz parfaits,} \\ T & \text{La température du gaz.} \end{cases}$

**Incompressibilité de l'eau** Celle-ci se traduit par :

$$\rho_l^0 = 0 \quad (2.10)$$

**Equilibre thermodynamique** Sous les hypothèses d'un mélange idéal de gaz parfaits, d'incompressibilité du liquide, que les composants gazeux sont peu solubles dans le liquide, et d'absence de réactions chimiques entre les composants, l'équilibre thermodynamique entre les phases s'exprime par la relation suivante :

$$x_g^i P_g = K^i x_l^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.11)$$

avec  $K^i$  la *constante de Henry* qui dépend de l'état du liquide (température, pression et composition).

**Remarque** Cette relation est également appelée la *loi de Henry*.

**En résumé,**

- le milieu poreux est indéformable (porosité constante),
- la pression capillaire dépend uniquement de la saturation,
- la phase gazeuse est un mélange idéal de gaz parfaits,
- les composants gazeux sont peu solubles dans l'eau (la phase liquide est une solution diluée),
- la phase liquide est incompressible,
- il n'y a pas de réactions chimiques,
- l'équilibre thermodynamique est satisfait.

De plus, on supposera que l'écoulement est isotherme.

### 2.2.5 Grandeurs physiques

Les grandeurs physiques impliquées dans ce modèle seront classifiées selon 2 catégories : les *variables* et les *données*.

- **Les variables :**

$$S_\alpha, P_\alpha, \rho_\alpha, c_\alpha, \rho_\alpha^i, c_\alpha^i, x_\alpha^i, v_\alpha^i, q_\alpha, j_\alpha^i.$$

- **Les données :**

$$T, g, \Phi(x), \mathbb{K}(x), k_{r,\alpha}(\cdot, x), P_c(\cdot, x), \mathcal{F}^i(x, t), \mu_\alpha, D_\alpha^i, M^i, \rho_l^{0,*}(T), v_l^{i,\infty}(T), P_v^0(T), K_H^i(T, P_{ref}).$$

On a mis en évidence la dépendance en espace  $x$ , au temps  $t$ , à la température  $T$ , et à la pression  $P_{ref}$ .

## 2.3 Formulation mathématique de l'écoulement isotherme

Les objectifs de la formulation mathématique du modèle physique sont d'intégrer :

- la gestion de l'apparition/disparition de la phase gaz,
- la gestion des milieux poreux hétérogènes.

### 2.3.1 Choix des variables principales

Un dénombrement des équations et des variables physiques exposées en section 2.2 permet de conclure que le problème est décrit par un système de  $N + 1$  équations aux dérivées partielles à  $N + 1$  inconnues (qui seront présentées ultérieurement).

Localement, chaque phase  $\alpha \in \{l, g\}$  peut être entièrement décrite par :

$$S_\alpha, P_\alpha, \rho_\alpha, c_\alpha, (\rho_\alpha^i)_{i=0,\dots,N}, (c_\alpha^i)_{i=0,\dots,N}, (x_\alpha^i)_{i=0,\dots,N}, (v_\alpha^i)_{i=0,\dots,N}$$

Il s'agit de choisir  $N + 1$  variables principales à partir desquelles il est possible d'exprimer l'ensemble de ces variables, et le cas échéant leur gradient.

Afin d'assurer la gestion des milieux poreux hétérogènes, il faut remarquer que parmi les variables énumérées ci-dessus, seules certaines sont "naturellement" continues à l'interface d'une hétérogénéité.

C'est le cas en particulier des pressions  $P_\alpha$  mais aussi des fractions molaires  $x_\alpha^i$  : ceci est dû au fait que ces grandeurs participent à des forces physiques et que leurs discontinuités induiraient un déséquilibre local en contradiction avec les hypothèses constitutives du modèle physique étudié.

En ce sens, il est proposé de travailler avec le jeu de variables  $(P_l, (x_l^i)_{i=1,\dots,N})$  (cf. [11]). En effet, ces variables offrent l'avantage d'être toujours physiquement définies en présence de liquide et continues.

Il est alors possible d'exprimer les variables secondaires en fonction de  $(P_l, (x_l^i)_{i=1,\dots,N})$  (cf. [11]).

### 2.3.2 Formulation suivant les variables principales

Par souci d'homogénéité, il sera dorénavant adopté la notation suivante :

$$u = (u_i)_{i=0,\dots,N} \equiv (P_l, (x_l^i)_{i=1,\dots,N})$$

En reprenant le système de  $N + 1$  équations aux dérivées partielles obtenu à partir du principe de conservation de la masse à savoir l'équation (2.3) et en employant les expressions du flux massique  $\phi^i$  et de la densité massique moyenne  $X^i$  définis respectivement en (2.6) et (2.7), le système se réécrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Phi X^i) + \text{div } \phi^i = \mathcal{F}^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.12)$$

Le flux massique du composant  $i$ ,  $\phi^i$ , fait intervenir des termes de flux de diffusion et de convection dans chacune des phases :

$$\phi^i = \rho_l^i q_l + \rho_g^i q_g + j_g^i + j_l^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}, \quad \alpha \in \{l, g\} \quad (2.13)$$

Il s'agit donc d'explicitier chaque terme des  $\phi^i$  dans le jeu de variables principales  $u = (u_i)_{i=0,\dots,N}$  (calculs en Annexe A).

#### a. Expression des flux

##### Flux massique de diffusion du composant $i$ dans la phase liquide

$$\begin{aligned} j_l^i &= -\Phi M^i S_l c_l D_l^i \nabla x_l^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \\ &= \begin{cases} +\Phi M^0 S_l c_l D_l^0 \sum_{k=1}^N \nabla u_k & , i = 0 \\ -\Phi M^i S_l c_l D_l^i \nabla u_i & , i \in \{1, \dots, N\} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.14)$$

##### Flux massique de diffusion du composant $i$ dans la phase gazeuse

$$\begin{aligned} j_g^i &= -\Phi M^i S_g c_g D_g^i \nabla x_g^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \\ &= -\Phi M^i S_g c_g D_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k, \quad i \in \{0, \dots, N\} \end{aligned} \quad (2.15)$$

**Flux de convection dans le liquide**

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho_l^0 q_l &= -\rho_l^0 \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla P_l - \rho_l g) & , i = 0 \\ & \stackrel{P_l = u_0}{=} -\rho_l^0 \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) & , i = 0 \\ \rho_l^i q_l &= -\rho_l^i \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla P_l - \rho_l g) & , i \in \{1, \dots, N\} \\ &= -u_i M^i c_l \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) & , i \in \{1, \dots, N\} \end{array} \right. \quad (2.16)$$

**Flux de convection dans le gaz**

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho_g^0 q_g &= -\rho_g^0 \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g} \mathbb{K} (\nabla P_g - \rho_g g) & , i = 0 \\ &= -\rho_g^0 \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) & , i = 0 \\ \rho_g^i q_g &= -\rho_g^i \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) & , i \in \{1, \dots, N\} \\ &= -M^i K^i u_i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) & , i \in \{1, \dots, N\} \end{array} \right. \quad (2.17)$$

**b. Forme canonique - Termes "elliptiques" et "hyperboliques"**

Il est possible de traiter l'équation (2.12) sous une autre forme à savoir :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Phi X^i) + \operatorname{div} \phi^i = \mathcal{F}^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}$$

se réécrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Phi X^i) - \operatorname{div} (-\phi^i) = \mathcal{F}^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.18)$$

Le problème peut désormais se réécrire sous la forme canonique suivante :

$$\Phi \frac{\partial X^i}{\partial t} - \operatorname{div} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k} \nabla u_k + A_{i,g} g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C_{i,k} \nabla u_k + C_{i,g} g \right) \right] = \mathcal{F}^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.19)$$

$$\text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{ll} A_{i,k} &= \delta_{i0} \left( -(1 - \delta_{k0}) J_l^0 \mathbb{I}_d + Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} + \delta_{k0} Q_l^0 \mathbb{K} \right) + (1 - \delta_{i0}) \delta_{ki} J_l^i \mathbb{I}_d + J_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \mathbb{I}_d \\ A_{i,g} &= \delta_{i0} (-Q_l^0 \rho_l - Q_g^0 \rho_g) \mathbb{K} \\ C_{i,k} &= (1 - \delta_{i0}) \left( \delta_{k0} Q_l^i + Q_g^i \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \right) \mathbb{K} \\ C_{i,g} &= (1 - \delta_{i0}) (-Q_l^i \rho_l - Q_g^i \rho_g) \mathbb{K} \end{array} \right.$$



$$\text{où } \left\{ \begin{array}{l} J_{\alpha}^i = \Phi M^i S_{\alpha} c_{\alpha} D_{\alpha}^i, \forall i \in \{0, \dots, N\}, \alpha \in \{l, g\} \\ Q_l^i = \begin{cases} \rho_l^0 \frac{k_{r,l}}{\mu_l} & \text{si } i = 0 \\ M^i c_l \frac{k_{r,l}}{\mu_l} & \text{si } i \in \{1, \dots, N\} \end{cases} \\ Q_g^i = \begin{cases} \rho_g^0 \frac{k_{r,g}}{\mu_g} & \text{si } i = 0 \\ M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}}{\mu_g} & \text{si } i \in \{1, \dots, N\} \end{cases} \end{array} \right.$$

En d'autres termes,

$$\begin{aligned} A_{i,k} &= \begin{cases} \left( Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_0} + Q_l^0 \right) \mathbb{K} + J_g^0 \frac{\partial x_g^0}{\partial u_0} \mathbb{I}_d & \text{si } i = 0 \text{ et } k = 0 \\ -J_l^0 \mathbb{I}_d + Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} + J_g^0 \frac{\partial x_g^0}{\partial u_k} \mathbb{I}_d & \text{si } i = 0 \text{ et } k > 0 \\ J_l^i \mathbb{I}_d + J_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_i} \mathbb{I}_d & \text{si } i > 0 \text{ et } k = i \\ J_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \mathbb{I}_d & \text{si } i > 0 \text{ et } k \neq i \end{cases} \\ &= \begin{cases} \left( \rho_g^0 \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \frac{\partial P_g}{\partial u_0} + \rho_l^0 \frac{k_{r,l}}{\mu_l} \right) \mathbb{K} + \Phi M^0 S_g c_g D_g^0 \frac{\partial x_g^0}{\partial u_0} \mathbb{I}_d & \text{si } i = 0 \text{ et } k = 0 \\ -\Phi M^0 S_l c_l D_l^0 \mathbb{I}_d + \rho_g^0 \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} + \Phi M^0 S_g c_g D_g^0 \frac{\partial x_g^0}{\partial u_k} \mathbb{I}_d & \text{si } i = 0 \text{ et } k > 0 \\ \Phi M^i S_l c_l D_l^i \mathbb{I}_d + \Phi M^i S_g c_g D_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_i} \mathbb{I}_d & \text{si } i > 0 \text{ et } k = i \\ \Phi M^i S_g c_g D_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \mathbb{I}_d & \text{si } i > 0 \text{ et } k \neq i \end{cases} \quad (2.20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{i,g} &= \begin{cases} (-Q_l^0 \rho_l - Q_g^0 \rho_g) \mathbb{K} & \text{si } i = 0 \\ 0 & \text{si } i > 0 \end{cases} \\ &= \begin{cases} \left( -\rho_l^0 \frac{k_{r,l}}{\mu_l} \rho_l - \rho_g^0 \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \rho_g \right) \mathbb{K} & \text{si } i = 0 \\ 0 & \text{si } i > 0 \end{cases} \quad (2.21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{i,k} &= \begin{cases} 0 & \text{si } i = 0 \\ \left( Q_l^i + Q_g^i \frac{\partial P_g}{\partial u_0} \right) \mathbb{K} & \text{si } i > 0 \text{ et } k = 0 \\ Q_g^i \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} & \text{si } i > 0 \text{ et } k > 0 \end{cases} \\
&= \begin{cases} 0 & \text{si } i = 0 \\ \left( M^i c_l \frac{k_{r,l}}{\mu_l} + M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \frac{\partial P_g}{\partial u_0} \right) \mathbb{K} & \text{si } i > 0 \text{ et } k = 0 \\ M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} & \text{si } i > 0 \text{ et } k > 0 \end{cases} \quad (2.22)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{i,g} &= \begin{cases} 0 & \text{si } i = 0 \\ (-Q_l^i \rho_l - Q_g^i \rho_g) \mathbb{K} & \text{si } i > 0 \end{cases} \\
&= \begin{cases} 0 & \text{si } i = 0 \\ \left( -M^i c_l \frac{k_{r,l}}{\mu_l} \rho_l - M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \rho_g \right) \mathbb{K} & \text{si } i > 0 \end{cases} \quad (2.23)
\end{aligned}$$

$A_{i,k}$  et  $A_{i,g}$  sont appelés *tenseurs "elliptiques"*,  $C_{i,k}$  et  $C_{i,g}$  *tenseurs "hyperboliques"*.

### c. Formulation mathématique

Il reste à définir les conditions initiales et les conditions aux bords pour obtenir la formulation mathématique du problème étudié. Seuls deux types de conditions aux bords seront considérés, les conditions de type Dirichlet et de type Neumann. D'un côté, les conditions de type Dirichlet vont imposer la valeur des variables principales c'est-à-dire la pression du liquide  $P_l$  et les fractions molaires des gaz dissouts dans le liquide  $x_l^i$ ,  $i \in \{1, \dots, N\}$ . De l'autre, les conditions de type Neumann imposent la valeur du flux total de chaque composant  $i \in \{1, \dots, N\}$  défini en (2.13). Quant aux conditions initiales, celles-ci imposent la pression du liquide  $P_l$  ainsi que les fractions molaires des gaz dissouts dans le liquide  $x_l^i$ ,  $i \in \{1, \dots, N\}$ , au temps initial  $t = 0$ .

Soient  $T_f > 0$  un temps final,  $\Omega$  un domaine borné de  $\mathbb{R}^d$  de frontière  $\partial\Omega$  et  $N + 1$  partitions  $\Gamma_i^D \cup \Gamma_i^N = \partial\Omega$ ,  $i \in \{0, \dots, N\}$  de la frontière du domaine. Le problème d'écoulement se traduit alors par la formulation mathématique en  $(u_i(t, x))_{i=0, \dots, N}$  suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial X^i(u)}{\partial t} - \text{div}(\phi^i(u)) = \mathcal{F}^i & , \text{ dans } ]0, T_f[ \times \Omega \text{ et } i \in \{0, \dots, N\} \\ u_i(t=0) = u_i^0 & , \text{ dans } \Omega \text{ et } i \in \{0, \dots, N\} \\ u_i = u_i^D & , \text{ sur } ]0, T_f[ \times \Gamma_i^D \text{ et } i \in \{0, \dots, N\} \\ \phi^i(u) \cdot \nu = \phi^{i,N} \cdot \nu & , \text{ sur } ]0, T_f[ \times \Gamma_i^N \text{ et } i \in \{0, \dots, N\} \end{cases} \quad (2.24)$$

avec

$$\phi^i(u) = \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla u_k + A_{i,g}(u) g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C_{i,k}(u) \nabla u_k + C_{i,g}(u) g \right) \quad , \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.25)$$

$$\text{et} \quad \begin{cases} (u_i^0)_{i=0, \dots, N} & , \text{ les conditions initiales,} \\ (u_i^D)_{i=0, \dots, N} & , \text{ les conditions de type Dirichlet,} \\ (\phi^{i,N} \cdot \nu)_{i=0, \dots, N} & , \text{ les conditions de type Neumann,} \\ \nu & , \text{ la normale unitaire sortante.} \end{cases}$$

### 2.3.3 Méthode de résolution

La formulation mathématique précédemment construite (2.24) est un système d'équations aux dérivées partielles quasi-linéaires. La méthode utilisée pour résoudre le problème modélisé par cette formulation mathématique consiste à considérer une discrétisation en temps implicite et une procédure de "quasi-Newton" définie sur le problème semi-discret.

#### a. Discrétisation en temps

Soient  $\{t^n\}$  une famille des temps discrétisés telle que  $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^{N_T} = T_f$  où  $N_T$  est le nombre de pas de temps, et  $\Delta t^n = t^n - t^{n-1}$ , les pas de temps.

On note  $u^n(x) = u(t^n, x)$ .

La discrétisation implicite en temps du problème (2.24) pour  $u^0$  donné est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ Pour } n = 1, \dots, N_T \text{ et } \forall i \in \{0, \dots, N\}, u^n \text{ est solution de :} \\ \left\{ \begin{array}{ll} \frac{X^i(u^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} - \operatorname{div}(\phi^i(u^n)) & = \mathcal{F}^i(t^n, \cdot) \quad , \text{ sur } \Omega \\ u_i^n & = u_i^D(t^n, \cdot) \quad , \text{ sur } \Gamma_i^D \\ \phi^i(u^n) \cdot \nu & = \phi^{i,N}(t^n, \cdot) \cdot \nu \quad , \text{ sur } \Gamma_i^N \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (2.26)$$

#### b. Résolution de la non-linéarité

On va poser

$$C'_{i,k}(u) = C_{i,k}(u) \nabla u_k \quad , \quad \forall i, k \in \{0, \dots, N\}$$

Ce qui va donner :

$$\phi^i(u) = \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla u_k + A_{i,g}(u) g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u) g \right) \quad , \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad (2.27)$$

On va définir  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\mathcal{A}^i(u) v \equiv -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla v_k + A_{i,g}(u) g + v_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u) g \right) \right) \quad (2.28)$$

où, pour  $u$  donné,  $\mathcal{A}^i(u)$  est un opérateur différentiel linéaire en  $v$ ,

ainsi que :

$$F^i(u) \equiv \frac{X^i(u^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} + \mathcal{A}^i(u)u - \mathcal{F}^i(t^n, \cdot) \quad (2.29)$$

et

$$G^i(u) \equiv \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla u_k + A_{i,g}(u)g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u)g \right) - \phi^{i,N}(t^n, \cdot) \quad (2.30)$$

de sorte que  $u^n$  soit alors solution de :

$$\begin{cases} F^i(u) = 0 & , \text{ sur } \Omega \\ u_i^n = u_i^D(t^n, \cdot) & , \text{ sur } \Gamma_i^D \\ G^i(u^n) \cdot \nu = 0 & , \text{ sur } \Gamma_i^N \end{cases} \quad (2.31)$$

La méthode de Newton pour ce type de problème consiste à construire une suite  $(u_{\cdot,q}^n)_q$  avec

$$(u_{\cdot,q}^n)_q = \begin{cases} u_{0,q}^n & \text{concerne le solvant} \\ u_{i,q}^n, i > 0 & \text{concerne le } i\text{-ième composant gaz} \end{cases}$$

définie par :

$$\begin{cases} \bullet (u_{\cdot,0}^n) \text{ donné :} \\ \bullet \text{ Pour } q \geq 0, u_{\cdot,q+1}^n = u_{\cdot,q}^n + \Delta u_{\cdot,q}^n \text{ où } \Delta u_{\cdot,q}^n \text{ est solution du problème :} \\ \left\{ \begin{array}{l} DF^i(u_{\cdot,q}^n) \Delta u_{\cdot,q}^n = -F^i(u_{\cdot,q}^n) \text{ , sur } \Omega, i \in \{0, \dots, N\} \\ \Delta u_{i,q}^n = u_i^D(t^n, \cdot) - u_{i,q}^n \text{ , sur } \Gamma_i^D, i \in \{0, \dots, N\} \\ (DG^i(u_{\cdot,q}^n) \Delta u_{\cdot,q}^n) \cdot \nu = -G^i(u_{\cdot,q}^n) \cdot \nu \text{ , sur } \Gamma_i^N, i \in \{0, \dots, N\} \end{array} \right. \end{cases} \quad (2.32)$$

où  $DF^i(u)$  et  $DG^i(u)$  sont respectivement la différentielle de  $F^i$  et la différentielle de  $G^i$  en  $u$ .

Par le calcul (cf. **Annexe B**), on obtient,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$DF^i(u)v \equiv \mathcal{J}^i(u)v = \left( \frac{1}{\Delta t^n} J_{X^i}(u) + \mathcal{A}^i(u) \right) v$$

avec  $J_{X^i}$  la jacobienne de  $X^i$

$$J_{X^i}(u) = \left( \frac{\partial X^i}{\partial u_j}(u) \right)_{j=0, \dots, N}^T$$

et

$$DG^i(u)v = \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla v_k + v_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u)g \right)$$

La méthode de "quasi-Newton" ainsi obtenue permet donc de construire une suite  $(u_{\cdot,q}^n)_q$  définie par :

$$\begin{cases} \bullet (u_{\cdot,0}^n) \text{ donné, } i \in \{0, \dots, N\} : \\ \bullet \text{ Pour } q \geq 0, u_{\cdot,q+1}^n = u_{\cdot,q}^n + \Delta u_{\cdot,q}^n \text{ où } \Delta u_{\cdot,q}^n \text{ est solution du problème :} \\ \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{J}^i(u_{\cdot,q}^n) \Delta u_{\cdot,q}^n = -F^i(u_{\cdot,q}^n) \text{ sur } \Omega \\ \Delta u_{i,q}^n = u_i^D(t^n, \cdot) - u_{i,q}^n \text{ sur } \Gamma_i^D \\ \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla (\Delta u_{k,q}^n) + \Delta u_{i,q}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n)g \right) \right) \cdot \nu = -G^i(u_{\cdot,q}^n) \cdot \nu \text{ sur } \Gamma_i^N \\ \hspace{15em} + A_{i,g}(u_{\cdot,q}^n)g \cdot \nu \end{array} \right. \end{cases} \quad (2.33)$$

Pour  $n$  et  $i$  fixés, il paraît intéressant de regarder le problème pour lequel  $u_{\cdot,q+1}^n$  définie par (2.33) est solution. Concernant l'équation d'évolution :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}^i(u_{\cdot,q}^n) u_{\cdot,q+1}^n &= \mathcal{J}^i(u_{\cdot,q}^n) (u_{\cdot,q}^n + \Delta u_{\cdot,q}^n) \\
 &= \mathcal{J}^i(u_{\cdot,q}^n) u_{\cdot,q}^n + \mathcal{J}^i(u_{\cdot,q}^n) \Delta(u_{\cdot,q}^n) \\
 &= \mathcal{J}^i(u_{\cdot,q}^n) u_{\cdot,q}^n - F^i(u_{\cdot,q}^n) \\
 \left( \frac{1}{\Delta t^n} J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) + \mathcal{A}^i(u_{\cdot,q}^n) \right) u_{\cdot,q+1}^n &= \left( \frac{1}{\Delta t^n} J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) + \mathcal{A}^i(u_{\cdot,q}^n) \right) u_{\cdot,q}^n \\
 &\quad - \frac{X^i(u_{\cdot,q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} - \mathcal{A}^i(u_{\cdot,q}^n) u_{\cdot,q}^n + \mathcal{F}^i(t^n, \cdot)
 \end{aligned}$$

ce qui donne

$$J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) \left( \frac{u_{\cdot,q+1}^n - u_{\cdot,q}^n}{\Delta t^n} \right) + \mathcal{A}^i(u_{\cdot,q}^n) u_{\cdot,q+1}^n = \mathcal{F}^i(t^n, \cdot) - \frac{X^i(u_{\cdot,q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n}$$

soit

$$\begin{aligned}
 &J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) \left( \frac{u_{\cdot,q+1}^n - u_{\cdot,q}^n}{\Delta t^n} \right) \\
 &- \operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla u_{k,q+1}^n + A_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g + u_{i,q+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \right) \right) \\
 &= \mathcal{F}^i(t^n, \cdot) - \frac{X^i(u_{\cdot,q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \quad \text{sur } \Omega
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Concernant la condition de Dirichlet, on a :

$$\begin{aligned}
 u_{\cdot,q+1}^n &= u_{\cdot,q}^n + \Delta u_{\cdot,q}^n \\
 &= u_{\cdot,q}^n + u_i^D(t^n, \cdot) - u_{\cdot,q}^n \\
 &= u_i^D(t^n, \cdot) \quad \text{sur } \Gamma_i^D
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Concernant la condition de Neumann, on a :

$$\begin{aligned}
 &\left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla u_{k,q+1}^n + u_{i,q+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \right) \right) \cdot \nu \\
 &= \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla u_{k,q}^n + u_{i,q}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \right) \right) \cdot \nu \\
 &\quad + \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla (\Delta u_{k,q}^n) + \Delta u_{i,q}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \right) \right) \cdot \nu \\
 &= \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla u_{k,q}^n + u_{i,q}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \right) \right) \cdot \nu \\
 &\quad - G^i(u_{\cdot,q}^n) \cdot \nu + A_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \cdot \nu \\
 &= \phi^{i,N}(t^n, \cdot) \cdot \nu \quad \text{sur } \Gamma_i^N
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Il vient que  $u_{\cdot,q+1}^n$  est solution du problème défini par (2.34)-(2.35)-(2.36). D'où l'algorithme suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l}
\bullet u_{\cdot,0}^n \text{ donné : } u_{\cdot,0}^n = u^{n-1} \\
\bullet \text{ Pour } q \geq 0, u_{\cdot,q+1}^n \text{ est solution du problème linéaire suivant :} \\
\left\{ \begin{array}{ll}
J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) \cdot \left( \frac{u_{\cdot,q+1}^n - u_{\cdot,q}^n}{\Delta t^n} \right) - \operatorname{div}(\psi^i(u_{\cdot,q}^n, u_{\cdot,q+1}^n)) &= \mathcal{F}^i(t^n) - \frac{X^i(u_{\cdot,q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n}, \\
\text{sur } \Omega, i \in \{0, \dots, N\} \\
u_{i,q+1}^n &= u_i^D(t^n), \text{ sur } \Gamma_i^D, i \in \{0, \dots, N\} \\
\psi^i(u_{\cdot,q}^n, u_{\cdot,q+1}^n) \cdot \nu &= \phi^{i,N}(t^n, \cdot), \text{ sur } \Gamma_i^N, i \in \{0, \dots, N\}
\end{array} \right.
\end{array} \right. \quad (2.37)$$

avec  $J_{X^i}(u)$  la jacobienne de  $X^i(u)$  et  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$ ,

$$\psi^i(u_{\cdot,q}^n, u_{\cdot,q+1}^n) = \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla u_{k,q+1}^n + A_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g + u_{i,q+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C_{i,k}(u_{\cdot,q}^n) \nabla u_{k,q}^n + C_{i,g}(u_{\cdot,q}^n) g \right)$$

Cet algorithme peut se réécrire :

$$\left\{ \begin{array}{l}
\bullet u_{\cdot,0}^n \text{ donné : } u_{\cdot,0}^n = u^{n-1} \\
\bullet \text{ Pour } q \geq 0, u_{\cdot,q+1}^n \text{ est solution du problème linéaire suivant :} \\
\left\{ \begin{array}{ll}
J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) \cdot \frac{u_{\cdot,q+1}^n}{\Delta t^n} - \operatorname{div}(\psi^i(u_{\cdot,q}^n, u_{\cdot,q+1}^n)) &= \mathcal{F}^i(t^n) - \frac{X^i(u_{\cdot,q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \\
&- J_{X^i}(u_{\cdot,q}^n) \frac{u_{\cdot,q}^n}{\Delta t^n}, \text{ sur } \Omega, i \in \{0, \dots, N\} \\
u_{i,q+1}^n &= u_i^D(t^n), \text{ sur } \Gamma_i^D, i \in \{0, \dots, N\} \\
\psi^i(u_{\cdot,q}^n, u_{\cdot,q+1}^n) \cdot \nu &= \phi^{i,N}(t^n, \cdot), \text{ sur } \Gamma_i^N, i \in \{0, \dots, N\}
\end{array} \right.
\end{array} \right. \quad (2.38)$$

## Chapitre 3

# Formulation variationnelle

Dans ce chapitre, il sera question d'appliquer la méthode de Galerkin Discontinue au système d'EDP (3.1) dans l'espace  $\Omega \in \mathbb{R}^d$  où  $d = 1, 2, 3$ . On considère le problème consistant à trouver  $u = (u_i)_{i=0, \dots, N} = (P_l, (x_l^i)_{i=1, \dots, N})$  solution de :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_{X^i}(u_{\cdot, q}^n) \cdot \frac{u_{\cdot, q+1}^n}{\Delta t^n} - \operatorname{div}(\psi^i(u_{\cdot, q}^n, u_{\cdot, q+1}^n)) = \mathcal{F}^i(t^n) - \frac{X^i(u_{\cdot, q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \\ - J_{X^i}(u_{\cdot, q}^n) \frac{u_{\cdot, q}^n}{\Delta t^n}, \quad \text{sur } \Omega, \quad i \in \{0, \dots, N\} \\ \psi^i(u_{\cdot, q}^n, u_{\cdot, q+1}^n) \cdot \nu = u_i^D(t^n), \quad \text{sur } \Gamma_i^D, \quad i \in \{0, \dots, N\} \\ \psi^i(u_{\cdot, q}^n, u_{\cdot, q+1}^n) \cdot \nu = \phi^{i, N}(t^n, \cdot), \quad \text{sur } \Gamma_i^N, \quad i \in \{0, \dots, N\} \end{array} \right. \quad (3.1)$$

avec

$$\psi^i(u_{\cdot, q}^n, u_{\cdot, q+1}^n) = \sum_{k=0}^N A_{i, k}(u_{\cdot, q}^n) \nabla u_{k, q+1}^n + A_{i, g}(u_{\cdot, q}^n) g + u_{i, q+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C_{i, k}(u_{\cdot, q}^n) \nabla u_{k, q}^n + C_{i, g}(u_{\cdot, q}^n) g \right)$$

### 3.1 Définitions et notations

On introduit une triangulation  $\mathcal{T}_h$  de  $\Omega$  et l'espace des éléments finis discontinus :

$$V_h \equiv \mathbb{P}_d^k(\mathcal{T}_h) = \left\{ v \in L^2(\Omega) \quad ; \quad v|_T \in \mathbb{P}_d^k, \quad T \in \mathcal{T}_h \right\}$$

où  $\mathbb{P}_d^k$  est l'ensemble des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à  $k$ .

L'ensemble des faces du maillage est noté  $F_h$  qui est partitionné en 2 sous-ensembles  $F_h^i$  et  $F_h^b$  correspondant respectivement aux faces intérieures et celles situées sur le bord du domaine. Pour  $F \in F_h^i$ , on note arbitrairement  $T_1$  et  $T_2$ , les 2 éléments partageant la face  $F$ .

On définit le vecteur unitaire  $n_F$  normal sortant dirigé de  $T_1$  vers  $T_2$ . De plus,  $v_1$  et  $v_2$  représentent respectivement la restriction de la fonction  $v$  aux éléments  $T_1$  et  $T_2$ . Dès lors, il est possible de définir les opérateurs de saut  $\llbracket v \rrbracket_F$  :

$$\llbracket v \rrbracket_F = v_1 - v_2$$

et de moyenne  $\{\cdot\}_F$  sur une face  $F$  :

$$\{v\}_F = \frac{v_1 + v_2}{2}$$

Concernant les faces de bord, on a :

$$\llbracket v \rrbracket_F = \{v\}_F = v$$

## 3.2 Discrétisation en espace

On va discrétiser le problème (3.1) en commençant par discrétiser le problème suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\operatorname{div}(\psi^i(w_{\cdot,q}^n, w_{\cdot,q+1}^n)) = \mathcal{F}^i(t^n), \text{ sur } \Omega, i \in \{0, \dots, N\} \\ w_{i,q+1}^n = u_i^D(t^n), \text{ sur } \Gamma_i^D, i \in \{0, \dots, N\} \\ \psi^i(w_{\cdot,q}^n, w_{\cdot,q+1}^n) \cdot \nu = \phi^{i,N}(t^n, \cdot), \text{ sur } \Gamma_i^N, i \in \{0, \dots, N\} \end{array} \right. \quad (3.2)$$

avec

$$\psi^i(w_{\cdot,q}^n, w_{\cdot,q+1}^n) = \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w_{\cdot,q}^n) \nabla w_{k,q+1}^n + A_{i,g}(w_{\cdot,q}^n) g + w_{i,q+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C_{i,k}(w_{\cdot,q}^n) \nabla w_{k,q}^n + C_{i,g}(w_{\cdot,q}^n) g \right)$$

Le problème suivant permet d'obtenir la formulation variationnelle due à la méthode DG. Pour  $w \in V_h$  connu, il s'agit de trouver  $u \in V_h$  satisfaisant :

$$\begin{aligned} & \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v + \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) v \\ &= \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v, \quad \forall v \in V_h \end{aligned} \quad (3.3)$$

avec  $i \in \{0, \dots, N\}$ .

La formulation variationnelle qui en découle s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in V_h \text{ tel que :} \\ a(w; u, v) + c(w; u, v) = L(w; v), \quad \forall v \in V_h \end{array} \right. \quad (3.4)$$

avec (cf. Annexe C)



$$\begin{aligned}
a(w; u, v) = & \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \\
& - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) \cdot n_F \cdot v + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \right) \cdot n_F \cdot u_k \\
& + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v \\
& - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot [v] + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_k] \\
& + \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k][v]
\end{aligned}$$

où  $\sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k][v]$  correspond au terme dit de pénalisation assurant la coercivité du schéma.

$\eta$  est une constante positive et  $h_F$ , le diamètre de l'élément  $T$ .

$$\begin{aligned}
c(w; u, v) = & \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
& - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v]
\end{aligned}$$

$\{\cdot\}$  définit le *flux numérique* (cf. **Annexe C**).

$$\begin{aligned}
L(w; v) = & \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v - \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v \\
& + \sum_{F \in F_h^D} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v + \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( u_i^D \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\
& + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F \cdot u_k^D + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k^D \cdot v \\
& + \sum_{F \in F_h^N} \int_F \phi^{i,N}
\end{aligned}$$

$\forall i \in \{0, \dots, N\}$ .

Le paramètre  $\epsilon$  permet de définir le type de méthode de Galerkin Discontinue utilisée :

- si  $\epsilon = -1$ , la méthode est qualifiée de *Symmetric Interior Penalty Galerkin* (abr. **SIPG**),
- si  $\epsilon = 0$ , la méthode est qualifiée de *Incomplete Interior Penalty Galerkin* (abr. **IIPG**),
- si  $\epsilon = 1$ , la méthode est qualifiée de *Nonsymmetric Interior Penalty Galerkin* (abr. **NIPG**).

On présente, ici, 2 flux numériques, centré et décentré (*upwind*), que l'on définit par :

**Flux centré**

$$\left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} = \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\}, \quad i \in \{0, \dots, N\}$$

**Flux upwind**

$$\left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} = \begin{cases} \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \Big|_{T_1} \cdot n_F, \\ \quad \text{si } \left\{ \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right\} \cdot n_F > 0 \\ \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \Big|_{T_2} \cdot n_F, \\ \quad \text{si } \left\{ \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right\} \cdot n_F \leq 0 \end{cases}, i \in \{0, \dots, N\}$$

**3.2.1 Propriétés de la forme bilinéaire**

Dans cette section, il sera question de vérifier que la forme bilinéaire  $a(w; u, v) + c(w; u, v)$  de la formulation variationnelle précédente est bien consistante, stable et continue.

**a. Consistance**

$a(w; u, v) + c(w; u, v)$  est consistante si, pour  $u$  solution du problème, on obtient l'égalité :

$$a(w; u, v) + c(w; u, v) = L(w; v), \quad \forall v \in V_h.$$

On va commencer par travailler sur  $a(w; u, v)$ . D'après la formule de Green, le premier terme de l'expression de  $a$  donne :

$$\sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v = \sum_{T \in T_h} \left[ \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) v + \int_{\partial T} \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \right]$$

On va maintenant réécrire le terme d'intégrale sur le bord  $\partial T$  précédemment obtenu en considérant  $\mathcal{F}_T$  l'ensemble des faces de l'élément  $T$  :

$$\begin{aligned}
\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial T} \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v &= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{F \in \mathcal{F}_T} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&= \sum_{F \in \mathcal{F}_h} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&= \sum_{F \in \mathcal{F}_h^b} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \int_F \left[ \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_T \cdot v \right] \Big|_{T_1} \right. \\
&\quad \left. + \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_T \cdot v \right] \Big|_{T_2} \right] \\
&= \sum_{F \in \mathcal{F}_h^b} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \right] \\
&= \sum_{F \in \mathcal{F}_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \int_F \left\{ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right\} \cdot n_F \cdot \llbracket v \rrbracket \\
&\quad + \underbrace{\sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right] \cdot n_F \cdot \{v\}}_{=0 \text{ cf. [6]}} \\
&= \sum_{F \in \mathcal{F}_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \int_F \left\{ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right\} \cdot n_F \cdot \llbracket v \rrbracket
\end{aligned}$$

Ceci permet d'écrire

$$\begin{aligned}
a(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) \cdot n_F \cdot v + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \right) \cdot n_F \cdot u_k \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot [v] + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_k] \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] [v] \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) v + \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) \cdot n_F \cdot v + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \right) \cdot n_F \cdot u_k \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot [v] + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_k] \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] [v] \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) v + \sum_{F \in F_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N \left( \epsilon A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F + \frac{\eta}{h_F} v \right) \cdot u_k
\end{aligned}$$

Il reste maintenant à travailler sur  $c(w; u, v)$ .

En intégrant par partie le premier terme de  $c$ , on a :

$$\begin{aligned}
& \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
&= \sum_{T \in T_h} \left[ \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot v \right. \\
&\quad \left. + \int_{\partial T} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_T \cdot v \right]
\end{aligned}$$

En considérant le flux centré, le terme d'intégrale sur les faces de  $T$  apparu se réécrit :

$$\begin{aligned}
& \sum_{T \in T_h} \int_{\partial T} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_T \cdot v \\
&= \sum_{F \in F_h} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_T \cdot v \\
&= \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_T \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_T \cdot \llbracket v \rrbracket \\
&\quad + \underbrace{\sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \right] \cdot n_T \cdot \{v\}}_{=0 \text{ cf Annexe C}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_T \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_T \cdot \llbracket v \rrbracket
\end{aligned}$$

Ceci permet d'écrire  $c$  comme suit :

$$\begin{aligned}
c(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\
&= \sum_{T \in T_h} \left[ \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot v \right. \\
&\quad \left. + \int_{\partial T} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_T \cdot v \right] \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v
\end{aligned}$$

Finalement, en sommant les termes de  $a(w; u, v)$  et  $c(w; u, v)$ , il vient :

$$\begin{aligned}
a(w; u, v) + c(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) v \\
&+ \sum_{F \in F_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\
&+ \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N \left( \epsilon A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F + \frac{\eta}{h_F} v \right) \cdot u_k \\
&- \sum_{T \in T_h} \int_T \operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot v \\
&+ \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v
\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}
&\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) v - \sum_{T \in T_h} \int_T \operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot v \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v + \sum_{T \in T_h} \int_T \operatorname{div} (A_{i,g}(w) \cdot g) v \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v - \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v + \sum_{T \in T_h} \int_{\partial T} A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_T \cdot v \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v - \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v + \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v
\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
a(w; u, v) + c(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v - \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v \\
&+ \sum_{F \in F_h^D} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v \\
&+ \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( u_i^D \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\
&+ \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N \left( \epsilon A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F + \frac{\eta}{h_F} v \right) \cdot u_k \\
&+ \sum_{F \in F_h^N} \int_F \phi^{i,N} \\
&= L(w; v)
\end{aligned}$$

Ce qui prouve la consistance de  $a(w; u, v) + c(w; u, v)$ .

### b. Stabilité

On considère les normes suivantes :

Pour tout  $v \in V_h := \mathbb{P}_d^k$ ,

$$\begin{cases} \|v\|_{GD} := \left( \|\nabla v|_T\|_{L^2(\Omega)^d}^2 + |v|_J^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ |v|_J^2 := \sum_{F \in F_h} \frac{1}{h_F} \|\llbracket v \rrbracket\|_{L^2(F)}^2 \end{cases}$$

La forme bilinéaire  $a(w; u, v) + c(w; u, v)$  est stable si il existe une constante positive  $C_s$  telle que, pour  $w$  connu :

$$\forall v \in V_h, \quad a(w; v, v) + c(w; v, v) \geq C_s \|v\|_{GD}^2$$

Le schéma est stable par construction (cf. **Annexe C** et [6]) dû au terme de pénalisation  $\eta$  qui doit être choisi convenablement.

### c. Continuité

On introduit la norme suivante :

$$\forall v \in V_h, \quad \|v\|_{GD,*}^2 := \|v\|_{GD}^2 + \sum_{T \in T_h} h_T \int_{\partial T} |\{\nabla v\} \cdot n_F|^2$$

La forme bilinéaire  $a(w; u, v) + c(w; u, v)$  est continue si il existe une constante positive  $C_c$  telle que, pour  $w$  connu :

$$\forall (u, v) \in V_h \times V_h, \quad a(w; u, v) + c(w; u, v) \leq C_c \|u\|_{GD,*} \|v\|_{GD}$$

On commence à travailler sur les termes de  $a$  dont l'expression est rappelé ci-dessous :

$$\begin{aligned} a(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right) \cdot n_F \cdot v + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \right) \cdot n_F \cdot u_k \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot \llbracket v \rrbracket + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot \llbracket u_k \rrbracket \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N \llbracket u_k \rrbracket \llbracket v \rrbracket \end{aligned}$$

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a :



$$\sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \leq \left\| \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right\|_{L^2(\Omega)^d}^2 \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)^d}^2$$

On montre (cf. [4]) qu'il existe  $\lambda > 0$  tel que

$$\left\| \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right\|_{L^2(\Omega)^d}^2 \leq \lambda^2 \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)^d}^2$$

D'où

$$\begin{aligned} \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v &\leq \lambda^2 \|u\|_{GD} \|v\|_{GD} \\ &\leq \lambda^2 \|u\|_{GD,*} \|v\|_{GD} \end{aligned}$$

Concernant les termes de pénalisation, la majoration par  $\|u\|_{GD,*} \|v\|_{GD}$  est immédiate.

Concernant les intégrales sur les faces,

$$\begin{aligned} \sum_{F \in F_h} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot \llbracket u_k \rrbracket &\leq |u|_J \left( \sum_{F \in F_h} h_F \int_F \left| \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \right|^2 \right)^{1/2} \\ &\leq K \|u\|_{GD,*} \|v\|_{GD} \end{aligned}$$

où  $K$  est une constante positive.

Le raisonnement pour la majoration des termes de  $c$  s'apparente à celui précédemment opéré. En ce sens, il existe une constante  $C_c > 0$  telle que :

$$\forall (u, v) \in V_h \times V_h, \quad a(w; u, v) + c(w; u, v) \leq C_c \|u\|_{GD,*} \|v\|_{GD}$$

Donc  $a(w; u, v) + c(w; u, v)$  est bien continue.



## Chapitre 4

# Implémentation

Dans un premier temps, on va introduire la manière dont les intégrales seront calculées dans l'implémentation du schéma (pour plus d'informations, se reporter à [7] dont la suite s'inspire), puis dans un second temps, présenter les outils de développement ainsi que les fonctions obtenues.

### 4.1 Introduction de l'élément de référence

Implémenter la méthode de Galerkin Discontinue nécessite de calculer les intégrales sur les volumes (triangle ou quadrilatère en 2D, tétraèdre ou hexaèdre en 3D) et sur les faces (arêtes en 2D, triangle ou quadrilatère en 3D) de chaque élément du maillage. Il devient vite coûteux de calculer les intégrales sur chaque élément physique du maillage. En ce sens, une approche plus économique et plus efficace consiste à passer par un changement de variables afin d'obtenir une intégrale sur un élément fixe appelé élément de référence.

#### Elément de référence triangulaire

Il s'agit d'un triangle de sommets  $\hat{a}_1 = (0,0)$ ,  $\hat{a}_2 = (1,0)$  et  $\hat{a}_3 = (0,1)$ . Pour un élément  $T$  physique donné de sommets  $a_i(x_i, y_i)$  avec  $i = 1, 2, 3$ , il existe une unique transformation affine  $F_T$  qui envoie  $\hat{a}_i$  sur  $a_i$ , définie par :

$$F_T \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad x = \sum_{i=1}^3 x_i \hat{\phi}_i(\hat{x}, \hat{y}), \quad y = \sum_{i=1}^3 y_i \hat{\phi}_i(\hat{x}, \hat{y})$$

où

$$\hat{\phi}_1(\hat{x}, \hat{y}) = 1 - \hat{x} - \hat{y}, \quad \hat{\phi}_2(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{x}, \quad \hat{\phi}_3(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{y}.$$

Par conséquent, la première égalité peut se réécrire :

$$F_T \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = B_T \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} + b_T = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

où  $B_T$  est une matrice  $2 \times 2$  et  $b_T$  un vecteur de taille 2.

On montre facilement que :

$$B_T = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{pmatrix}, \quad b_T = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}.$$

De manière générale,  $B_T$  est la jacobienne de  $F_T$ .

De plus, on a :

$$\det(B_T) = 2|T|, \quad \text{où } |T| \text{ correspond à l'aire de } T.$$

En considérant ce changement de variables, il vient que pour toute fonction  $v$  définie sur  $T$ , la fonction  $\hat{v}$  sur  $\hat{T}$  est définie par :

$$\hat{v}(\hat{x}) = v(x) \iff \hat{v}(\hat{x}) = v \circ F_T(\hat{x})$$

où  $x \in T$  et  $\hat{x} \in \hat{T}$ .

On remarque que si  $\hat{v} = v \circ F_T$  alors :

$$\nabla \hat{v}(\hat{x}) = B_T^t \nabla v(x)$$

avec  $B_T^t$  la transposée de  $B_T$ .

On peut étendre cette définition aux dimensions supérieures. En considérant le simplexe de référence  $\hat{T}$  dont les sommets sont donnés par l'origine  $\hat{a}_0 = (0, \dots, 0)$  et les points  $\hat{a}_i$  dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la  $i$ -ème qui vaut 1, et en notant  $F_T$  l'unique transformation qui envoie  $\hat{a}_i$  sur  $a_i$  pour tout  $i = 0, \dots, d$ , on a :

$$F_T(\hat{x}) = B_T(\hat{x}) + b_T$$

où  $B_T$  est une matrice  $d \times d$  dont la  $i$ -ème colonne est donnée par les coordonnées de  $a_i - a_0$ .

Si le simplexe  $T$  est non-dégénéré,  $F_T$  est une bijection qui envoie  $\hat{T}$  sur  $T$  et la matrice  $B_T$  est inversible.

## 4.2 Fonctions de base

En raison de l'absence de contraintes de continuité entre les éléments du maillage pour les fonctions test, les fonctions de base de  $\mathbb{P}_d^k(T_h)$  ont un support contenu dans un élément. On a alors :

$$\mathbb{P}_d^k(T_h) = \text{Vect} \{ \phi_i^T ; 1 \leq i \leq N_{loc} ; T \in T_h \}$$

avec

$$\phi_i^T(x) = \begin{cases} \hat{\phi}_i^T \circ F_T^{-1}(x) & \text{si } x \in T \\ 0 & \text{si } x \notin T \end{cases}$$

La définition de  $\phi_i^T$  est immédiate puisqu'on veut que  $\phi_i^T(x) = \hat{\phi}_i^T(\hat{x})$  or  $\hat{x} = F_T^{-1}(x)$  donc  $\phi_i^T = \hat{\phi}_i^T \circ F_T^{-1}$ .

Les fonctions de base locale  $(\hat{\phi}_i^T)_{1 \leq i \leq N_{loc}}$  sont définies sur l'élément de référence. Il suffit d'utiliser les fonctions monômes. Par exemple, en 2D, on a :

$$\hat{\phi}_i^T(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{x}^I \hat{y}^J, \quad I + J = i, \quad 0 \leq i \leq k.$$

ceci correspondant à une dimension locale de :

$$N_{loc} = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

Pour les fonctions linéaires par morceaux ( $k = 1$ ), on a :

$$\hat{\phi}_0^T(\hat{x}, \hat{y}) = 1, \quad \hat{\phi}_1^T(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{x}, \quad \hat{\phi}_2^T(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{y}.$$

Pour les fonctions quadratiques par morceaux ( $k = 2$ ), on a :

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_0^T(\hat{x}, \hat{y}) &= 1, & \hat{\phi}_1^T(\hat{x}, \hat{y}) &= \hat{x}, & \hat{\phi}_2^T(\hat{x}, \hat{y}) &= \hat{y}, \\ \hat{\phi}_3^T(\hat{x}, \hat{y}) &= \hat{x}^2, & \hat{\phi}_4^T(\hat{x}, \hat{y}) &= \hat{x}\hat{y}, & \hat{\phi}_5^T(\hat{x}, \hat{y}) &= \hat{y}^2. \end{aligned}$$

De même, en 3D, on a :

$$\hat{\phi}_i^T(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \hat{x}^I \hat{y}^J \hat{z}^K, \quad I + J + K = i, \quad 0 \leq i \leq k.$$

ceci correspondant à une dimension locale de :

$$N_{loc} = \frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{6}$$

La flexibilité des méthodes de Galerkin Discontinue permet de changer facilement de fonctions de base.

### 4.3 Formules de quadrature

L'intégrale d'une fonction  $\hat{v}$  définie sur l'élément de référence  $\hat{T}$  peut être calculée en utilisant une formule de quadrature à  $N_q$  points :

$$\int_{\hat{T}} \hat{v} \approx \sum_{q=1}^{N_q} \omega_q \hat{v}(\xi_q) \quad (4.1)$$

Il s'agit d'une formule de quadrature de Gauss ; les points  $\xi_q$  sont les points de quadrature et les réels  $\omega_q$  sont les poids associés. La formule de quadrature est exacte pour une fonction  $\hat{v}$  lorsqu'il y a égalité dans (4.1).

Soit  $T$  un triangle ou un tétraèdre. La fonction  $F_T : \hat{T} \rightarrow T$  est affine, et on a :

$$\int_T v = \int_{\hat{T}} v \circ F_T \cdot \det(B_T) = 2|T| \int_{\hat{T}} \hat{v}$$

En considérant la formule de quadrature (4.1), cette intégrale peut être approchée par :

$$\int_T v \approx 2|T| \sum_{q=1}^{N_q} \omega_q \hat{v}(\xi_q)$$

Si l'intégrale implique une fonction  $z$  ainsi que le gradient d'une fonction  $v$ , on a :

$$\int_T \nabla v \cdot z \approx 2|T| \sum_{q=1}^{N_q} \omega_q (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{v}(\xi_q) \cdot \hat{z}(\xi_q)$$

D'une manière similaire, si l'intégrale implique les gradients de  $v$  et de  $z$ , on a :

$$\int_T \nabla v \cdot \nabla z \approx 2|T| \sum_{q=1}^{N_q} \omega_q (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{v}(\xi_q) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{z}(\xi_q)$$

#### 4.4 Matrices locales et second membre

On va rajouter les termes de dérivation par rapport au temps au système (3.4). Ainsi, au temps  $t^n$  et connaissant  $w^n$ , il s'agit de trouver  $u^n$  solution de :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(w^n) \cdot \frac{u^n}{\Delta t^n} \cdot v + a(w^n; u^n, v) + c(w^n; u^n, v) \\ = L(w^n; v) - \sum_{T \in T_h} \int_T \frac{X^i(w^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \cdot v - \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(w^n) \frac{w^n}{\Delta t^n} \cdot v \\ + \text{conditions énoncées en (3.1)} \end{array} \right. \quad (4.2)$$

sur  $\Omega$ ,  $i \in \{0, \dots, N\}$  avec  $N$  le nombre de composants gazeux.

En fait, l'approche initiale consistait à construire une suite  $(u_{\cdot, q}^n)_{q \in \mathbb{N}}$  où  $u_{\cdot, q}^n$  correspond au  $q$ -ième terme de la suite pour le  $i$ -ème composant (si  $i = 0$ , il s'agit de la pression  $P_l$ , et si  $i > 0$ , il s'agit des fractions molaires  $x_l^i$ ) au temps  $t^n$ , satisfaisant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(u_{\cdot, q}^n) \cdot \frac{u_{\cdot, q+1}^n}{\Delta t^n} \cdot v + a(u_{\cdot, q}^n; u_{\cdot, q+1}^n, v) + c(u_{\cdot, q}^n; u_{\cdot, q+1}^n, v) \\ = L(u_{\cdot, q}^n; v) - \sum_{T \in T_h} \int_T \frac{X^i(u_{\cdot, q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \cdot v - \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(u_{\cdot, q}^n) \frac{u_{\cdot, q}^n}{\Delta t^n} \cdot v \\ + \text{conditions énoncées en (3.1)} \end{array} \right. \quad (4.3)$$

sur  $\Omega$ ,  $i \in \{0, \dots, N\}$ .

Le principe de l'implémentation de la matrice du problème repose sur une construction par bloc. On appelle  $K$  la matrice du problème et  $F$  le second membre. Dans le cas étudié, on se place dans le cas où  $N = 1$  (2 composants : eau/hydrogène). Ce qui aboutit à la matrice par blocs  $K$  et au vecteur  $F$  suivants :

$$K = \begin{pmatrix} K_{00} & K_{01} \\ K_{10} & K_{11} \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \end{pmatrix}$$

On va appliquer la formule de quadrature aux termes apparaissant dans l'équation (4.3).

$$\begin{aligned}
 & \bullet \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{:,j}^n) \nabla u_{k,j+1}^n \cdot \nabla v \\
 &= 2|T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k A_{i,k} (u_{:,j}^n) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l (\xi_q) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m (\xi_q)
 \end{aligned}$$

où  $\omega_l^k$  est le poids dans la formule de quadrature associé au  $l$ -ième point de quadrature pour le  $k$ -ième composant ( $k = 0$ , équation pour  $P_l$  et  $k > 0$ , equation pour les  $x_l^i$ ).

En bouclant sur  $l$  et  $m$ , on a :

$$K_{ik}[m][l] = 2|T| \left( \omega_l^k \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q A_{i,k} (u_{:,j}^n) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l (\xi_q) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m (\xi_q) \right)$$

où  $m$  et  $l$  désignent respectivement les indices de ligne et de colonne de  $K_{ik}$ .

$$\begin{aligned}
 & \bullet \int_T \left( u_{i,j+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k} (u_{:,j}^n) + C_{i,g} (u_{:,j}^n) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
 &= 2|T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \hat{\phi}_l (\xi_q) \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k} (u_{:,j}^n) + C_{i,g} (u_{:,j}^n) g \right) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m (\xi_q)
 \end{aligned}$$

En bouclant sur  $l$  et  $m$ , on a :

$$K_{ii}[m][l] = 2|T| \left( \omega_l^i \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \hat{\phi}_l (\xi_q) \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k} (u_{:,j}^n) + C_{i,g} (u_{:,j}^n) g \right) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m (\xi_q) \right)$$

$$\bullet \int_T J_{X^i} (u_{:,j}^n) \cdot \frac{u_{:,j+1}^n}{\Delta t^n} \cdot v = 2|T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \frac{J_{X^i} (u_{:,j}^n)}{\Delta t^n} \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \hat{\phi}_l (\xi_q) \cdot \hat{\phi}_m (\xi_q)$$

En bouclant sur  $l$  et  $m$ , on a :

$$K_{ii}[m][l] = 2|T| \left( \omega_l^i \frac{J_{X^i} (u_{:,j}^n)}{\Delta t^n} \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \hat{\phi}_l (\xi_q) \cdot \hat{\phi}_m (\xi_q) \right)$$

$$\bullet \int_T F^i (t^n, \cdot) v = 2|T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q F^i (t^n, \cdot) \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} \hat{\phi}_m (\xi_q)$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = 2 |T| \left( \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q F^i(t^n, \cdot) \hat{\phi}_m(\xi_q) \right)$$

$$\bullet \quad - \int_T \frac{X^i(u_{\cdot,j}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \cdot v \quad = \quad -2 |T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \frac{X^i(u_{\cdot,j}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} \hat{\phi}_m(\xi_q)$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = -2 |T| \left( \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \frac{X^i(u_{\cdot,j}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \hat{\phi}_m(\xi_q) \right)$$

$$\bullet \quad \int_T J_{X^i}(u_{\cdot,j}^n) \cdot \frac{u_{\cdot,j}^n}{\Delta t^n} \cdot v \quad = \quad 2 |T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q J_{X^i}(u_{\cdot,j}^n) \cdot \frac{u_{\cdot,j}^n}{\Delta t^n} \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} \hat{\phi}_m(\xi_q)$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = 2 |T| \left( J_{X^i}(u_{\cdot,j}^n) \cdot \frac{u_{\cdot,j}^n}{\Delta t^n} \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \hat{\phi}_m(\xi_q) \right)$$

$$\bullet \quad - \int_T A_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \cdot \nabla v \quad = \quad -2 |T| \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q A_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \cdot \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m(\xi_q)$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = -2 |T| \left( \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q A_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m(\xi_q) \right)$$

Sur les faces de bord aux conditions de type de Dirichlet :

$$\begin{aligned} \bullet \quad & - \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) \cdot \nabla u_{k,j+1}^n \right) \cdot n_F \cdot v \\ & = \quad -2 |T| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \end{aligned}$$

En bouclant sur  $l$  et  $m$ , on a :



$$K_{ik}[m][l] = -2|T| \left( \omega_l^k \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q (u_{\cdot,j}^n) (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \right)$$

$$\begin{aligned} \bullet \quad & \epsilon \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \cdot \nabla v \right) \cdot n_F \cdot u_{k,j+1}^n \\ &= \epsilon 2|T| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \end{aligned}$$

En bouclant sur  $l$  et  $m$ , on a :

$$K_{ik}[m][l] = 2\epsilon|T| \left( \omega_l^k \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \right)$$

$$\bullet \quad \int_F \sum_{k=0}^N \frac{\eta}{h_F} u_{k,j+1}^n \cdot v = 2|T| \sum_{k=0}^N \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \frac{\eta}{h_F} \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q)$$

En bouclant sur  $l$  et  $m$ , on a :

$$K_{kk}[m][l] = 2|T| \frac{\eta}{h_F} \left( \omega_l^k \sum_{q=0}^{N_q^f-1} \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \right)$$

$$\bullet \quad \int_F A_{i,g} (u_{\cdot,j}^n) g \cdot n_F \cdot v = 2|T| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q A_{i,g} (u_{\cdot,j}^n) g \cdot n_F \cdot \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} \hat{\phi}_m^f(\xi_q)$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = 2|T| \left( \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q A_{i,g} (u_{\cdot,j}^n) g \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \right)$$

$$\begin{aligned} \bullet \quad & \int_F \left( u_i^{D,n} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g} (u_{\cdot,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\ &= 2|T| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} u_i^{D,n} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g} (u_{\cdot,j}^n) g \right) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \end{aligned}$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = 2|T| \left( \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q u_i^{D,n} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g} (u_{\cdot,j}^n) g \right) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \right)$$

$$\begin{aligned} \bullet \quad & \epsilon \int_F \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \cdot \nabla v \right) \cdot n_F \cdot u_k^{D,n} \\ &= \epsilon 2|T| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \cdot n_F \cdot u_k^{D,n} \end{aligned}$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = 2\epsilon |T| \left( \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \cdot n_F \cdot u_k^{D,n} \right)$$

$$\bullet \quad \int_F \sum_{k=0}^N \frac{\eta}{h_F} u_k^{D,n} \cdot v = 2|T| \sum_{k=0}^N \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \frac{\eta}{h_F} \sum_{m=0}^{N_{loc}-1} u_k^{D,n} \cdot \hat{\phi}_m^f (\xi_q)$$

En bouclant sur  $m$ , on a :

$$F_i[m] = 2|T| \frac{\eta}{h_F} \left( \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q u_i^{D,n} \cdot \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \right)$$

Sur les faces intérieures :

$$\begin{aligned} \bullet \quad & - \int_F \sum_{k=0}^N \{ A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \cdot \nabla u_{k,j+1}^n \} \cdot n_F \cdot \llbracket v \rrbracket \\ &= - \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla u_{k,j+1}^n \Big|_{T_1} \cdot n_F \cdot v \Big|_{T_1} \\ &\quad - \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla u_{k,j+1}^n \Big|_{T_2} \cdot n_F \cdot v \Big|_{T_1} \\ &\quad + \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla u_{k,j+1}^n \Big|_{T_1} \cdot n_F \cdot v \Big|_{T_2} \\ &\quad + \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla u_{k,j+1}^n \Big|_{T_2} \cdot n_F \cdot v \Big|_{T_2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -|T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&\quad - |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_2} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&\quad + |T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_2} \\
&\quad + |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_2} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_2}
\end{aligned}$$
  

$$\begin{aligned}
&\bullet \quad \epsilon \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \cdot \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_{k,j+1}^n] \\
&= \quad \epsilon \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla v|_{T_1} \cdot n_F \cdot u_{k,j+1}^n \Big|_{T_1} \\
&\quad + \epsilon \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla v|_{T_2} \cdot n_F \cdot u_{k,j+1}^n \Big|_{T_1} \\
&\quad - \epsilon \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla v|_{T_1} \cdot n_F \cdot u_{k,j+1}^n \Big|_{T_2} \\
&\quad - \epsilon \int_F \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \nabla v|_{T_2} \cdot n_F \cdot u_{k,j+1}^n \Big|_{T_2} \\
&= \quad \epsilon |T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&\quad + \epsilon |T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_2} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&\quad - \epsilon |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_1} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_2} \\
&\quad - \epsilon |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N A_{i,k} (u_{\cdot,j}^n) \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m^f (\xi_q) \Big|_{T_2} \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_l^f (\xi_q) \Big|_{T_2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_F \sum_{k=0}^N \frac{\eta}{h_F} [u_{k,j+1}^n] \cdot n_F \cdot [v] \\
&= \int_F \sum_{k=0}^N \frac{\eta}{h_F} \left( u_{k,j+1}^n|_{T_1} v|_{T_1} - u_{k,j+1}^n|_{T_1} v|_{T_2} - u_{k,j+1}^n|_{T_2} v|_{T_1} + u_{k,j+1}^n|_{T_2} v|_{T_2} \right) \\
&= |T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&\quad - |T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_2} \\
&\quad - |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_2} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&\quad + |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^k \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_2} \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_2}
\end{aligned}$$

Concernant le terme de flux convectif qui s'exprime comme suit :

$$- \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v]$$

celui-ci s'écrit de 2 manières différentes suivant le flux considéré.

Pour le flux centré, on considère le terme suivant :

$$\begin{aligned}
& \bullet - \int_F \left\{ u_{i,j+1}^n \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\
&= - \int_F \frac{1}{2} \left( u_{i,j+1}^n|_{T_1} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v|_{T_1} \\
&\quad + \int_F \frac{1}{2} \left( u_{i,j+1}^n|_{T_1} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v|_{T_2} \\
&\quad - \int_F \frac{1}{2} \left( u_{i,j+1}^n|_{T_2} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v|_{T_1} \\
&\quad + \int_F \frac{1}{2} \left( u_{i,j+1}^n|_{T_2} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{\cdot,j}^n) + C_{i,g}(u_{\cdot,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v|_{T_2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -|T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \left( \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&+ |T_1| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \left( \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_2} \\
&- |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \left( \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_2} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_1} \\
&+ |T_2| \sum_{q=0}^{N_q^f-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \left( \hat{\phi}_l^f(\xi_q) \Big|_{T_2} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \right) \cdot n_F \cdot \hat{\phi}_m^f(\xi_q) \Big|_{T_2}
\end{aligned}$$

Pour le flux décentré upwind, le terme considéré devient :

$$\begin{aligned}
&\bullet - \int_F \left( \alpha u_{i,j+1}^n \Big|_{T_1} + (1-\alpha) u_{i,j+1}^n \Big|_{T_2} \right) \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \cdot n_F \cdot v \\
&= -2|T_1| \alpha \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \hat{\phi}_l(\xi_q) \Big|_{T_1} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m(\xi_q) \\
&- 2|T_2| (1-\alpha) \sum_{q=0}^{N_q-1} W_q \sum_{\substack{l=0 \\ m=0}}^{N_{loc}-1} \omega_l^i \hat{\phi}_l(\xi_q) \Big|_{T_2} \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right) \cdot (B_T^t)^{-1} \hat{\nabla} \hat{\phi}_m(\xi_q)
\end{aligned}$$

où

$$\alpha = \begin{cases} 1, & \text{si } \left\{ \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right\} \cdot n_F > 0 \\ 0, & \text{si } \left\{ \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u_{.,j}^n) + C_{i,g}(u_{.,j}^n) g \right\} \cdot n_F \leq 0 \end{cases}, i \in \{0, \dots, N\}$$

Les intégrales sur les faces de bords aux conditions de type de Neumann sont immédiates à implémenter avec les outils de développement décrits ci-après.

A ce stade, tous les éléments pour simuler un écoulement liquide-gaz à plusieurs composants en milieu poreux sont présents et il est désormais possible de s'intéresser à la question de l'implémentation.

Les outils de développement retenus sont le langage C++ et la bibliothèque C++ *Libmesh* (Pour plus d'informations, se reporter à l'Annexe D).

## 4.5 Principales classes de l'implémentation

Parmi les classes présentes dans la bibliothèque LibMesh, celles qui serviront à l'implémentation sont, entre autres :

- **EquationSystems**, permet de contenir l'intégralité du problème. Cette classe contient notamment des **System**, et un conteneur générique (la classe **Parameters** de LibMesh) qui regroupe toutes les informations relatives au problème.
- **TransientQuasiLinearImplicitSystem** dérive de la classe **System** de LibMesh. Elle permet la résolution effective du problème en faisant avancer le schéma en temps et en résolvant à chaque pas de temps le problème défini en (3.1). Un de ses attributs est un pointeur de fonction vers la fonction d'assemblage du problème.
- **MathFormulation** s'initialise avant utilisation avec les pointeurs vers les fonctions permettant le calcul des termes de la formulation mathématique. Son utilisation "locale" (calcul des contributions sur un élément du maillage) requiert en plus de lui fournir l'identifiant du matériau, le modèle de comportement. Des méthodes permettent alors d'accéder aux termes de la formulation mathématique nécessaires au cours de l'assemblage.
- **Models** regroupe tous les modèles de comportement (les classes **ComponentBehaviorModel**, **MaterialBehaviorModel** et **PhaseBehaviorModel**). Les méthodes d'accès *set/get* se font avec un argument de type **enum** permettant de constituer une sorte de "dictionnaire" pour dialoguer avec les modèles de comportement.
- **BehaviorModel** permet de regrouper des pointeurs de fonctions et des paramètres internes sous une interface unique. Cette classe est à la base des classes **ComponentBehaviorModel**, **MaterialBehaviorModel** et **PhaseBehaviorModel**.
- **BoundaryConditionSet** regroupe des **BoundaryCondition** en leur associant un identifiant de bord (information issue du maillage) et un type de condition aux bords (exemple : Dirichlet ou Neumann).
- **BoundaryCondition** représente la valeur (*ie* une fonction de l'espace) d'une condition aux bords. Cette classe regroupe un pointeur vers une fonction et des paramètres pour celle-ci.
- **Mesh** fournit une description discrète d'un objet dans l'espace  $d$ -dimensionnel, où  $d = 1, 2, 3$ .
- **Elem** définit l'interface pour un élément géométrique. Elle encapsule toutes les notions abstraites liées au concept d'*élément* telles que le nombre de nœuds, son volume ou encore ses voisins.
- **Node** stocke la localisation dans l'espace des sommets  $(x, y, z)$  ainsi que des informations d'état supplémentaires et un numéro d'identification global unique.
- **FEBase** fournit l'interface générique pour toutes les familles d'éléments finis tels que Lagrange, Hermite ou Galerkin Discontinu. Cette classe fournit également des données essentielles pour les routines d'assemblage de matrices telles que les valeurs des fonctions de base et leurs gradients, la jacobienne, l'emplacement des points de quadrature dans l'espace physique, etc.
- **System** correspond à un système d'EDP d'une à plusieurs équations devant être résolu sur un maillage donné. LibMesh fournit plusieurs implémentations concrètes du système pour différents types de problème (linéaire, non linéaire, problèmes d'évolution ou de valeurs propres...).

## 4.6 Fonctions implémentées

Le schéma obtenu en (3.4) se traduit sous forme matricielle et permet ainsi de résoudre le problème initial. Les différentes fonctions que l'on a implémentées ont donc été réparties dans différentes *bibliothèques* afin de permettre de construire la matrice du problème ainsi que son second membre.

Les bibliothèques dont il est question sont :

- **compute\_bcs** contenant les fonctions permettant d'implémenter les termes d'intégrales sur les faces d'un élément suivant qu'il s'agit d'une face intérieure ou sur le bord du domaine. Dans ce

dernier cas, on veillera à déterminer le type de condition qui s'impose sur la face de l'élément concerné (Dirichlet ou Neumann).

Les fonctions de la bibliothèque sont :

- `computeDirichlet` pour les faces sur le bord du domaine concernées par une condition de Dirichlet,
- `computeNeumann` pour les faces sur le bord du domaine concernées par une condition de Neumann,
- `computeIntFace` pour les faces intérieures avec prise en compte du flux centré,
- `computeIntFaceUpwind` pour les faces intérieures avec prise en compte du flux décentré upwind.
- `transient_quasi_linear_implicit_system` contenant les fonctions permettant de construire la matrice du problème et son second membre. Ces dernières font appel aux fonctions de la bibliothèque `compute_bcs`.

Les fonctions de la bibliothèque sont :

- `computeGDMatrix` permettant d'implémenter les termes d'intégrales sur les éléments intervenant dans la matrice du problème et son second membre,
- `my_new_GD_center` permettant d'implémenter la matrice du problème et son second membre en appelant les fonctions précédemment citées en prenant en compte le flux centré,
- `my_new_GD_upwind` assurant les mêmes opérations que `my_new_GD_center` mais en prenant en compte le flux décentré upwind.

Grossièrement, l'algorithme de construction de la matrice et du second membre de l'équation est :

```

for  $T \in T_h$  do
  for  $q < N_q$  do
    for  $i < N$  do
      Execution de computeGDMatrix
    end for
  end for
  for  $F \in \partial T$  do
    if  $F \in \partial\Omega$  then
      for  $q < N_q^f$  do
        for  $i < N$  do
          if  $F \in \partial\Omega^D$  then
            Execution de computeDirichlet
          else
            Execution de computeNeumann
          end if
        end for
      end for
    end for
  else
    for  $q < N_q^f$  do
      Execution de computeIntFace
    end for
  end for

```

```
    end if  
  end for  
end for
```



## Chapitre 5

# Résultats numériques

Les cas tests utilisés sont proposés par le groupement **MoMaS** (**Modélisations Mathématiques** et **Simulations Numériques** liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires). On a confronté le code développé à ces cas tests et comparé les résultats obtenus à ceux présentés sur le site du GDR MoMaS ([http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test.html](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test.html)).

L'ensemble des cas tests se déroule dans un domaine rectangulaire  $\Omega$  (cf. **Figure 5.1**) de longueur  $L_x = 200\text{ m}$  et de hauteur  $L_y = 5\text{ m}$  où l'on distingue 3 types de frontière :  $\Gamma_{in}$  – frontière d'entrée,  $\Gamma_{out}$  – frontière de sortie et  $\Gamma_{imp}$  – frontière imperméable.

De plus, on ne considèrera que les cas où les termes sources  $F^i$  sont nuls sur tout le domaine.

On note par la suite  $\nu$  la normale sortante du domaine.

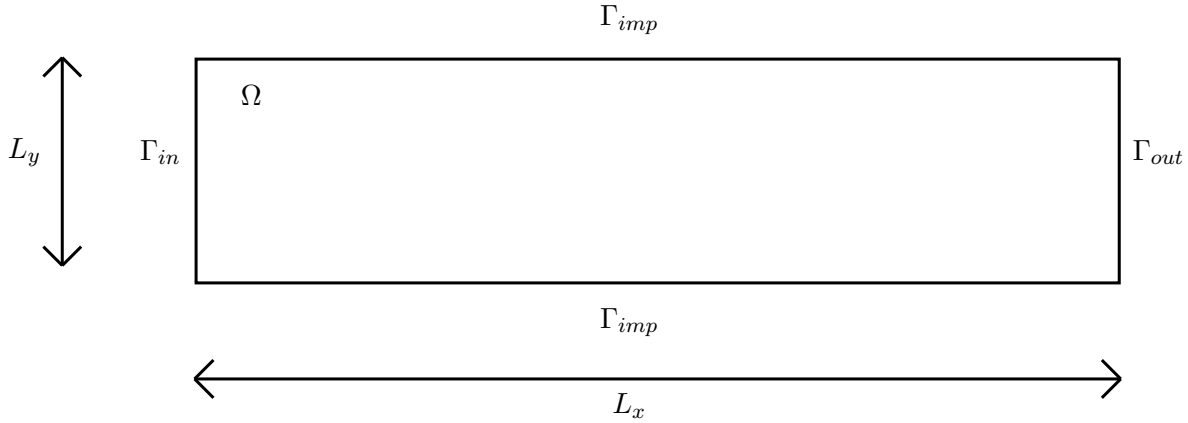
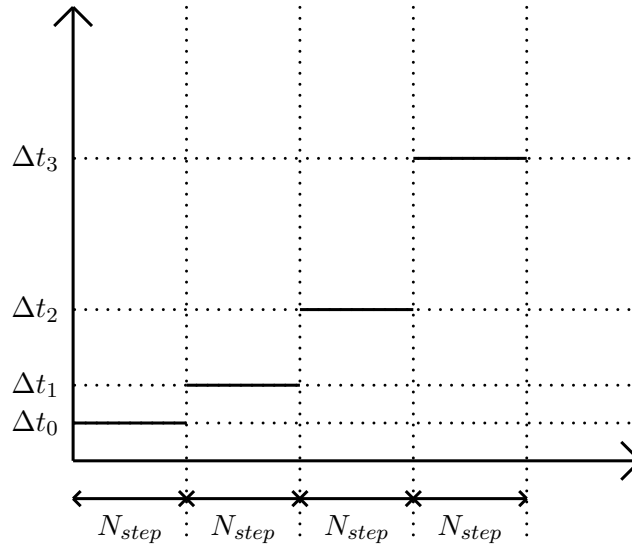


FIGURE 5.1 – Domaine  $\Omega$ .

### 5.1 Précisions sur la discrétisation en temps

On note  $N_{step}$  la longueur d'un palier,  $N_{pal}$  le nombre de paliers et  $\alpha$  la hauteur d'un palier. Le principe de discrétisation est décrit en **Figure 5.2** :

FIGURE 5.2 – Discretisation en temps avec  $\alpha = 2$  et  $N_{pal} = 4$ 

Les valeurs de  $N_{pal}$  et de  $\alpha$  sont imposées par l'utilisateur. On pose  $\Delta t_0$  le pas de temps initial. La suite des pas de temps est définie par :

$$\Delta t_n = \Delta t_0 \times \alpha^n$$

avec  $n \in \mathbb{N}$  et  $n < N_{pal}$ .

En appliquant cette formule, le dernier pas de temps est donné par la relation suivante :

$$\Delta t_F = \Delta t_0 \cdot \alpha^{N_{pal}-1}$$

On détermine  $N_{step}$  de la façon suivante :

$$T_{fin} = \sum_{n=0}^{N_{pal}-1} (N_{step} \times \Delta t_0 \times \alpha^n)$$

D'où

$$N_{step} = \frac{T_{fin}}{\Delta t_0 \sum_{n=0}^{N_{pal}-1} \alpha^n}$$

## 5.2 Cas test 1 : Injection de gaz dans un milieu saturé en eau pure

Plus d'informations disponibles sur : [http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test/sature\\_1.pdf](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test/sature_1.pdf)

On considère un milieu poreux isotrope homogène. La température est fixée à  $T = 303 \text{ K}$ .

Les conditions limites sont définies par :

- des conditions de flux nuls sur la frontière imperméable  $\Gamma_{imp}$ ,

$$\phi^w \cdot \nu = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \nu = 0;$$

- une injection d'hydrogène pur sur la frontière d'entrée  $\Gamma_{in}$ ,

$$\phi^w \cdot \nu = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \nu = \begin{cases} Q^h & \text{si } 0 \leq t \leq T_{inj} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases};$$

- des conditions de Dirichlet (eau liquide pure de pression,  $P_l$ , fixée) sur la frontière de sortie  $\Gamma_{out}$ ,

$$P_l = P_{l,out} \quad \text{et} \quad X^h = 0.$$

Les conditions initiales considérées correspondent à l'état stationnaire du système sans injection d'hydrogène, il s'agit donc de conditions uniformes vérifiant sur tout le domaine,

$$P_l = P_{l,out} \quad \text{et} \quad X^h = 0.$$

Les données physiques sont :

Milieu poreux			Caractéristiques des fluides		
Paramètre	Valeur		Paramètre	Valeur	
$k$	$5 \cdot 10^{-20}$	$m^2$	$D_l^h$	$3 \cdot 10^{-9}$	$m^2/s$
$\Phi$	0.15	(-)	$\mu_l$	$1 \cdot 10^{-3}$	$Pa.s$
$P_r$	$2 \cdot 10^6$	$Pa$	$\mu_g$	$9 \cdot 10^{-6}$	$Pa.s$
$n$	1.49	(-)	$H(T = 303K)$	$7.65 \cdot 10^{-6}$	$mol/Pa/m^3$
$S_{lr}$	0.4	(-)	$M_l$	$10^{-2}$	$kg/mol$
$S_{gr}$	0	(-)	$M_g$	$2 \cdot 10^{-3}$	$kg/mol$
			$\rho_l^{std}$	$10^3$	$kg/m^3$
			$\rho_g^{std}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$kg/m^3$

TABLE 5.1 – Valeurs des paramètres du milieu poreux et caractéristiques des fluides.

Les paramètres du cas test ainsi que le temps de simulation,  $T_{simul}$ , sont donnés dans le **Tableau 5.2**.

Paramètre	Valeur	
$Q^h$	$5.57 \cdot 10^{-6}$	$mg/m^2/ans$
$P_{l,out}$	$10^6$	$Pa$
$T_{inj}$	$5 \cdot 10^5$	$ans$
$T_{simul}$	$10^6$	$ans$

TABLE 5.2 – Paramètres du cas test.

On a testé le cas avec plusieurs couples de paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l})$  valant  $(10^{-14}, 10^{-4})$ ,  $(10^{-14}, 10^{-5})$  et  $(10^{-15}, 10^{-4})$ . Ces couples ont été évalués empiriquement en cherchant les paramètres optimaux pour le cas stationnaire. Les résultats obtenus convergent vers la même solution (cf. **Figure**

5.3, Figure 5.4, Figure 5.5). On constate ainsi que durant la première période d'injection c'est-à-dire pour  $t < 5 \cdot 10^5$  années, l'hydrogène injecté en entrée (sur le bord gauche du domaine) se dissout dans le liquide au point de s'accumuler suffisamment jusqu'à l'apparition de la phase gazeuse. La zone insaturée se propage jusqu'aux trois-quarts du domaine. Un fois l'injection d'hydrogène arrêtée (pour  $t > 5 \cdot 10^5$ ), le système revient à l'équilibre (la condition initiale). L'hydrogène présent dans le domaine s'échappe par la sortie du domaine sous forme dissoute; le gaz n'étant pas présent à cet endroit. La zone insaturée se réduit jusqu'à disparaître.

En comparant aux résultats obtenus par les simulations du Gdr MoMas disponibles sur

[http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test/resultats/sature\\_1.pdf](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test/resultats/sature_1.pdf),

on constate que qualitativement, les évolutions de la pression du liquide et du gaz, et de la saturation du gaz en entrée sont identiques. Cependant, en termes quantitatifs, les valeurs se différencient. En effet, les tests MoMas montrent que le maximum qu'atteint  $P_l$  en entrée du domaine est d'environ  $1.14 \cdot 10^6 Pa$  alors que les simulations présentées ci-dessous montrent que le maximum est environ de  $1.05 \cdot 10^6 Pa$ . De même, les minimums sont différents avec une valeur de  $750\,000 Pa$  pour le test MoMas, et  $860\,000 Pa$  pour nos simulations.

Néanmoins, on a confronté ces résultats avec ceux obtenus avec la méthode des éléments finis et les résultats quantitatifs se rapprochent davantage (cf. Figure 5.6); le maximum de la pression du liquide est environ de  $1.08 \cdot 10^6 Pa$ , et le minimum de  $830\,000 Pa$ .

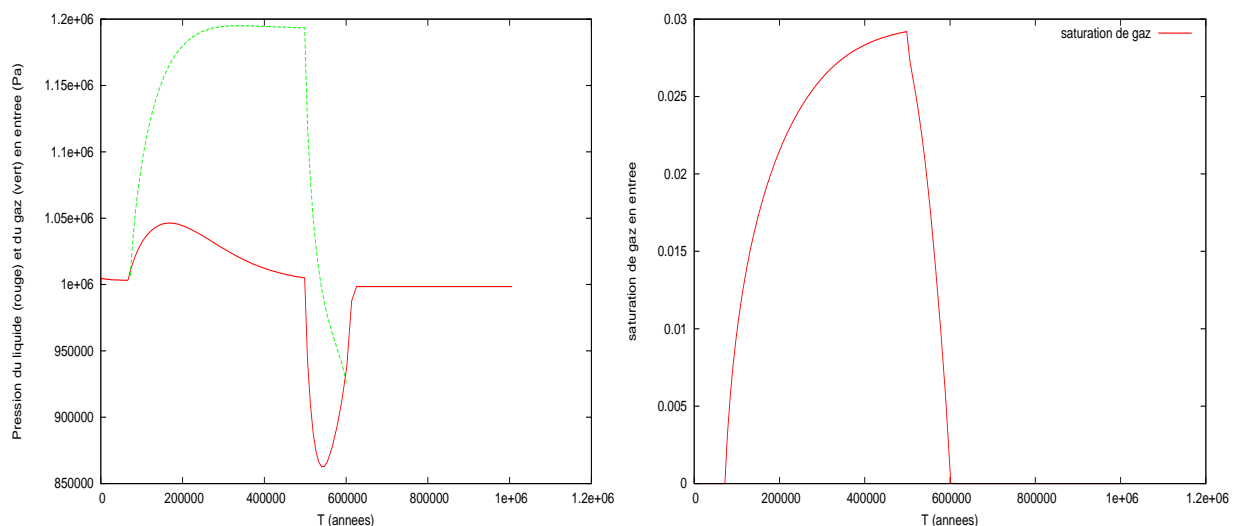


FIGURE 5.3 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-14}, 10^{-4})$

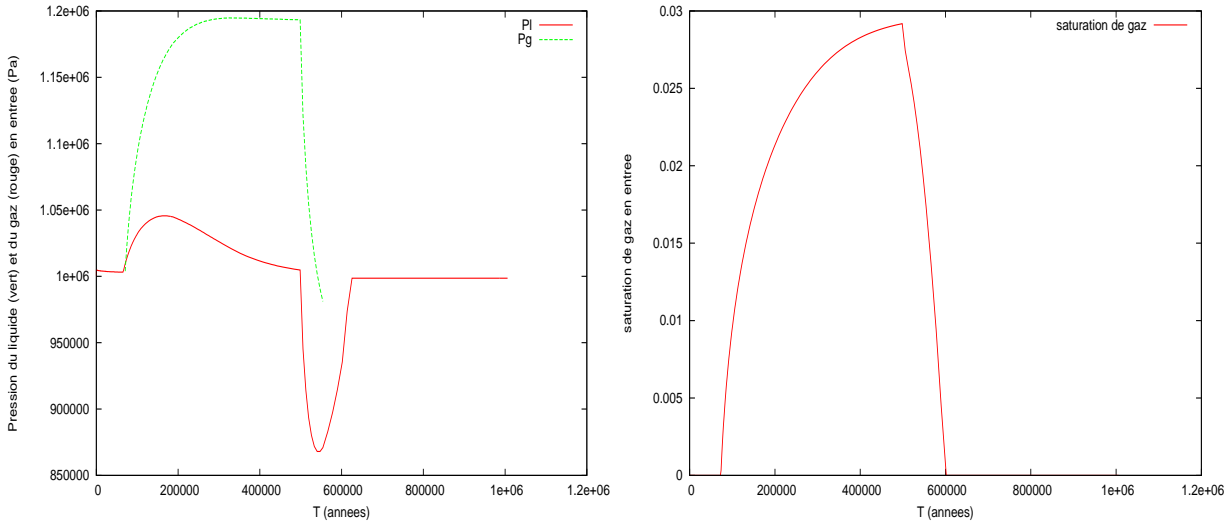


FIGURE 5.4 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-14}, 10^{-5})$

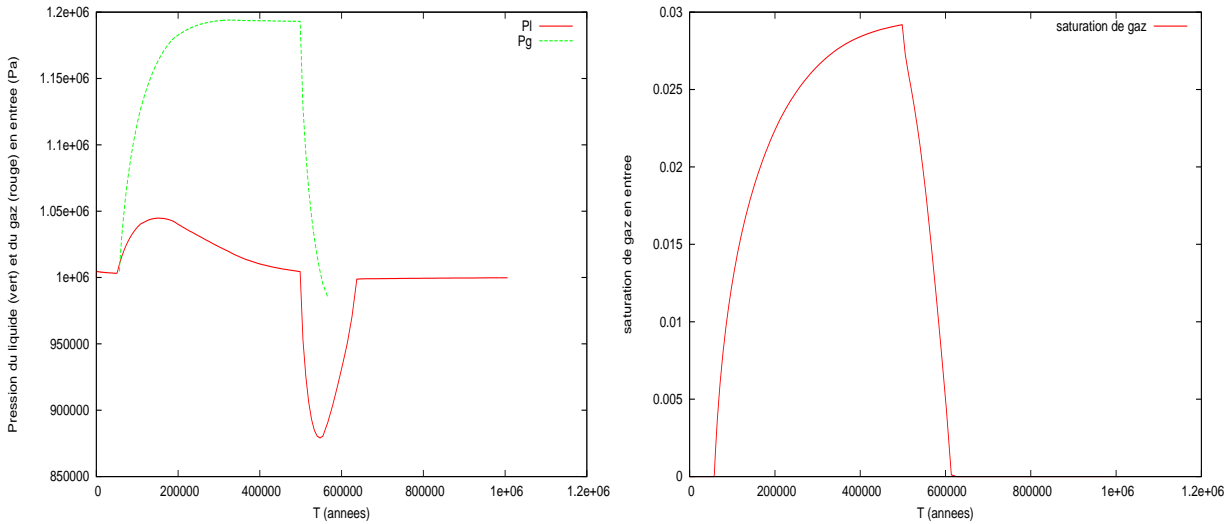


FIGURE 5.5 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-15}, 10^{-4})$

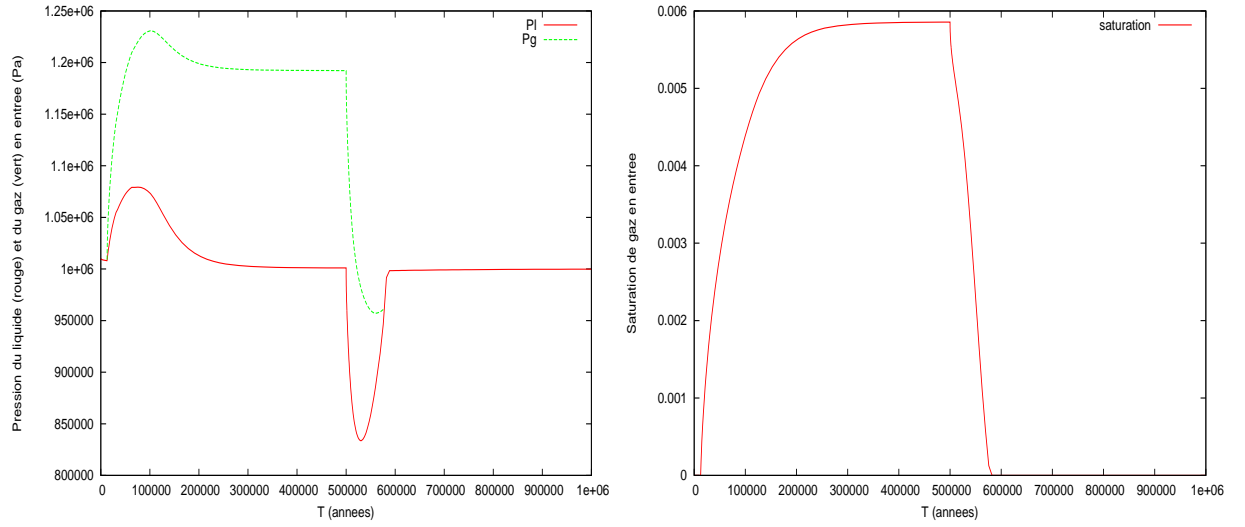


FIGURE 5.6 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour la méthode des éléments finis.

### 5.3 Cas test 2 : Injection de gaz dans un milieu non saturé

Plus d'informations disponibles sur : [http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test/sature\\_2.pdf](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test/sature_2.pdf)

Comme précédemment, le milieu poreux est isotrope homogène. La température est fixée à  $T = 303$  K.

Les conditions limites sont définies par :

- des conditions de flux nuls sur la frontière imperméable  $\Gamma_{imp}$ ,

$$\phi^w \cdot \nu = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \nu = 0;$$

- une injection d'hydrogène pur sur la frontière d'entrée  $\Gamma_{in}$ ,

$$\phi^w \cdot \nu = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \nu = Q^h;$$

- des conditions de Dirichlet sur la frontière de sortie  $\Gamma_{out}$ ,

$$P_l = P_{l,out} \quad \text{et} \quad P_g = P_{g,out}.$$

Les conditions initiales considérées correspondent à l'état stationnaire du système sans injection d'hydrogène, il s'agit donc de conditions uniformes vérifiant sur tout le domaine,

$$P_l = P_{l,out} \quad \text{et} \quad P_g = P_{g,out}.$$

Les données physiques sont :

Milieu poreux		Caractéristiques des fluides	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
$k$	$5 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$	$D_l^h$	$3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
$\Phi$	0.15 (–)	$\mu_l$	$1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$
$P_r$	$2 \cdot 10^6 \text{ Pa}$	$\mu_g$	$9 \cdot 10^{-6} \text{ Pa.s}$
$n$	1.49 (–)	$H(T = 303K)$	$7.65 \cdot 10^{-6} \text{ mol/Pa/m}^3$
$S_{lr}$	0.4 (–)	$M_l$	$10^{-2} \text{ kg/mol}$
$S_{gr}$	0 (–)	$M_g$	$2 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$
		$\rho_l^{std}$	$10^3 \text{ kg/m}^3$
		$\rho_g^{std}$	$8 \cdot 10^{-2} \text{ kg/m}^3$

TABLE 5.3 – Valeurs des paramètres du milieu poreux et caractéristiques des fluides.

Les paramètres du cas test ainsi que le temps de simulation,  $T_{simul}$ , sont donnés dans le **Tableau 5.4**.

Paramètre	Valeur
$Q^h$	$55.7 \cdot 10^{-6} \text{ mg/m}^2/\text{ans}$
$P_{l,out}$	$10^6 \text{ Pa}$
$P_{g,out}$	$1.1 \cdot 10^6 \text{ Pa}$
$T_{simul}$	$2 \cdot 10^5 \text{ ans}$

TABLE 5.4 – Paramètres du cas test.

Pour ce cas test, on a réalisé les simulations avec les paramètres de pénalisation suivants  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-14}, 10^{-5})$  et  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-15}, 10^{-4})$ , qui ont été déterminés empiriquement une nouvelle fois. Les deux phases sont initialement présentes dans tout le domaine.

Les résultats de la simulation présentés en **Figure 5.7** et **Figure 5.8** montrent que la saturation de gaz en entrée croît en deux temps avant d'atteindre un "plateau". Concernant la pression du liquide, les différentes courbes révèlent que celle-ci croît fortement en début de simulation et atteint son maximum (environ  $1.9 \times 10^6 \text{ Pa}$ ) aux alentours du temps  $t = 50\,000 \text{ ans}$ . La pression décroît ensuite et tend vers son état d'équilibre.

Un phénomène notable apparaît en certains endroits, la pression du liquide croît plus rapidement que celle du gaz et ceci jusqu'à la disparition de ce dernier. Un "bouchon" de liquide se constitue ainsi dans le domaine puis se propage en direction de la sortie. Les conditions imposées en sortie interdisent au bouchon d'atteindre la sortie et celui-ci va progressivement se résorber ; les deux zones insaturées se rejoignent et la phase gazeuse est désormais dans tout le domaine.

Les résultats pour ce cas test simulé par le Gdr MoMaS sont disponibles sur :

[http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test/resultats/sature\\_2.pdf](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test/resultats/sature_2.pdf).

Comme précédemment, qualitativement, les résultats coïncident mais quantitativement, on constate des différences. La **Figure 5.9** montre les résultats pour la méthode des éléments finis ; le maximum de la pression du liquide est atteint au temps  $t = 12\,600 \text{ ans}$  et vaut  $2.3 \cdot 10^6 \text{ Pa}$ .

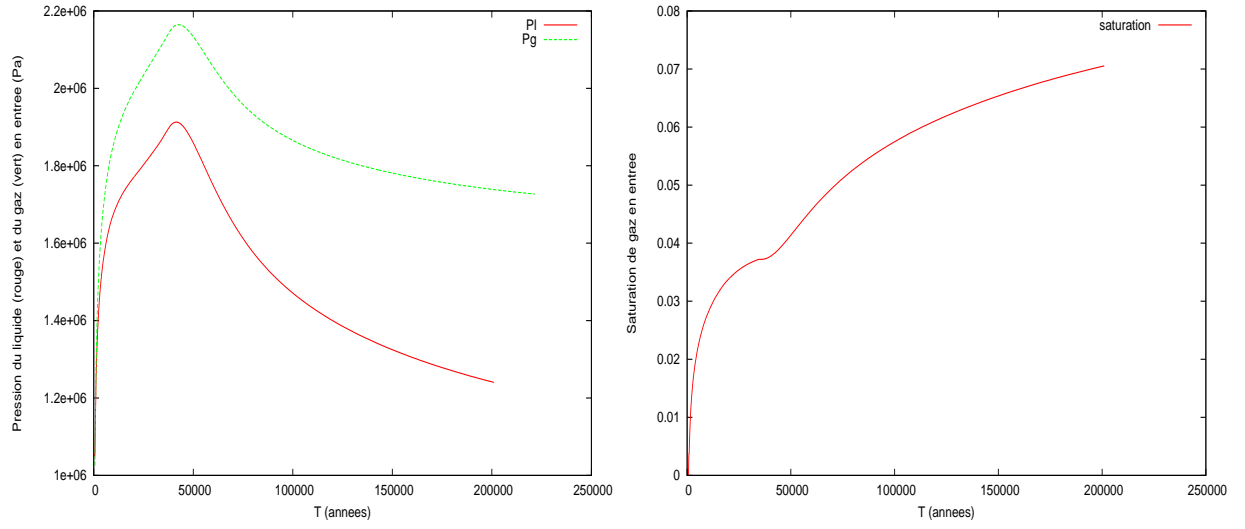


FIGURE 5.7 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-14}, 10^{-5})$

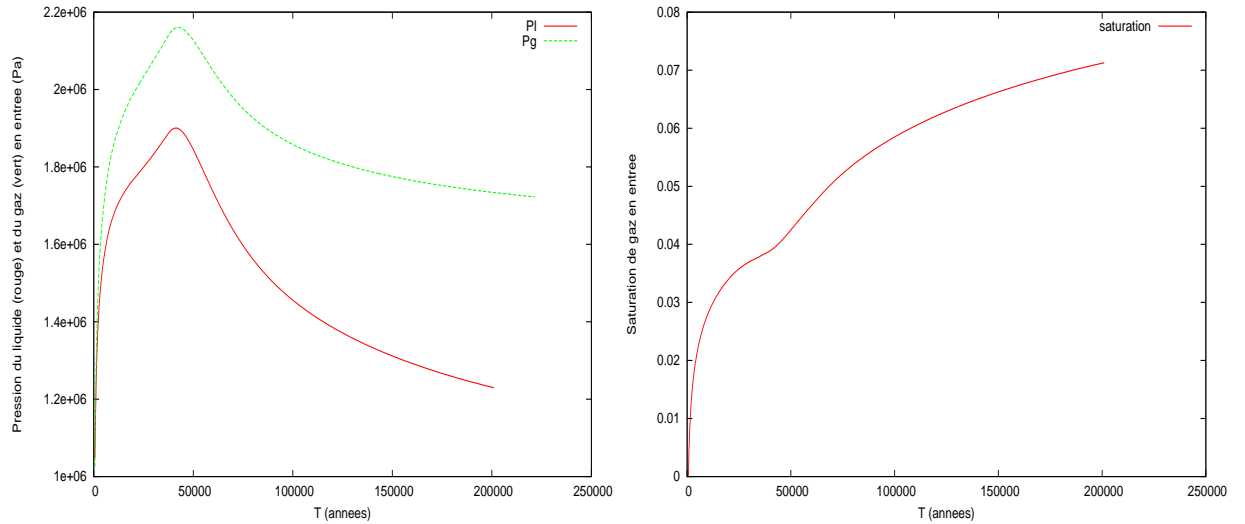


FIGURE 5.8 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-15}, 10^{-4})$



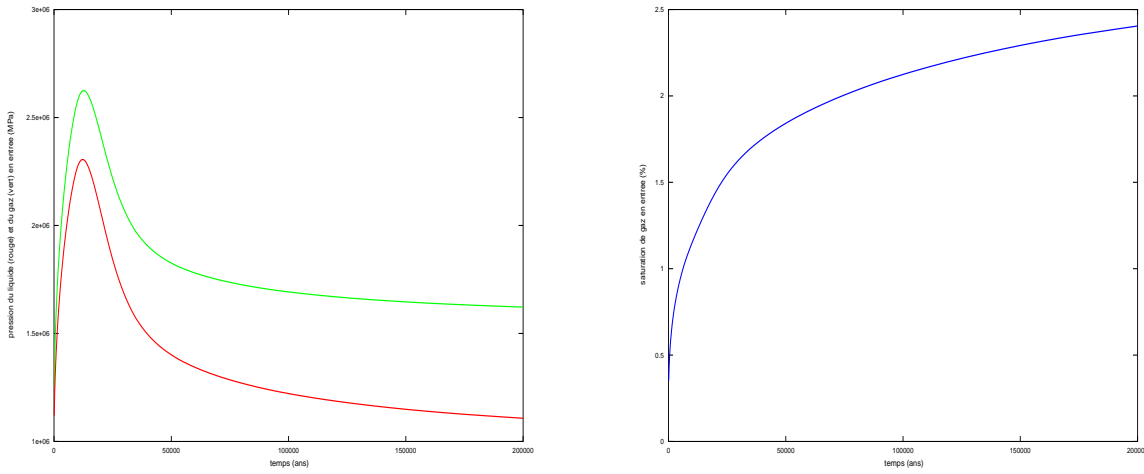


FIGURE 5.9 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour la méthode des éléments finis.

## 5.4 Cas test 3 : Injection de gaz dans un matériau non homogène saturé en liquide

Plus d'informations disponibles sur : [http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test/multi-mat.pdf](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test/multi-mat.pdf)

Dans ce cas test, le milieu poreux est isotrope et non homogène. La température est fixée à  $T = 303$  K.

Le domaine est rectangulaire de dimension  $L_x$  et  $L_y$ . Le domaine est scindé en deux sous-domaines  $\Omega_b$  et  $\Omega_c$ , respectivement de longueur  $L_b$  et  $(L_x - L_b)$  (cf. Figure 5.10).

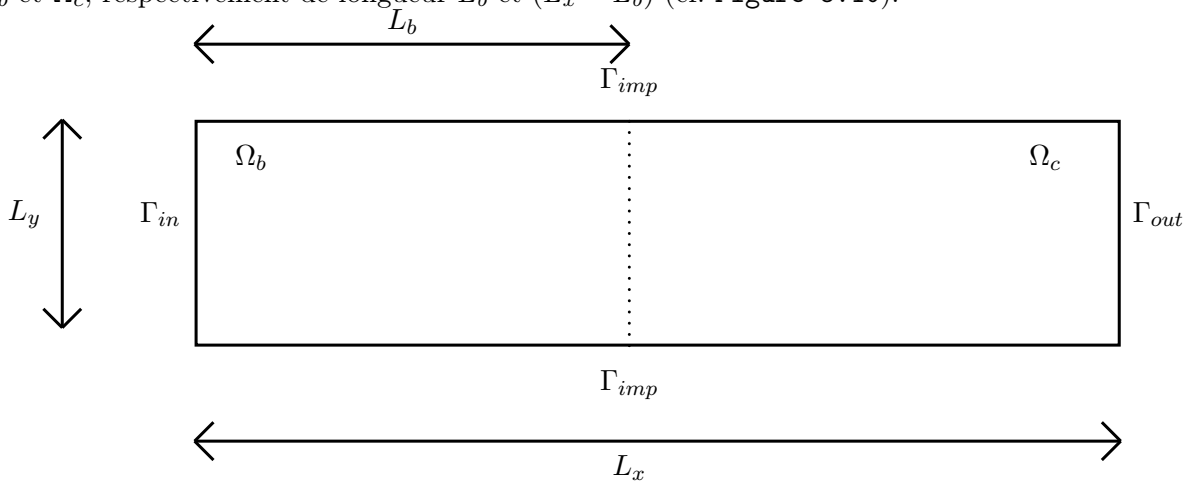


FIGURE 5.10 – Domaine  $\Omega$ .

Les conditions limites sont définies par :

- des conditions de flux nuls sur la frontière imperméable  $\Gamma_{imp}$ ,

$$\phi^w \cdot \nu = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \nu = 0;$$

- une injection d'hydrogène pur sur la frontière d'entrée  $\Gamma_{in}$ ,

$$\phi^w \cdot \nu = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \nu = \begin{cases} Q^h & \text{si } 0 \leq t \leq T_{inj} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases};$$

- des conditions de Dirichlet (eau liquide pure de pression,  $P_l$ , fixée) sur la frontière de sortie  $\Gamma_{out}$ ,

$$P_l = P_{l,out} \quad \text{et} \quad X^h = 0.$$

Les conditions initiales considérées correspondent à l'état stationnaire du système sans injection d'hydrogène, il s'agit donc de conditions uniformes vérifiant sur tout le domaine,

$$P_l = P_{l,out} \quad \text{et} \quad X^h = 0.$$

Les données physiques sont :

Milieu poreux					Caractéristiques des fluides		
Paramètre	Valeur				Paramètre	Valeur	
	$\Omega_b$		$\Omega_c$				
$k$	$10^{-18}$	$m^2$	$5 \cdot 10^{-20}$	$m^2$	$D_l^h$	$3 \cdot 10^{-9}$	$m^2/s$
$\Phi$	0.3	(-)	0.15	(-)	$\mu_l$	$1 \cdot 10^{-3}$	$Pa.s$
$P_r$	$2 \cdot 10^6$	$Pa$	$15 \cdot 10^6$	$Pa$	$\mu_g$	$9 \cdot 10^{-6}$	$Pa.s$
$n$	1.54	(-)	1.49	(-)	$H(T = 303K)$	$7.65 \cdot 10^{-6}$	$mol/Pa/m^3$
$S_{lr}$	0.01	(-)	0.4	(-)	$M_l$	$10^{-2}$	$kg/mol$
$S_{gr}$	0	(-)	0	(-)	$M_g$	$2 \cdot 10^{-3}$	$kg/mol$
					$\rho_l^{std}$	$10^3$	$kg/m^3$
					$\rho_g^{std}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$kg/m^3$

TABLE 5.5 – Valeurs des paramètres du milieu poreux et caractéristiques des fluides.

Les paramètres du cas test ainsi que le temps de simulation,  $T_{simul}$ , sont donnés dans le Tableau 5.6.

Paramètre	Valeur
$Q^h$	$55.7 \cdot 10^{-6}$ $mg/m^2/ans$
$P_{l,out}$	$10^6$ $Pa$
$T_{simul}$	$10^6$ $ans$

TABLE 5.6 – Paramètres du cas test.

Ce cas test a été réalisé avec les mêmes paramètres de pénalisation que pour le premier cas test à savoir  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l})$  valant  $(10^{-14}, 10^{-4})$ ,  $(10^{-14}, 10^{-5})$  et  $(10^{-15}, 10^{-4})$ .

Les résultats de simulation du Gdr MoMaS sont présentés à l'adresse suivante :

[http://momas.univ-lyon1.fr/cas\\_test/resultats/multi-mat\\_2.pdf](http://momas.univ-lyon1.fr/cas_test/resultats/multi-mat_2.pdf).

Les résultats de notre simulation montre que le comportement de la pression du liquide en entrée s'apparente au cas test 2 bien que le pic ne soit pas aussi apparent. Les courbes d'évolution que l'on obtient ne se confondent pas aux résultats du Gdr MoMaS mais l'évolution générale que l'on constate est encourageant pour la suite compte tenu de l'allure des courbes.

A la différence des cas précédents, on constate que les valeurs maximales obtenues pour les pressions du liquide et du gaz en entrée (cf. Figures 5.11, 5.12, 5.13), sont plus élevées que les valeurs de référence (cf. Figure 5.14).

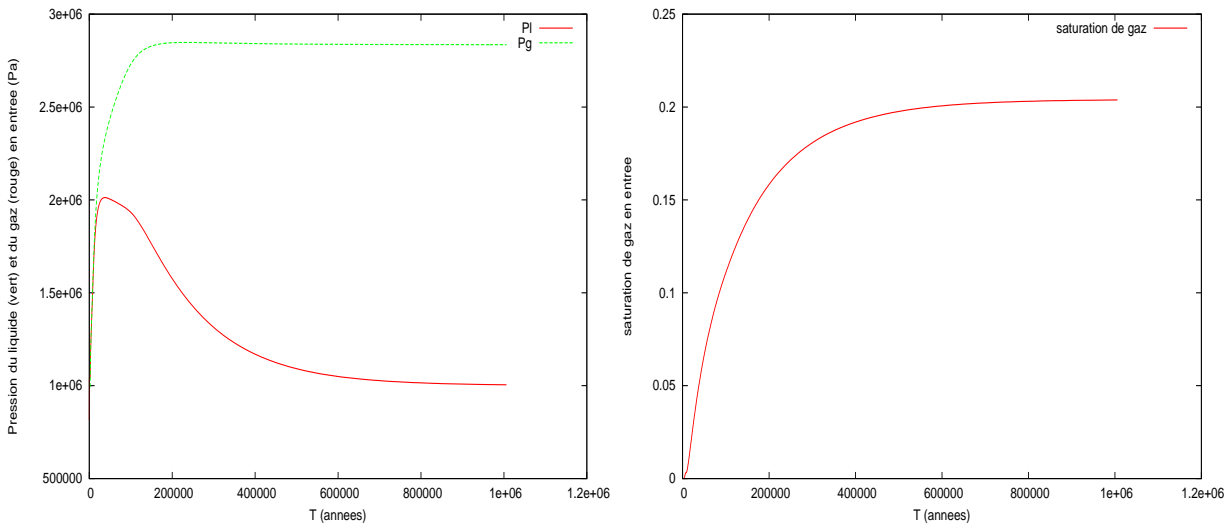


FIGURE 5.11 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-14}, 10^{-4})$

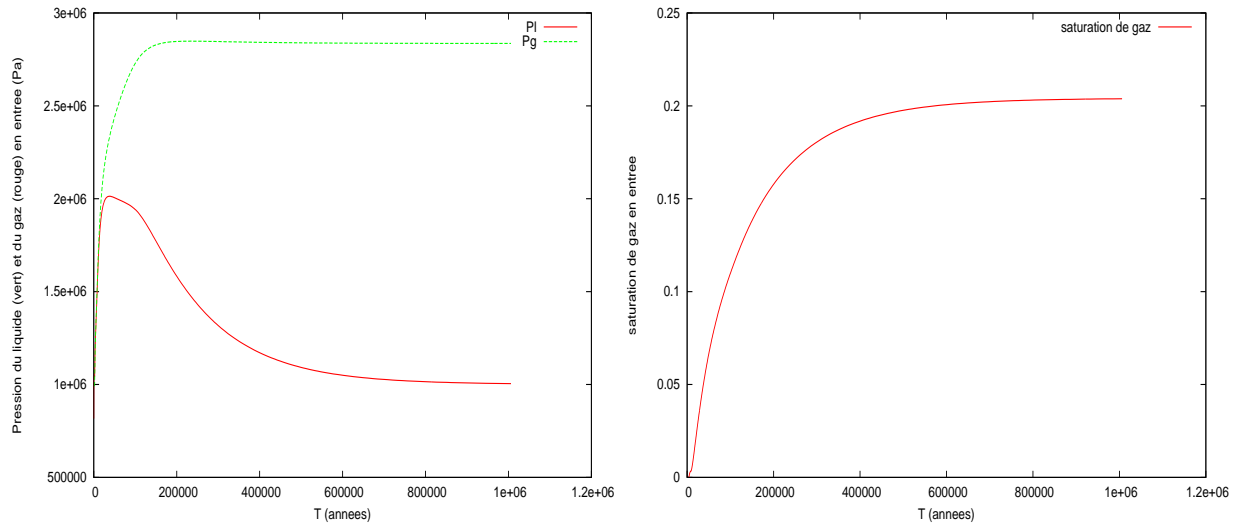


FIGURE 5.12 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-14}, 10^{-5})$

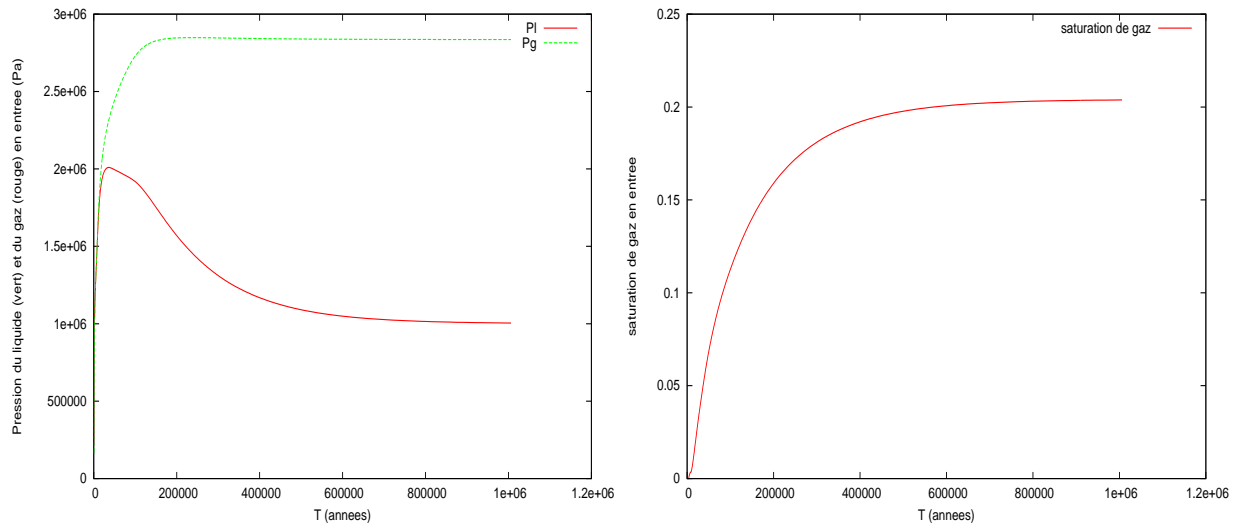


FIGURE 5.13 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour des paramètres de pénalisation  $(\eta_{P_l}, \eta_{x_l}) = (10^{-15}, 10^{-4})$

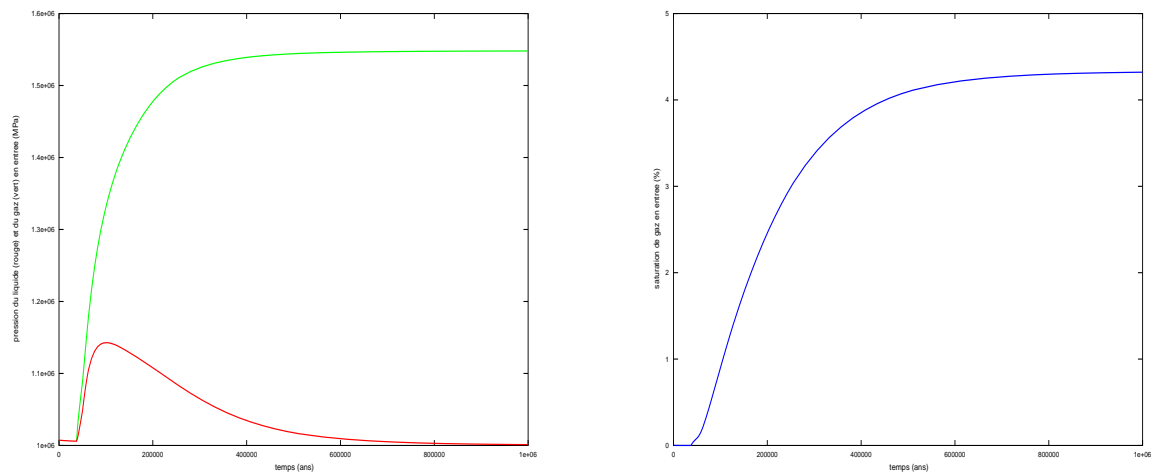


FIGURE 5.14 – Evolution de la pression du liquide et du gaz (gauche), et de la saturation (droite) en entrée du domaine au cours du temps pour la méthode des éléments finis.



# Conclusion

A l'issue de ce stage effectué à l'IRSN, j'ai pu mettre en application mes connaissances en analyse, analyse numérique mais aussi informatique au vu de répondre aux problèmes successifs rencontrés tout au long du stage. Un des aspects les plus instructifs a été de me confronter à une nouvelle méthode numérique qu'est la méthode de Galerkin Discontinue. Le travail qui a été précédemment effectué et notamment, le travail bibliographique, a permis une adaptation accélérée dans le contexte d'étude. En outre, j'ai pu me familiariser avec la bibliothèque C++, Libmesh, et, plus généralement, mener un projet en C++ à bien.

Dans un premier temps, la modélisation qui avait été proposée présentait quelques zones floues qui nécessitaient de retravailler le schéma et ainsi apporter une correction aux erreurs.

Initialement, le code qui a été développé durant un précédent stage réalisé en 2011, devait servir de base afin d'être étendu au cas non stationnaire. Le code nouvellement développé a permis d'obtenir des résultats satisfaisant d'un point de vue qualitatif – et quantitatif pour certains cas. De plus, l'hypothèse initiale qui consistait à définir une constante de pénalisation propre à chaque composant à tous les pas de temps a pu être écartée au vu des simulations faites. Néanmoins, le fait qu'il faille encore – pour le moment – déterminer les constantes de pénalisation de façon empirique peut revêtir l'allure d'un frein aux applications futures du code.

Dans un deuxième temps, l'ajout du décentrement de flux au schéma offre des résultats prometteurs qui coïncident avec ceux obtenus par le flux centré. Son influence quant à la stabilité du schéma reste encore à être étudiée davantage et représente un des axes sur lesquels il pourrait être intéressant de s'y attarder.

Enfin, pour conclure, il est possible d'émettre un bémol au code développé et qui pourra, à l'avenir être corrigé. Il faut noter que le code est relativement "lent" malgré son développement privilégiant sa vitesse d'exécution par la suppression de boucles et de variables superflues. Il sera possible d'y remédier par la parallélisation entre autres si l'occasion se présente (et que le cluster sous lequel le code est développé le permet).





## Chapitre 6

# Annexes

### 6.1 Annexe A : Calcul pour l'obtention du modèle

Flux massique de diffusion du composant 0 dans la phase liquide

$$j_l^0 = -\Phi M^0 S_l c_l D_l^0 \nabla x_l^0$$

Sachant que

$$\begin{aligned} c_l &= \sum_{k=0}^N c_l^k \\ &= c_l^0 + \sum_{k=1}^N c_l^k \\ \text{d'où } c_l^0 &= c_l - \sum_{k=1}^N c_l^k \end{aligned}$$

et

$$x_l^0 = \frac{c_l^0}{c_l}$$

il en découle que

$$\begin{aligned} x_l^0 &= \frac{c_l^0}{c_l} \\ &= 1 - \sum_{k=1}^N \frac{c_l^k}{c_l} \\ &= 1 - \sum_{k=1}^N x_l^k \\ \text{et } \nabla x_l^0 &= - \sum_{k=1}^N \nabla x_l^k \end{aligned}$$

Finalement,

$$\begin{aligned}
j_l^0 &= \Phi M^0 S_l c_l D_l^0 \sum_{k=1}^N \nabla x_l^k \\
&= \Phi M^0 S_l c_l D_l^0 \sum_{k=1}^N \nabla u_k
\end{aligned}$$

**Flux massique de diffusion du composant  $i$  dans la phase gazeuse**

$$j_g^i = -\Phi M^i S_g c_g D_g^i \nabla x_g^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}$$

L'équilibre thermodynamique permet d'écrire la relation suivante :

$$x_g^i P_g = K^i x_l^i, \quad i \in \{0, \dots, N\}$$

avec  $x_g^i$ ,  $P_g$  et  $K^i$  dépendant de  $(T, P_l, (x_l^i)_{i=1, \dots, N})$ .

Sous l'hypothèse d'isothermie,  $T$  est constante ce qui permet d'écrire :

$$\begin{aligned}
\nabla x_g^i &= \frac{\partial x_g^i}{\partial P_l} \nabla P_l + \sum_{k=1}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial x_l^k} \nabla x_l^k \\
&= \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k
\end{aligned}$$

ce qui, au final, permet d'obtenir l'égalité suivante :

$$j_g^i = -\Phi M^i S_g c_g D_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k$$

**Flux de convection dans le liquide pour un composant  $i \in \{1, \dots, N\}$**

$$\begin{aligned}
\rho_l^i q_l &= -\rho_l^i \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla P_l - \rho_l g) \\
&\stackrel{P_l = u_0}{=} -\rho_l^i \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g)
\end{aligned}$$

$$\text{Or } \rho_l^i = M^i c_l^i, \text{ et } u_i = x_l^i = \frac{c_l^i}{c_l}$$

$$\text{d'où } c_l^i = u_i c_l$$

$$\text{alors } \rho_l^i = u_i M^i c_l.$$

Finalement,

$$\rho_l^i q_l = -u_i M^i c_l \frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g)$$

**Flux de convection dans le gaz pour un composant  $i \in \{0, \dots, N\}$**

$$\rho_g^i q_g = -\rho_g^i \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right)$$

Or  $\rho_g^i = M^i c_g^i$ , et  $P_g^i = x_g^i P_g$  d'où  $x_g^i = \frac{P_g^i}{P_g}$

De plus,  $x_g^i = \frac{c_g^i}{c_g} \iff c_g^i = x_g^i c_g = P_g^i \frac{c_g}{P_g}$

ce qui implique que  $\rho_g^i = M^i P_g^i \frac{C_g}{P_g}$

En outre,  $x_g^i P_g = K^i x_l^i \iff x_g^i = \frac{K^i x_l^i}{P_g} = \frac{K^i u_i}{P_g}$

or  $x_g^i = \frac{P_g^i}{P_g} = \frac{K^i u_i}{P_g}$

d'où  $P_g^i = K^i u_i$

Par conséquent,  $\rho_g^i = M^i K^i u_i \frac{C_g}{P_g}$

Finalement,

$$\rho_g^i q_g = -M^i K^i u_i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right)$$

### Obtention de la forme canonique - Termes "elliptiques" et "hyperboliques"

En tenant compte des flux obtenus en (2.14), (2.15), (2.16) et (2.17), le flux massique du composant  $i$  (2.6) s'écrit :

$$\begin{aligned} \phi^i &= \rho_l^i q_l + \rho_g^i q_g + j_l^i + j_g^i, \quad i \in \{0, \dots, N\} \\ &= -\frac{k_{r,l}}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) \left[ \delta_{i0} \rho_l^0 + \sum_{j=1}^N \delta_{ij} u_i M^i c_l \right] \\ &\quad - \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) \left[ \delta_{i0} \rho_g^0 + \sum_{j=1}^N \delta_{ij} u_i M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \right] \\ &\quad + \Phi S_l c_l M^i D_l^i \left( \delta_{i0} \sum_{k=1}^N \nabla u_k - \sum_{j=1}^N \delta_{ij} \nabla u_i \right) \\ &\quad - \Phi S_g c_g M^i D_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k, \quad i \in \{0, \dots, N\} \end{aligned}$$

En simplifiant l'écriture en introduisant une nouvelle notation :

$$J_\alpha^i = \Phi M^i S_\alpha c_\alpha D_\alpha^i, \quad \forall i \in \{0, \dots, N\}, \quad \alpha \in \{l, g\}$$

il vient,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\begin{aligned}
\phi^i &= -\frac{k_{r,l}}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) \left[ \delta_{i0} \rho_l^0 + \sum_{j=1}^N \delta_{ij} u_i M^i c_l \right] \\
&\quad - \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) \left[ \delta_{i0} \rho_g^0 + \sum_{j=1}^N \delta_{ij} u_i M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \right] \\
&\quad + J_l^i \left( \delta_{i0} \sum_{k=1}^N \nabla u_k - \sum_{j=1}^N \delta_{ij} \nabla u_i \right) \\
&\quad - J_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k \\
&= \delta_{i0} \left[ -\rho_l^0 \frac{k_{r,l}}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) - \rho_g^0 \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) + J_l^0 \sum_{k=1}^N \nabla u_k \right] \\
&\quad + \sum_{j=1}^N \delta_{ij} \left[ -u_i M^i c_l \frac{k_{r,l}}{\mu_l} \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) - u_i M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}}{\mu_g} \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) - J_l^i \nabla u_i \right] \\
&\quad - J_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k
\end{aligned}$$

**Remarque**  $\delta_{ij}$  correspond au *symbole de Kronecker*.

$$\begin{aligned}
\forall i \in \{0, \dots, N\}, \quad \sum_{j=0}^N \delta_{ij} = 1 &\iff \delta_{i0} + \sum_{j=1}^N \delta_{ij} = 1 \\
&\iff \sum_{j=1}^N \delta_{ij} = 1 - \delta_{i0}
\end{aligned}$$

En notant :

$$\begin{aligned}
Q_l^i &= \begin{cases} \rho_l^0 \frac{k_{r,l}}{\mu_l} & \text{si } i = 0 \\ M^i c_l \frac{k_{r,l}}{\mu_l} & \text{si } i \in \{1, \dots, N\} \end{cases} \\
Q_g^i &= \begin{cases} \rho_g^0 \frac{k_{r,g}}{\mu_g} & \text{si } i = 0 \\ M^i K^i \frac{c_g}{P_g} \frac{k_{r,g}}{\mu_g} & \text{si } i \in \{1, \dots, N\} \end{cases}
\end{aligned}$$

il est possible de simplifier une nouvelle fois, l'écriture du flux massique du composant  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\begin{aligned}
\phi^i &= \delta_{i0} \left[ -Q_l^0 \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) - Q_g^0 \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) + J_l^0 \sum_{k=1}^N \nabla u_k \right] \\
&\quad + (1 - \delta_{i0}) \left[ -u_i Q_l^i \mathbb{K} (\nabla u_0 - \rho_l g) - u_i Q_g^i \mathbb{K} \left( \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \nabla u_k - \rho_g g \right) - J_l^i \nabla u_i \right] \\
&\quad + J_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k
\end{aligned}$$

D'où l'expression :

$$\forall i \in \{0, \dots, N\}, \quad \phi^i = \phi_e^i + \phi_h^i \quad \text{où} \begin{cases} \phi_e^i & \text{permet de définir le tenseur elliptique.} \\ \phi_h^i & \text{permet de définir le tenseur hyperbolique.} \end{cases}$$

$\phi_e^i$  et  $\phi_h^i$  sont définis comme suit :

$$\begin{aligned}
\phi_e^i &= -\delta_{i0} Q_l^0 \mathbb{K} \nabla u_0 + \delta_{i0} Q_l^0 \rho_l \mathbb{K} g \\
&\quad - \delta_{i0} Q_g^0 \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} \nabla u_k + \delta_{i0} Q_g^0 \rho_g \mathbb{K} g \\
&\quad + \delta_{i0} J_l^0 \sum_{k=1}^N \nabla u_k - (1 - \delta_{i0}) J_l^i \nabla u_i \\
&\quad - J_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k \quad i \in \{0, \dots, N\} \quad \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k] \cdot \\
\phi_h^i &= -(1 - \delta_{i0}) Q_l^i \mathbb{K} \nabla u_0 \cdot u_i + (1 - \delta_{i0}) Q_l^i \rho_l \mathbb{K} g \cdot u_i \\
&\quad - (1 - \delta_{i0}) Q_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} \nabla u_k \cdot u_i + (1 - \delta_{i0}) Q_g^i \rho_g \mathbb{K} g \cdot u_i \quad i \in \{0, \dots, N\} \\
&\quad n_F
\end{aligned}$$

### Tenseur elliptique

Partant de  $\phi_e^i$ , il est possible de définir le tenseur elliptique du problème,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\begin{aligned}
\phi_e^i &= -\delta_{i0} Q_l^0 \mathbb{K} \nabla u_0 + \delta_{i0} \sum_{k=0}^N \left( (1 - \delta_{k0}) J_l^0 \mathbb{I}_d - Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} \right) \nabla u_k \\
&\quad - J_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k - (1 - \delta_{i0}) J_l^i \nabla u_i \\
&\quad + \delta_{i0} (Q_l^0 \rho_l + Q_g^0 \rho_g) \mathbb{K} g \\
&= \delta_{i0} \left[ \sum_{k=0}^N \left( (1 - \delta_{k0}) J_l^0 \mathbb{I}_d - Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} - \delta_{k0} Q_l^0 \mathbb{K} \right) \nabla u_k + (Q_l^0 \rho_l + Q_g^0 \rho_g) \mathbb{K} g \right] \\
&\quad - J_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \nabla u_k - (1 - \delta_{i0}) J_l^i \nabla u_i \\
&= \sum_{k=0}^N \left[ \delta_{i0} \left( (1 - \delta_{k0}) J_l^0 \mathbb{I}_d - Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} - \delta_{k0} Q_l^0 \mathbb{K} \right) - (1 - \delta_{i0}) \delta_{ki} J_l^i \mathbb{I}_d - J_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \mathbb{I}_d \right] \nabla u_k \\
&\quad + \delta_{i0} (Q_l^0 \rho_l + Q_g^0 \rho_g) \mathbb{K} g
\end{aligned}$$

Donc  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$ ,  $\phi_e^i = \sum_{k=0}^N A_{i,k} \nabla u_k + A_{i,g} g$

avec  $\begin{cases} A_{i,k} &= \delta_{i0} \left( (1 - \delta_{k0}) J_l^0 \mathbb{I}_d - Q_g^0 \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} - \delta_{k0} Q_l^0 \mathbb{K} \right) - (1 - \delta_{i0}) \delta_{ki} J_l^i \mathbb{I}_d - J_g^i \frac{\partial x_g^i}{\partial u_k} \mathbb{I}_d \\ A_{i,g} &= \delta_{i0} (Q_l^0 \rho_l + Q_g^0 \rho_g) \mathbb{K} \end{cases}$

### Terme hyperbolique

Par la même démarche que précédemment, il est possible d'obtenir le tenseur hyperbolique,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\begin{aligned} \phi_h^i &= (1 - \delta_{i0}) \left[ -Q_l^i \mathbb{K} \nabla u_0 \cdot u_i + Q_l^i \rho_l \mathbb{K} g \cdot u_i - Q_g^i \sum_{k=0}^N \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \mathbb{K} \nabla u_k \cdot u_i + Q_g^i \rho_g \mathbb{K} g \cdot u_i \right] \\ &= (1 - \delta_{i0}) \left( \sum_{k=0}^N \left[ -\delta_{k0} Q_l^i - Q_g^i \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \right] \mathbb{K} \nabla u_k + [Q_l^i \rho_l + Q_g^i \rho_g] \mathbb{K} g \right) u_i \end{aligned}$$

Donc  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$ ,  $\phi_h^i = \left( \sum_{k=0}^N C_{i,k} \nabla u_k + C_{i,g} g \right) u_i$

avec  $\begin{cases} C_{i,k} &= -(1 - \delta_{i0}) \left[ \delta_{k0} Q_l^i + Q_g^i \frac{\partial P_g}{\partial u_k} \right] \mathbb{K} \\ C_{i,g} &= (1 - \delta_{i0}) (Q_l^i \rho_l + Q_g^i \rho_g) \mathbb{K} \end{cases}$

## 6.2 Annexe B : Calculs pour la résolution de la non-linéarité

Calcul de  $DF^i(u)$ ,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$

$$\begin{aligned}
 F^i(u + hv) &= \frac{X^i(u + hv) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} + \mathcal{A}^i(u + hv)(u + hv) - \mathcal{F}^i(t^n, \cdot) \\
 &= \frac{X^i(u) + hDX^i(u)v - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} + (\mathcal{A}^i(u) + hD\mathcal{A}^i(u)v)(u + hv) - \mathcal{F}^i(t^n, \cdot) \\
 &= \underbrace{\frac{X^i(u) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} + \mathcal{A}^i(u)u - \mathcal{F}^i(t^n, \cdot)}_{F^i(u)} \\
 &\quad + h \left( \frac{DX^i(u)v}{\Delta t^n} + \mathcal{A}^i(u)v + D\mathcal{A}^i(u)v \cdot u \right) \\
 &\quad + h^2 D\mathcal{A}^i(u)v \cdot v
 \end{aligned}$$

D'où

$$DF^i(u) = \frac{DX^i(u)v}{\Delta t^n} + \mathcal{A}^i(u)v + D\mathcal{A}^i(u)v \cdot u$$

On note  $J_{X^i}(u)$  la jacobienne de  $X^i \iff J_{X^i}(u) = DX^i(u)$ .

On définit  $\mathcal{J}^i(u)$  :

$$\mathcal{J}^i(u)v \equiv \left( \frac{1}{\Delta t^n} J_{X^i}(u) + \mathcal{A}^i(u) \right) v$$

Calcul de  $DG^i(u)$ ,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$

$$\begin{aligned}
 G^i(u + hv) &= \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u + hv) \nabla(u_k + hv_k) + A_{i,g}(u + hv)g \\
 &\quad + (u_i + hv_i) \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u + hv) + C_{i,g}(u + hv)g \right) - \phi^{i,N}(t^n, \cdot) \\
 &= \sum_{k=0}^N (A_{i,k}(u) + hDA_{i,k}(u)v) (\nabla u_k + h\nabla v_k) + (A_{i,g}(u) + hDA_{i,g}(u)v)g \\
 &\quad + (u_i + hv_i) \left( \sum_{k=0}^N (C'_{i,k}(u) + hDC'_{i,k}(u)v) + (C_{i,g}(u) + hDC_{i,g}(u)v)g \right) - \phi^{i,N}(t^n, \cdot) \\
 &= \underbrace{\sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla u_k + A_{i,g}(u)g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u)g \right)}_{G^i(u)} - \phi^{i,N}(t^n, \cdot) \\
 &\quad + h \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla v_k + v_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u)g \right) \right) \\
 &\quad + \sum_{k=0}^N DA_{i,k}(u)v \cdot \nabla u_k + DA_{i,g}(u)v \cdot g + u_i \left( \sum_{k=0}^N DC'_{i,k}(u)v + DC_{i,g}(u)v \cdot g \right) \\
 &\quad + h^2 v_i \left( \sum_{k=0}^N DC'_{i,k}(u)v + DC_{i,g}(u)v \cdot g \right)
 \end{aligned}$$

Les termes  $(DA^i(u) v \cdot u)$ ,  $\left(\sum_{k=0}^N DA_{i,k}(u) v \cdot \nabla u_k + DA_{i,g}(u) v \cdot g\right)$  et  $\left(\sum_{k=0}^N DC'_{i,k}(u) v + DC_{i,g}(u)\right)$  peuvent donner lieu à des équations aux dérivées partielles en  $v$  peu conventionnelles. Pour simplifier les problèmes linéaires intermédiaires à résoudre, on se propose donc "d'approcher"  $DF^i(u)$  par  $\mathcal{J}^i(u)$  d'une part, et  $DG^i(u)$  par  $\sum_{k=0}^N A_{i,k}(u) \nabla v_k + v_i \left(\sum_{k=0}^N C'_{i,k}(u) + C_{i,g}(u) g\right)$  d'autre part.



### 6.3 Annexe C : Calculs pour l'obtention de la formulation variationnelle

On reprend l'équation décrite en (3.3) qui s'écrit,  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v + \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) v \\ \quad = \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v, \quad \forall v \in V_h \\ u_i = u_i^D, \text{ sur } \Gamma_i^D \\ \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C_{i,k}(w) \nabla u_k + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot \nu = \phi^{i,N}(t^n, \cdot), \text{ sur } \Gamma_i^N \end{array} \right. \quad (6.1)$$

avec  $i \in \{0, \dots, N\}$ .

#### 6.3.1 Développement de $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v$

En étudiant le terme  $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v$  avec  $i \in \{0, \dots, N\}$ , il vient :

$$\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v$$

Par la formule de Green,

$$\begin{aligned} &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v - \sum_{T \in T_h} \sum_{F \in \partial T} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\ &\quad + \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v - \sum_{T \in T_h} \sum_{F \in \partial T} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v \\ &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v - \sum_{F \in F_h} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\ &\quad + \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v - \sum_{F \in F_h} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v + \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N (A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g) \cdot n_F \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v - \sum_{F \in F_h^D} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left( \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_{T_1} \cdot v \right] \Big|_{T_1} + \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_{T_2} \cdot v \right] \Big|_{T_2} \right) \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left( [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_{T_1} \cdot v] \Big|_{T_1} + [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_{T_2} \cdot v] \Big|_{T_2} \right)
\end{aligned}$$

Or  $n_F = n_{T_1} = -n_{T_2}$ , d'où

$$\begin{aligned}
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v + \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N (A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g) \cdot n_F \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v - \sum_{F \in F_h^D} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v] - \sum_{F \in F_h^i} \int_F [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v]
\end{aligned}$$

### 6.3.2 Développement de $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) v$

On a pour  $i \in \{0, \dots, N\}$

$$\begin{aligned}
&\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) v \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{T \in T_h} \sum_{F \in \partial T} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} \cdot [v] \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\
&\quad - \sum_{F \in F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v
\end{aligned}$$

où  $\{\cdot\}$  désigne le flux numérique.

On va considérer 2 flux numériques, centré et décentré (*upwind*), que l'on définit par :

#### Flux centré

$$\left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} = \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\}, \quad i \in \{0, \dots, N\}$$

#### Flux upwind

$$\left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} = \begin{cases} \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \Big|_{T_1} \cdot n_F, \\ \quad \text{si } \left\{ \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right\} \cdot n_F > 0 \\ \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \Big|_{T_2} \cdot n_F, \\ \quad \text{si } \left\{ \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right\} \cdot n_F \geq 0 \end{cases}, \quad i \in \{0, \dots, N\}$$

### 6.3.3 Etude des intégrales sur les faces intérieures

En réunissant les deux précédents termes développés de  $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) g \right) v$  et  $\sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) v$ ,  $i \in \{0, \dots, N\}$ , on va s'intéresser aux termes d'intégrales sur les faces intérieures.

On va donc chercher à réduire les termes :

$$\begin{aligned} & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v] - \sum_{F \in F_h^i} \int_F [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v] \\ & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} \cdot [v], \quad i \in \{0, \dots, N\} \end{aligned}$$

Par la suite, on ne va considérer que le *flux centré* ; le raisonnement reste identique pour le *flux décentré*. C'est pourquoi, il est possible de réécrire les termes précédents ainsi :

$$\begin{aligned} & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v] - \sum_{F \in F_h^i} \int_F [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v] \\ & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \cdot n_F \right\} \cdot [v], \quad i \in \{0, \dots, N\} \end{aligned}$$

On va maintenant développer chaque terme, pour  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\begin{aligned} \bullet \quad & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v] = - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k] \cdot n_F \cdot \{v\} \\ & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot [v] \\ \bullet \quad & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v] = - \sum_{F \in F_h^i} \int_F [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot v] \cdot n_F \\ \bullet \quad & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) \right) \cdot n_F \right\} \cdot [v] = - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\ \bullet \quad & - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \{u_i (C_{i,g}(w) g) \cdot n_F\} \cdot [v] = - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \{u_i (C_{i,g}(w) g)\} \cdot n_F \cdot [v] \end{aligned}$$

Parmi les égalités obtenues, certains termes sont simplifiables.

Ainsi, on montre que (cf. Problème modèle de [6]), pour  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \llbracket A_{i,k}(w) \nabla u_k \rrbracket \cdot n_F = 0 \\ \sum_{F \in F_h^i} \int_F \llbracket A_{i,g}(w) \cdot g \cdot v \rrbracket \cdot n_F = 0 \\ \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) \right) \right] \right] \cdot n_F + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \llbracket u_i(C_{i,g}(w)g) \rrbracket \cdot n_F \\ = \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w)g \right) \right] \right] \cdot n_F = 0 \end{array} \right.$$

En effet, la formulation variationnelle de l'équation (3.2) s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in H^1(\Omega) \text{ tel que} \\ a(w; u, v) = L(w; v) \quad , \forall v \in H^1(\Omega) \end{array} \right. \quad (6.2)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} a(w; u, v) = \int_{\Omega} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w)g \right) \right] \cdot \nabla v \\ L(w; v) = \int_{\Omega} F^i(t^n, \cdot) v \\ + \int_{\partial\Omega} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w)g \right) \right] \cdot n_T \cdot v \end{array} \right.$$

En partant de  $\int_{\Omega} F^i(t^n, \cdot) v$ , il vient que :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} F^i(t^n, \cdot) v &= \int_{\Omega} -\operatorname{div} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w)g \right) \right] \cdot v \\ &= \sum_{T \in T_h} \int_T -\operatorname{div} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\ &\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w)g \right) \right] \cdot v \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot \nabla v \\
&\quad + \sum_{T \in T_h} \int_{\partial T} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_T \cdot v \\
&= \sum_{T \in T_h} \int_T \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot \nabla v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^D \cup F_h^N} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F \cdot v \\
&= \int_{\Omega} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot \nabla v \\
&\quad + \int_{\partial \Omega} \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F \cdot v \\
&\quad + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
&\quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F \cdot v
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{\Omega} F^i(t^n, \cdot) v \\
 &\quad + \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g \right. \\
 &\quad \quad \left. + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F \cdot v
 \end{aligned}$$

Ceci permet d'aboutir au fait que, pour  $u$  solution de (6.2),

$$\sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g + u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F \cdot v = 0 \quad , \forall v \in H^1(T_h)$$

Et plus précisément à :

$$\begin{aligned}
 &\sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \right] \cdot n_F = 0 \\
 &\sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ \sum_{k=0}^N A_{i,g}(w) \cdot g \right] \cdot n_F = 0 \\
 &\sum_{F \in F_h^i} \int_F \left[ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right] \cdot n_F = 0
 \end{aligned}$$

Et donc,

$$\begin{aligned}
 &\sum_{F \in F_h^i} \int_F [\nabla u_k] \cdot n_F = 0 \\
 &\sum_{F \in F_h^i} \int_F [u_i] = 0
 \end{aligned}$$

Finalement, il ne reste que :

$$\begin{aligned}
 &- \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N [A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v] - \sum_{F \in F_h^i} \int_F [A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v] \\
 &- \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) \right) \cdot n_F \right\} \cdot [v] - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \{ u_i (C_{i,g}(w) g) \cdot n_F \} \cdot v \\
 &= - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{ A_{i,k}(w) \nabla u_k \} \cdot n_F \cdot [v] \\
 &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] , \quad i \in \{0, \dots, N\}
 \end{aligned}$$

### 6.3.4 Expression de la forme bilinéaire

#### Terme diffusif

On adopte la notation provisoire suivante, pour  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\begin{aligned} a_{prov}(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot \llbracket v \rrbracket \end{aligned}$$

Afin de symétriser cette expression, on va lui rajouter les termes :

$$\epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot \llbracket u_k \rrbracket$$

$$\epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F \cdot u_k$$

avec  $\epsilon \in \{-1, 0, 1\}$ .

De plus, pour assurer la coercivité de la forme bilinéaire, on rajoute également un terme dit de *pénalisation* :

$$\sum_{F \in F_h} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N \llbracket u_k \rrbracket \cdot \llbracket v \rrbracket$$

D'où,  $\forall i \in \{0, \dots, N\}$ ,



$$\begin{aligned}
 a(w; u, v) &= a_{prov}(w; u, v) + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_k] \\
 &\quad + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F \cdot u_k + \sum_{F \in F_h} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] \cdot [v] \\
 &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \\
 &\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F \cdot u_k \\
 &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot [v] + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_k] \\
 &\quad + \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] \cdot [v] + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v
 \end{aligned}$$

On a décomposé le terme de pénalisation comme suit :

$$\begin{aligned}
 \sum_{F \in F_h} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] \cdot [v] &= \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] \cdot [v] \\
 &\quad + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v \\
 &\quad + \sum_{F \in F_h^N} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v
 \end{aligned}$$

**Remarque** Ici, le terme de pénalisation sur les faces sur lesquelles on impose une condition de type de Neumann, va passer dans le second membre dans l'équation (6.1) d'où son absence dans l'expression de  $a$ .

### Terme convectif

Pour  $i \in \{0, \dots, N\}$ , on note :

$$\begin{aligned}
 c(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\
 &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v], \quad i \in \{0, \dots, N\}
 \end{aligned}$$

### 6.3.5 Formulation variationnelle

En reprenant l'équation (6.1), il vient, pour  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$a(w; u, v) + c(w; u, v) = L(w; v) \quad (6.3)$$

avec

$$\left\{ \begin{aligned} \sum_{F \in F_h^N} \int_F \phi^{i,N} &= \sum_{F \in F_h^N} \int_F \sum_{k=0}^N (A_{i,k}(w) \nabla u_k + A_{i,g}(w) \cdot g) \cdot n_F \cdot v \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^N} \int_F \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^N} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k^D \cdot v \\ a(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot \nabla v \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla u_k \cdot n_F \cdot v + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F \cdot u_k \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla u_k\} \cdot n_F \cdot [v] + \epsilon \sum_{F \in F_h^i} \int_F \sum_{k=0}^N \{A_{i,k}(w) \nabla v\} \cdot n_F \cdot [u_k] \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^i} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N [u_k] \cdot [v] + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k \cdot v \\ c(w; u, v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T \left( u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot \nabla v \\ &\quad - \sum_{F \in F_h^i} \int_F \left\{ u_i \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right\} \cdot n_F \cdot [v] \\ L(w; v) &= \sum_{T \in T_h} \int_T F^i(t^n, \cdot) v - \sum_{T \in T_h} \int_T A_{i,g}(w) \cdot g \cdot \nabla v \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^D} \int_F A_{i,g}(w) \cdot g \cdot n_F \cdot v + \sum_{F \in F_h^D} \int_F \left( u_i^D \left( \sum_{k=0}^N C'_{i,k}(w) + C_{i,g}(w) g \right) \right) \cdot n_F \cdot v \\ &\quad + \epsilon \sum_{F \in F_h^D} \int_F \sum_{k=0}^N A_{i,k}(w) \nabla v \cdot n_F \cdot u_k^D + \sum_{F \in F_h^D} \frac{\eta}{h_F} \int_F \sum_{k=0}^N u_k^D \cdot v \\ &\quad + \sum_{F \in F_h^N} \int_F \phi^{i,N} \end{aligned} \right.$$

En considérant les termes de dérivée par rapport au temps, et donc en revenant au problème initial (3.1), l'équation à résoudre est :

$$\begin{aligned}
 a(w; u, v) + c(w; u, v) + \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(w) \frac{u}{\Delta t^n} &= L(w; v) \\
 &- \sum_{T \in T_h} \int_T \frac{X^i(w) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \cdot v \\
 &+ \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(w) \frac{w}{\Delta t^n} \cdot v
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

La formulation variationnelle revient donc à :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u_{\cdot, q+1}^n \in V_h \text{ telle que} \\ a(u_{\cdot, q}^n; u_{\cdot, q+1}^n, v) + c(u_{\cdot, q}^n; u_{\cdot, q+1}^n, v) + \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(u_{\cdot, q}^n) \frac{u_{\cdot, q+1}^n}{\Delta t^n} = L(u_{\cdot, q}^n; v) \\ \quad - \sum_{T \in T_h} \int_T \frac{X^i(u_{\cdot, q}^n) - X^i(u^{n-1})}{\Delta t^n} \cdot v \\ \quad + \sum_{T \in T_h} \int_T J_{X^i}(u_{\cdot, q}^n) \frac{u_{\cdot, q}^n}{\Delta t^n} \cdot v \\ \forall v \in V_h. \end{array} \right.$$

où  $n$  indique le pas de temps,  $q$  l'indice de la suite construite par la méthode de *quasi-Newton*,  
 $i \in \{0, \dots, N\}$  l'indice correspondant au  $i$ -ème composant.

## 6.4 Annexe D : Outils de développement

### 6.4.1 Langage C++

Le langage C++ est un langage orienté objet dérivé (et compatible) du langage C. La programmation orientée objet se distingue de la programmation procédurale (par exemple, le langage C est procédural) par le fait qu'elle n'est plus pensée en termes de procédures à savoir des fonctions, des routines ou encore des sous-routines à imbriquer mais en termes d'*objets* interagissant entre eux. En C++, on parle aussi de *classes* pour désigner les objets.

On ne s'étendra pas davantage sur le sujet, car la littérature dans ce domaine est assez riche, et l'on considèrera que le lecteur est au fait de tous ces aspects.

### 6.4.2 LibMesh

*LibMesh* (cf. [1]) est une bibliothèque C++ qui fournit un cadre pour la simulation numérique des équations aux dérivées partielles sur des maillages non structurés (1D, 2D ou 3D). Elle permet en outre de travailler sur des plateformes parallèles et offre un support assez complet pour faire du raffinement de maillage adaptatif.

Elle a été développée à l'*Université du Texas* à Austin dans le *CFDLab* depuis mars 2002. Les contributions au projet viennent principalement de l'*Institut de modélisation et calcul de l'Université technique d'Hambourg-Harbourg* mais également par les associés du *CFDLab* : le *PECOS Center* à Austin, le *Computational Frameworks Group* de l'*Idaho National Laboratory*, la *NASA Lyndon B. Johnson Space Center*, et le *MIT*.

Elle fournit un ensemble de classes permettant la représentation (aussi bien parallèlement que séquentiellement) des maillages, des matrices issues du schéma de discrétisation et des vecteurs solutions. Elle permet de plus d'implémenter assez naturellement une large variété de méthodes d'éléments finis à l'aide de classes qui regroupent les outils mathématiques nécessaires : fonctions de formes et leurs dérivées, formules de quadratures sur l'élément de référence, passage de l'élément de référence à l'élément réel, etc. Le panel des types de mailles pris en charge est assez large : triangle, quadrangle, tétraèdre, hexaèdre, prisme, pyramide.

Libmesh ne propose pas en interne de méthode de résolution de système linéaire, on trouve, en substitution, une classe générique qui sert d'interface avec des bibliothèques externes telles que *PETSc*. Cette dernière fournit une large gamme de méthodes itératives et offre de plus une interface vers d'autres logiciels d'algèbre linéaire.

En outre, LibMesh ne fournit pas de réels outils pour la génération de maillage mais simplement des maillages réguliers sur un pavé droit (ou en dimension inférieure, un rectangle ou un segment).

Parmi les fonctionnalités proposées par LibMesh, on peut souligner l'attention portée sur la possibilité d'écrire du code "indépendamment" du contexte. En particulier, la dimension du maillage (1D, 2D ou 3D) et la parallélisation de certaines tâches comme l'assemblage et l'inversion des matrices sont "implicites" dans le code. Un même code peut ainsi être exécuté sur des maillages de différentes dimensions et sur un (calcul séquentiel) ou plusieurs processeurs (calcul parallèle).

## 6.5 Annexe E : Compléments à la méthode de Galerkin Discontinue

Pour obtenir plus de détails concernant les méthodes de Galerkin discontinues, on renvoie à [7].

### 6.5.1 Théorème de Lax-Wendroff

Les propriétés de consistance, de stabilité et de convergence sont liées par le théorème de Lax :

**Théorème 1** *Dans un problème bien posé, et avec un schéma numérique consistant, la stabilité est une condition nécessaire et suffisante pour la convergence.*

**Théorème 2** *Lax-Wendroff. Si un schéma numérique consistant et conservatif converge lorsqu'on raffine les pas de temps et d'espace, c'est-à-dire lorsque  $\Delta t \rightarrow 0$  et  $\Delta x \rightarrow 0$  alors il converge vers une solution faible des équations.*

#### Remarques

- Le théorème ne garantit pas la convergence et le schéma peut être instable.
- Le théorème ne garantit pas l'unicité de la solution.
- Si le schéma converge, le théorème ne garantit pas qu'il converge vers une solution entropique.

### 6.5.2 Espace de Sobolev brisé

Les espaces de Sobolev brisés sont les espaces naturels pour travailler avec les méthodes de Galerkin discontinues. Ils dépendent fortement du partitionnement du domaine. Soit  $\Omega$  un domaine polygonal discrétisé en éléments  $T$  formant un partitionnement  $(T_h)_{h>0}$ .  $T$  est soit un triangle ou un quadrilatère (2D), soit un tétraèdre ou un hexaèdre (3D). Pour simplifier, on admettra que l'intersection de deux éléments est soit vide, soit un point, soit une arête, ou encore une face. Le maillage est non-structuré et peut être non-coïncident (il existe au moins un élément possédant une face divisée en sous-faces). De plus, le maillage est régulier c'est-à-dire que si  $h_T$  désigne le diamètre de  $T$ , et  $\rho_T$  le diamètre maximal de la boule inscrite dans  $T$ , il existe une constante  $\rho > 0$  telle que :

$$\forall T \in T_h, \quad \frac{h_T}{\rho_T} \leq \rho.$$

On introduit l'espace de Sobolev brisé pour tout réel  $s$ ,

$$H^s(T_h) = \{v \in L^2(\Omega) : \forall T \in T_h, v|_T \in H^s(T)\}$$

muni de la norme de Sobolev brisée :

$$\|v\|_{H^s(T_h)} = \left( \sum_{T \in T_h} \|v\|_{H^s(T)}^2 \right)^{1/2}.$$

En particulier, on utilisera la semi-norme brisée du gradient :

$$\|\nabla v\|_{H^0(T_h)} = \left( \sum_{T \in T_h} \|\nabla v\|_{L^2(T)}^2 \right)^{1/2}.$$

**Remarques**

- On a clairement :

$$H^s(\Omega) \subset H^s(T_h) \quad \text{et} \quad H^{s+1}(T_h) \subset H^s(T_h)$$

- Les inégalités classiques de Poincaré et de Korn sont généralisées aux espaces de Sobolev brisés.

**Quelques rappels :**

**Inégalité de Poincaré** Si  $\Omega$  est un domaine lipschitzien borné, il existe une constante  $C_p$  telle que pour toute fonction  $v \in H_0^1$ , on a :

$$\|v\|_{L^2} \leq C_p \|\nabla v\|_{L^2}$$

**Formule de Green** Soit  $\Omega$  un ouvert borné de  $\mathbb{R}^d$  avec  $d = 2, 3$ , et  $n$  la normale unitaire extérieure. Soient  $u$  et  $v$  deux fonctions régulières, alors on a :

$$\int_{\Omega} \Delta u \cdot v dx = - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} \cdot v d\sigma$$

avec  $\frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot n$  est la dérivée normale de  $u$ .

**6.5.3 Inégalité inverse**

**Lemme 1** Soit  $(S_h)_{h>0}$  une famille de maillages non-structurés de  $\Omega$ , coïncidents et réguliers au sens de Ciarlet, alors il existe  $C_{inv}$  telle que pour tout  $h$ ,  $\forall S \in S_h$ , et  $\forall v_h \in \mathbb{P}_d^k(S_h)$ , on a :

$$\|\nabla v_h\|_{L^2(S)^d} \leq C_{inv} h_S^{-1} \|v_h\|_{L^2(S)}$$

Pour une famille de maillages non-coïncidents et réguliers au sens de Ciarlet  $(T_h)_{h>0}$ , et sous l'hypothèse qu'il existe un sous-maillage  $S_h$  de  $T_h$  tel que :

- $S_h$  est composé de simplexes, coïncident et régulier au sens de Ciarlet, tel que :

$$\forall S \in S_h, \quad \exists ! T \in T_h \quad \text{tel que} \quad S \subset T,$$

- Il existe  $\rho > 0$  telle que pour tout  $S \in S_T$ , on a :

$$h_S \geq \rho \cdot h_T$$

où  $S_T := \{S \in S_h, S \subset T\}$  et  $h_T$  désigne le diamètre de  $T$ ,

- Pour tout  $F' \in F_h^{S_h}$ , il existe un unique  $F \in F_h$  telle que  $F' \subset F$  avec  $F_h^{S_h}$  désigne l'ensemble des faces de  $S_h$ ,

on a le lemme suivant :

**Lemme 2** Il existe  $C_{inv}$  telle que  $\forall h, \forall T \in T_h$  et  $\forall v_h \in \mathbb{P}_d^k(T_h)$ , on a :

$$\|\nabla v_h\|_{L^2(T)^d} \leq C_{inv} h_T^{-1} \|v_h\|_{L^2(T)}.$$

# Bibliographie

- [1] Site de la bibliothèque libmesh, consulté de mars à août 2012. <http://libmesh.sourceforge.net/>.
- [2] J. Diaz C. Agut. Stability analysis of the interior penalty discontinuous galerkin method for the wave equation. Rapport de recherche. INRIA, 2010.
- [3] A. Ern. Méthodes de galerkin discontinues et applications. Cours de Mathématiques de la Modélisation de l'Université Pierre et Marie Curie Paris 6, mars 2007.
- [4] M. Granger. Chapitre 2. normes matricielles. conditionnement. Cours d'analyse numérique de l'Université d'Angers, octobre 2009.
- [5] B.-M. Rivière P. Bastian. Discontinuous galerkin methods for two-phase flow in porous media. Article scientifique. Kluwer Academic Publishers, 2004.
- [6] M.-A. Puscas. Simulation d'écoulements multiphasiques en milieu poreux avec résolution par la méthode galerkin discontinue. Rapport de stage IRSN, septembre 2011.
- [7] B.-M. Riviere. Discontinuous galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations : Theory and implementation. Livre, 2008.
- [8] S. Sayari. Etude numérique de quelques équations aux dérivées partielles par la méthode discontinue de galerkin. Thèse de doctorat. Université de Cergy-Pontoise, 2010.
- [9] K. Shahbazi. An explicit expression for the penalty parameter of the interior penalty method. Note. Université de Toronto, 2004.
- [10] F. Smaï. Développement d'outils mathématiques et numériques pour l'évaluation du concept de stockage géologique. Thèse de doctorat. Université Claude-Bernard Lyon 1, décembre 2009.
- [11] F. Smaï. Développement d'un code de calcul 3d pour modéliser l'écoulement biphasique avec échanges entre les phases dans un milieu poreux - application au mélange eau-hydrogène au voisinage d'un stockage de déchets nucléaires. Rapport post-doctoral IRSN, décembre 2010.
- [12] C. Werwaecke. Simulation d'écoulements turbulents compressibles par une méthode d'éléments finis stabilisés. Thèse de doctorat. Université de Bordeaux 1, 2010.
- [13] B.-M. Rivière Y. Epshteyn. Estimation of penalty parameters for symmetric interior penalty galerkin methods. Article scientifique. Université de Pittsburg, 2004.