Première partie

Introduction

Le travail de recherche effectué au cours de cette thèse se décompose en deux parties principales. Il concerne l'analyse et l'approximation numérique du système des équations de Navier-Stokes à plusieurs pressions indépendantes (première partie), ainsi que de quelques systèmes d'équations aux dérivées partielles développant des chocs non classiques ou des transitions de phase (deuxième partie). Les systèmes considérés sont tous motivés par des applications physiques concrètes et les problèmes abordés s'inscrivent dans un véritable challenge numérique, non encore complètement résolu à ce jour, à savoir contrôler la dissipation (d'entropie) numérique associée à une discrétisation donnée. Nous considérons ici des discrétisations associées à des systèmes sous forme non conservative (première partie) et conservative (deuxième partie).

Première partie (chapitres II 1 à II 4 et III 1 à III 4)

Dans la première partie de ce manuscrit, nous nous intéressons à l'approximation numérique des solutions du système des équations de Navier-Stokes à plusieurs pressions indépendantes, encore appelées équations de Navier-Stokes à plusieurs entropies spécifiques. La somme des pressions partielles du système détermine la pression totale du fluide considéré. Des énergies internes et des viscosités sont naturellement associées à chacune des pressions du système. Avec des notations classiques, l'énergie totale du fluide s'écrit alors, en une dimension d'espace, sous la forme suivante :

$$\rho E = \frac{(\rho u)^2}{2\rho} + \sum_{i=1}^{N} \rho \varepsilon_i,$$

N représentant le nombre de pressions considérées.

Comme nous le constaterons dans les chapitres à venir, le système d'équations aux dérivées partielles étudié ne constitue dans les faits ni plus ni moins qu'une extension naturelle des équations de Navier-Stokes usuelles obtenues en considérant une seule loi de pression. Nous montrerons par exemple que sous des hypothèses de modélisation classiques, l'opérateur du premier ordre extrait du système considéré est hyperbolique, les champs caractéristiques associés aux valeurs propres correspondantes étant soit vraiment non linéaires, soit linéairement dégénérés. Ces propriétés sont également partagées par le système des équations d'Euler (opérateur du premier ordre extrait des équations de Navier-Stokes usuelles).

En regard de ces propriétés agréables et classiques, une grande différence oppose le cadre usuel au cadre qui nous préoccupe : les systèmes considérés ici s'écrivent naturellement sous forme non conservative et n'admettent pas, sauf hypothèse de modélisation restrictive, de formulation équivalente sous forme complètement conservative. Autrement dit, tout changement de variables admissible transforme le système initial en un système équivalent (pour les solutions régulières) dans lequel subsistent toujours des produits non conservatifs (PNC) impliquant l'inconnue et ses dérivées premières (PNC du premier ordre) et/ou l'inconnue et ses dérivées secondes (PNC du second ordre). Les systèmes en considération trouvent, en une dimension d'espace, la forme condensée suivante :

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = \partial_x(\mathcal{D}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(x,t) \in I\!R^P, \quad x \in I\!R, \quad t > 0, \qquad (1)$$

où $\mathbf{u}$ représente le vecteur des inconnues et $\mathcal{A}$ une matrice non jacobienne de $I\!R^{P\times P}$, c'est-à-dire telle qu'il n'existe pas de fonction flux $\mathbf{f} : I\!R^P \to I\!R^P$ satisfaisant $\mathcal{A} = D\mathbf{f}$. Notons que par souci de simplicité, l'ensemble des produits non conservatifs du système (1) a été concentré sur l'opérateur du premier ordre, le membre de droite étant de ce fait sous forme complètement conservative. Nous adopterons cette écriture dans la présentation générale par souci de simplicité.

Les systèmes considérés dans cette première partie ont un intérêt de toute première importance puisqu'ils interviennent dans de nombreuses applications physiques :
- en turbulence compressible par exemple, les modèles à deux équations de transport du type $k-\varepsilon$, $k-l$, $k-\omega$ (description du champ turbulent à l'aide d'une échelle unique, voir Berthon [10]) ou les modèles à échelles multiples (description de la turbulence à l'aide de plusieurs échelles, voir ci-après) rentrent dans le formalisme proposé. Dans ces modèles, la pression laminaire est en effet distinguée de la (des) pression(s) turbulente(s).
- en physique des plasmas également, les modèles décrivant les écoulements de gaz réactifs faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique (voir Coquel et Marmignon [34], [35], [36]) rentrent dans le cadre de travail considéré. Dans ce contexte, la température des électrons est distincte de celle des autres espèces. Nous sommes donc amenés à considérer plusieurs pressions indépendantes, la pression du gaz d'électrons et la pression des espèces dites lourdes.
- en physique des mélanges de fluides complexes, les modèles décrits par Truesdell [137] ainsi que ceux récemment introduits par Lagoutière [79] s'inscrivent naturellement dans le présent contexte.

Le chapitre III 4 propose d'appliquer les considérations théoriques et numériques développées dans la première partie de ce manuscrit aux modèles multi-échelle de turbulence compressible homogène isotrope.

Précisons dès à présent que l'hypothèse de grands nombres de Reynolds sous-jacente à une telle modélisation rend la dynamique du système (1) principalement dictée par son opérateur convectif (opérateur du premier ordre extrait). L'approximation numérique des solutions du système (1) consiste donc, pour un niveau de raffinement réaliste et loin de toute paroi, à approcher numériquement les solutions du système hyperbolique non conservatif extrait, à savoir :

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{u}(x,t) \in I\!R^P, \quad x \in I\!R, \quad t > 0. \qquad (2)$$

La problématique des systèmes hyperboliques sous forme non conservative a fait l'objet de nombreuses études, tant du point de vue théorique (définition du produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$) que du point de vue numérique. Nous proposons de rappeler brièvement les principales motivations de ces études, afin d'introduire le plus naturellement possible les travaux effectués dans la première partie de ce manuscrit.

Systèmes hyperboliques sous forme non conservative

• Du point de vue théorique, le système (2) étant hyperbolique, ses solutions développent des discontinuités en temps finis (voir Lax [84]). Il est indispensable d'entendre

le système (2) en un sens affaibli permettant de définir une notion de solution discontinue. La validité d'une condition d'entropie est nécessaire pour assurer l'unicité des solutions ainsi définies.
Lorsque le système (2) est un système de lois de conservation, c'est-à-dire lorsqu'il existe une fonction flux $\mathbf{f} : \mathbb{R}^P \to \mathbb{R}^P$ telle que $\mathcal{A} = D\mathbf{f}$, la notion de solution faible au sens des distributions est utilisée pour définir les solutions du système (2). Des résultats d'existence et d'unicité ont alors été obtenus pour des données initiales à variation totale bornée et suffisamment proches d'un état constant (voir Liu [100], [103], Glimm [55], Lax [83], [84]). Nous renvoyons à l'ouvrage de LeFloch [88] pour un exposé de ces résultats ainsi que des extensions.
Lorsque la matrice $\mathcal{A}$ n'est pas la jacobienne d'un flux, la théorie des distributions est inopérante puisque le produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ n'a pas de sens classique au niveau d'une discontinuité de la solution $\mathbf{u}$. Il s'agit de calculer le produit d'une fonction de type Heavyside (fonction créneau) et d'une masse de Dirac (dérivée au sens des distributions d'une fonction créneau) évaluées sur la discontinuité. Les singularités étant concentrées au même point (point de la discontinuité), ce produit n'a pas de définition unique au sens des distributions. Pour surmonter cette difficulté, Dal Maso, LeFloch et Murat [42] ont introduit (pour les fonctions à variation totale bornée) une notion de solution faible pour les systèmes hyperboliques sous forme non conservative. Elle permet de donner une définition au produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ et généralise la notion de solution faible au sens des distributions pour les systèmes conservatifs. De manière plus précise, la définition de ce produit non conservatif est basée sur la donnée d'une famille de chemins $\phi : [0,1] \times \mathbb{R}^P \times \mathbb{R}^P \to \mathbb{R}^P$ satisfaisant la propriété suivante :

$$\phi(0,\mathbf{u},\mathbf{v}) = \mathbf{u}, \quad \phi(1,\mathbf{u},\mathbf{v}) = \mathbf{v}, \quad \text{pour tout } (\mathbf{u},\mathbf{v}) \in \mathbb{R}^P \times \mathbb{R}^P.$$

Sous des hypothèses de consistance et de régularité que nous ne détaillerons pas ici (voir [42]), Dal Maso, LeFloch et Murat définissent alors dans l'espace des mesures de Borel le produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ au point x_0 d'une discontinuité séparant deux états constants $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_1$ en posant :

$$[\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}]_\phi = \int_0^1 \mathcal{A}(\phi(s,\mathbf{u}_0,\mathbf{u}_1))\frac{\partial\phi}{\partial s}(s,\mathbf{u}_0,\mathbf{u}_1)ds\ \delta_{x_0}. \tag{3}$$

On montre sans aucune difficulté que cette définition du produit $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ est, dans le cas d'un produit conservatif (c'est-à-dire lorsque $\mathcal{A} = D\mathbf{f}$ pour une fonction flux $\mathbf{f}$), indépendante de ϕ et consistante avec le cadre usuel des distributions. Par ailleurs et à titre d'illustration, notons que la définition (3) coïncide avec celle introduite par Volpert [145] lorsque ϕ correspond à la famille des lignes droites :

$$\phi(s,\mathbf{u},\mathbf{v}) = \mathbf{u} + s(\mathbf{v}-\mathbf{u}), \quad \forall\ \mathbf{u},\mathbf{v} \in \mathbb{R}^P, \quad \forall\ s \in [0,1].$$

De même que dans le cadre conservatif, la définition (3) conduit à des résultats d'existence et d'unicité des solutions faibles du système (2) (voir Dal Maso, LeFloch et Murat [42], Liu [92], LeFloch et Tzavaras [97], LeFloch [91]).

La définition (3) du produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ dépend fortement de la famille de chemins ϕ considérée et supposée connue. Une question naturelle concerne l'obtention d'une telle famille de chemins. Selon LeFloch [90] et Sainsaulieu [115], la définition de ϕ repose sur l'information, non encore utilisée, contenue dans le système convectif-diffusif (1) dont dérive (2). Ainsi, une solution choc du système (2), caractérisée avec des notations classiques par le triplet $(\sigma, \mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1)$, est définie comme la limite lorsque les termes diffusifs sont négligés d'une solution onde progressive du système (1), c'est-à-dire une solution régulière vérifiant :

$$\begin{gathered} \mathbf{u}(x,t) = \overline{\mathbf{u}}(\xi), \quad \xi = x - \sigma t, \\ \lim_{\xi \to -\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_0, \quad \lim_{\xi \to +\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_1. \end{gathered} \tag{4}$$

Dans [90], LeFloch montre comment obtenir une famille de chemins ϕ consistante avec une telle définition.

Nous adopterons cette définition du produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$ dans la première partie de ce manuscrit, et renvoyons par exemple le lecteur à Colombeau et Leroux [31] pour une autre théorie sur les produits non conservatifs.

Pour conclure, il est important de noter que contrairement au cadre conservatif usuel, la définition adoptée ci-dessus du produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$ dépend de la forme du tenseur de dissipation du système (1). Les solutions onde progressive, et plus précisément les états de sortie $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1(\sigma, \mathbf{u}_0)$ associés à de telles solutions, dépendent en effet de la forme du tenseur diffusif du système en considération, comme l'illustrent de nombreuses contributions sur ce sujet : Berthon et Coquel [11], Raviart et Sainsaulieu [112], Sainsaulieu [115], Karni [76] .... Cette propriété est une caractéristique des systèmes hyperboliques sous forme non conservative. Nous la retrouverons dans un autre contexte, celui des systèmes conservatifs de type hyperbolique dont les champs ne sont pas vraiment non linéaires, ou de type hyperbolique-elliptique. Ces modèles décrivent par exemple la dynamique des transitions de phase (voir deuxième partie du manuscrit pour plus de précisions). La principale difficulté dans l'approximation numérique des solutions discontinues du système (2) consistera donc à respecter le plus fidèlement possible la forme du tenseur de dissipation intervenant dans (1), afin d'obtenir les solutions onde de choc associées. Dans le cas contraire, on s'expose à la capture de solutions arbitrairement éloignées de la solution attendue, comme l'illustre la figure 1.

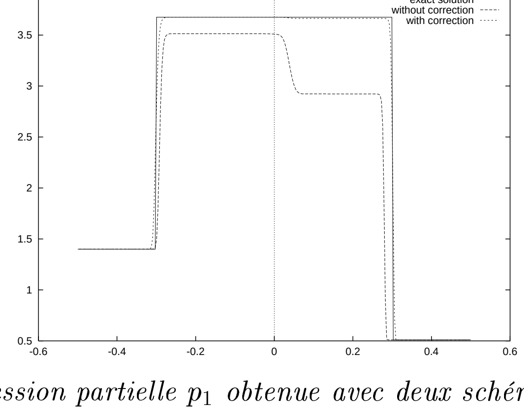

FIG. 1 – *Pression partielle p_1 obtenue avec deux schémas distincts*

Le cas test correspondant à cette simulation est détaillé dans le chapitre II 2.

• Du point de vue numérique, l'approximation des solutions d'un système hyperbolique non conservatif du type (2) reste un problème essentiellement ouvert à ce jour. La principale raison provient de l'absence de résultats généraux de convergence pour les schémas numériques associés. En effet, les méthodes numériques adaptées à de tels systèmes étant sous forme non conservative, le cadre général donné par le théorème de Lax-Wendroff est inopérant. En d'autres termes, nous ne sommes plus en mesure de garantir l'obtention d'une solution discrète en accord avec la solution attendue par raffinement de maillage, même pour une méthode numérique convergente vers une certaine fonction limite. Cette caractéristique des schémas numériques sous forme non conservative s'inscrit dans un cadre plus général que celui qui nous préoccupe ici, puisque même lorsque le système (2) admet une formulation équivalente conservative, de tels schémas s'avèrent être inadaptés. A titre d'exemple, Hou et LeFloch [69] ont montré dans le cas d'une loi de conservation scalaire, que les schémas non conservatifs contenant de la viscosité numérique (Lax-Friedrichs, Godunov, ...) ne convergeait pas, en général, vers la solution attendue du problème considéré. Plus récemment, Berthon [10] a mis en évidence les mêmes observations en approchant par la méthode de Godunov les équations de Navier-Stokes usuelles sous forme non conservative (*i.e.* en privilégiant par exemple la loi d'évolution sur l'entropie spécifique au détriment de la loi de conservation sur l'énergie totale, celle-ci jouant alors le rôle d'entropie de Lax du système). Dans ce cas encore, la solution exacte attendue et la solution numérique ne coïncident pas, et ce en dépit de propriétés d'équivalence au niveau continu des solutions des systèmes considérés. Par ailleurs, l'erreur numérique entre ces deux solutions augmente avec le temps (en un sens à préciser, voir Hou et LeFloch [69], Berthon [10]).

Il ressort de ces études que l'erreur entre solution exacte et solution numérique peut être associée à la dissipation (d'entropie) du schéma utilisé. Dit autrement, cette erreur est en étroite relation avec l'opération de projection inhérente au schéma utilisé (projection L^2 pour la méthode de Godunov par exemple). Ces observations sont corroborées par les travaux de LeFloch et Liu [92] : ils montrent la convergence de la méthode de Glimm [55], **exempte de toute étape de projection**, lorsqu'elle est appliquée à un système sous forme non conservative, celui-ci admettant ou non une formulation équivalente conservative (pourvu que les solutions coïncident au niveau continu).
Dans le cadre conservatif ($\mathcal{A} = D\mathbf{f}$), plusieurs études ont néammoins permis d'obtenir, après correction, des schémas numériques sous forme non conservative qui convergent vers la solution attendue. Hou et Lefloch [69] obtiennent de tels schémas dans le contexte d'une loi de conservation scalaire en corrigeant localement un schéma "vraiment" non conservatif à l'aide d'un schéma conservatif. Le schéma obtenu est encore sous forme non conservative et converge effectivement vers la solution physique par raffinement de maillage. Pour les systèmes, Di Perna [45] a prouvé la convergence d'un schéma hybride Lax-Friedrichs - Glimm non conservatif vers la solution attendue.
Dans le cadre vraiment non conservatif ($\mathcal{A} \neq D\mathbf{f}$), les études menées dans Berthon [10] sont celles qui se rapprochent le plus de la problématique dictée par la présente recherche doctorale. Elles concernent l'approximation des solutions des équations de Navier-Stokes à deux pressions indépendantes, qui est un cas particulier ($N = 2$) du système qui nous préoccupe ici ($N \geq 2$). Berthon propose de corriger les méthodes d'approximation classiques de *"shock-capturing"* (méthode de Godunov, méthode de

Roe, ...) en leur ajoutant une étape de **projection non linéaire** à la fin de chaque itération en temps. Les résultats numériques obtenus par une telle stratégie en attestent le bien-fondé (voir Berthon [10] pour plus de détails).

Les schémas numériques développés dans la première partie de ce manuscrit pour approcher numériquement les solutions des équations de Navier-Stokes multi-pression peuvent être vus comme une extension au cas $N \geq 2$ des études menées dans Berthon [10], en proposant de nouvelles techniques de correction complètement linéaires. La recherche de nouvelles procédures a été motivée par l'extension de la problématique à plusieurs dimensions d'espace. Ces travaux sont à la base d'une technique d'implicitation que nous illustrerons sur des problèmes véritablement bi-dimensionnels.

Soulignons que dans notre contexte, la connaissance du problème de Riemann associé à (2) (voir chapitre II 1) aurait pu nous inciter à approcher numériquement les solutions de ce système par la méthode de Glimm. Cette méthode, exempte de toute étape de projection, suffirait à un tel propos. Nous n'avons volontairement pas adopté une telle stratégie, afin notamment de faciliter l'extension de l'approche à des considérations multi-dimensionnelles.

Travaux effectués

Nous débutons la première partie de ce manuscrit en établissant l'existence et l'unicité d'une solution du problème de Riemann pour l'opérateur du premier ordre (2) associé au système des équations de Navier-Stokes à N pressions indépendantes ($N \geq 2$). Une étude des solutions onde progressive de ce système est nécessaire. Ces solutions caractérisent les chocs admissibles du système hyperbolique sous-jacent et permettent de définir le produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$ selon (3), la famille de chemins $\phi(., \mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1)$ coïncidant avec le profil de l'onde progressive joignant les points critiques $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_1$ et se déplaçant à la vitesse σ (voir (4)).

Dans le chapitre II 1, nous montrons l'existence et l'unicité (à une translation près) des solutions onde progressive du système pour des lois de pression de gaz parfaits polytropiques et dans le cas de viscosités constantes. De manière attendue, l'état de sortie $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1(\sigma, \mathbf{u}_0)$ dépend de la forme du tenseur de dissipation considéré, par l'intermédiaire du rapport des viscosités $\{\mu_i/\mu_N\}_{i=1,\ldots,N-1}$. Nous montrons également que l'état de sortie $\mathbf{u}_1(\sigma, \mathbf{u}_0)$ peut être paramétré par sa densité ρ_1, celle-ci étant solution d'un problème algébrique scalaire. Dès lors, σ et $\mathbf{u}_0$ étant fixés, l'obtention de $\mathbf{u}_1$ se fait par l'implémentation d'un simple algorithme de Newton et ne nécessite plus l'intégration numérique des EDO gouvernant les solutions ondes progressives. Ceci constitue un résultat très agréable dans la pratique, et nouveau dans le contexte des systèmes sous forme non conservative. La propriété de monotonie démontrée du taux de compression ρ_1/ρ_0 par rapport au nombre de Mach relatif permet alors d'établir l'existence et l'unicité (loin du vide) d'une solution du problème de Riemann associé au système hyperbolique non conservatif considéré.

Les chapitres suivants concernent l'approximation numérique des solutions onde progressive.

Le chapitre II 2 propose une extension directe au cas $N \geq 2$ des travaux menés dans Berthon [10] ($N = 2$). Ainsi, après avoir mis en évidence et justifié les erreurs numériques inacceptables générées par des méthodes de type Godunov, nous proposons de corriger ces méthodes classiques à l'aide d'une étape de projection **non linéaire** permettant de forcer au niveau discret la validité des relations de proportionnalité existantes au niveau continu entre les entropies du système. De manière plus précise et avec des notations classiques, ces relations trouvent la forme suivante :

$$\mu_N T_i\{\partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u\} = \mu_i T_N\{\partial_t \rho S_N + \partial_x \rho S_N u\}, \quad i = 1, ..., N-1. \tag{5}$$

En particularisant ces relations à des solutions onde progressive, nous obtenons des relations de saut généralisées traduisant de manière exacte la dépendance vis à vis du rapport des viscosités des solutions onde de choc associées. Leur validité discrète est donc cruciale. Dans (5), l'utilisation d'entropies S_i assurant des propriétés de convexité permet d'obtenir des propriétés de stabilité (principes du maximum, positivité des pressions, inégalités d'entropie, ...) à l'issue de l'étape de correction. Celle-ci consiste en la résolution, à chaque pas de temps, d'un problème algébrique **non linéaire** de taille $(N-1)$, ce qui dans la pratique peut s'avérer coûteux.

Les chapitres II 3 et II 4 proposent d'utiliser respectivement des entropies non convexes et les énergies internes partielles pour respecter la notion de proportionnalité entre chacun des bilans d'entropie. Il s'agit alors, avec des notations claires, d'imposer au niveau discret les relations suivantes, équivalentes à (5) pour les solutions régulières :

$$\mu_N \frac{\rho^{\gamma_i - 1}}{\gamma_i - 1}\{\partial_t \rho s_i + \partial_x \rho s_i u\} = \mu_i \frac{\rho^{\gamma_N - 1}}{\gamma_N - 1}\{\partial_t \rho s_N + \partial_x \rho s_N u\}, \quad i = 1, ..., N-1, \tag{6}$$

avec $s_i = p_i/\rho^{\gamma_i}$ pour tout $i = 1, ..., N$, et :

$$\mu_N\{\partial_t \rho \varepsilon_i + \partial_x \rho \varepsilon_i u + p_i \partial_x u\} = \mu_i\{\partial_t \rho \varepsilon_N + \partial_x \rho \varepsilon_N u + p_N \partial_x u\}, \quad i = 1, ..., N-1. \tag{7}$$

Les algorithmes proposés sont basés sur l'utilisation de solveurs de Riemann approchés appropriés et sont justifiés théoriquement par la satisfaction de propriétés de stabilité identiques à celles obtenues dans le chapitre II 2. Le bénéfice est néammoins significatif : l'utilisation de ces nouvelles variables conduit l'étape de correction à être **explicite**. Elle ne nécessite plus la résolution numérique d'un problème algébrique non linéaire. Outre le gain de temps calcul, l'existence de ces algorithmes explicites (astreints à une restriction CFL classique) permet d'envisager une formulation implicite en temps.

Les chapitres suivants font l'objet d'une introduction plus détaillée en début de partie III.

Le chapitre III 1 décrit une méthode de type volumes finis par Relaxation pour résoudre le système des équations d'Euler multi-pression intervenant dans les algorithmes proposés. Cette méthode numérique vérifie les propriétés de stabilité citées précédemment. Par ailleurs, son utilisation s'avère être particulièrement bien adaptée à notre propos, puisqu'elle autorise un découplage naturel des entropies du système relaxé. Cette caractéristique trouvera toute son importance dans les chapitres suivants. Les chapitres III 2 et III 3 proposent une implicitation des schémas numériques de type prédicteur-correcteur proposés. Il s'agit d'impliciter la méthode de Relaxation décrite dans le chapitre précédent d'une part, et les étapes de correction correspondantes d'autre part. Tirant profit du découplage des entropies du système relaxé, nous proposons un algorithme implicite extrêmement peu coûteux. La stabilité a été testée sur des cas tests bi-dimensionnels (écoulement supersonique à Mach 10 autour d'un cylindre par exemple).

Enfin, le chapitre III 4 propose, en utilisant une méthode de pas fractionnaires, d'appliquer ces considérations aux modèles multi-échelle de turbulence compressible homogène isotrope. Les termes de conductivité thermique ainsi que les termes sources sont pris en compte. Une suite naturelle aux présents travaux consisterait à étendre le traitement des contributions thermiques à des problèmes à plusieurs dimensions d'espace.

Deuxième partie (chapitres IV 1 à IV 3)

Dans la deuxième partie de ce manuscrit, nous nous intéressons à l'approximation numérique des solutions discontinues de systèmes non linéaires de lois de conservation. Par opposition aux équations de Navier-Stokes à plusieurs pressions indépendantes étudiées dans la première partie, les systèmes considérés ici s'écriront donc naturellement sous forme conservative.

De manière plus précise, nous considérons la problématique des systèmes hyperboliques de lois de conservation admettant un ou plusieurs champs caractéristiques non vraiment non linéaires (non VNL) et non linéairement dégénérés (non LD), mais aussi celle des systèmes de lois de conservation mixtes de type hyperbolique-elliptique.

L'absence d'une propriété du type "système hyperbolique dont tous les champs sont soit VNL, soit LD" se traduit par l'importance prise par les petites échelles introduites par des opérateurs classiques de régularisation (viscosité, capillarité) dans la dynamique du système, et ce même à un niveau de description purement convectif. Concrètement, les discontinuités de type choc (ou transitions de phase) du système hyperbolique (ou hyperbolique-elliptique) sous-jacent dépendront intrinsèquement de l'opérateur de régularisation choisi. On peut dès lors faire le lien avec la première partie de ce manuscrit consacrée aux équations de Navier-Stokes à plusieurs pressions indépendantes. Ces dernières équations étant sous forme non conservative, les ondes de choc associées sont sensibles à la régularisation considérée (voir ci-dessus). Au niveau numérique, la première et la deuxième partie ont donc en commun une difficulté majeure, à savoir être capable de restituer des discontinuités de type choc (ou transitions de phase) en accord avec la forme du tenseur de dissipation considéré.

Un grand nombre de modèles répondant à des applications physiques concrètes rentrent dans le cadre de travail proposé dans cette deuxième partie :
- en élastodynamique non linéaire par exemple, de nombreux matériaux sont gouvernés par des lois d'état non convexes, de telle sorte que le système hyperbolique de lois de conservation correspondant n'est plus VNL. Dans ce cas, cela signifie que les matériaux peuvent exister sous différentes phases (chacune étant associée à une région de convexité de la loi d'état) correspondant à différents arrangements entre les atomes.
- en dynamique des fluides compressibles également, les changements de phase liquide-vapeur sont modélisés par des lois de pression généralement non convexes, comme par exemple celle introduite par van der Waals. Les modèles correspondants sont soit hyperboliques non VNL (la pression est monotone mais non convexe), soit hyperbolique-elliptique (la pression n'est plus monotone).

Dans toutes ces situations (et dans bien d'autres encore), les termes de diffusion et de dispersion (viscosité et capillarité) jouent un rôle fondamental dans la dynamique des discontinuités. Mentionnons que cette dépendance est connue et a été étudiée à plusieurs reprises : Abeyaratne et Knowles [1], [2], LeFloch [87], Hayes et LeFloch [69], [64], [65], Truskinovsky [138], [139], Schulze et Shearer [117], Slemrod [123], ... De nombreuses autres études ont été menées et à ce titre nous renvoyons par exemple le lecteur à l'ouvrage [88].

Afin de préciser la contribution apportée à ce sujet au cours de la thèse, nous présentons dans un premier temps le cadre général dans lequel se situe notre étude. Nous spécifierons ensuite les principaux travaux effectués.

Problématique générale : rappels

Considérons un système de lois de conservation de la forme

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0, \quad \mathbf{u}(x,t) \in I\!R^N, \quad x \in I\!R, \quad t > 0, \tag{8}$$

où, de manière classique, $\mathbf{u}$ représente le vecteur des inconnues conservatives et f : $I\!R^N \to I\!R^N$ une application régulière appelée fonction flux. Nous supposerons pour fixer les idées que le système (8) est strictement hyperbolique, c'est-à-dire que la matrice jacobienne $D\mathbf{f}(\mathbf{u})$ est diagonalisable dans $I\!R$ et admet N valeurs propres réelles distinctes $\lambda_1(\mathbf{u}) < ... < \lambda_N(\mathbf{u})$.

Nous rappelons que les solutions du système (8) sont généralement discontinues et que par ailleurs, elles ne sont pas uniquement déterminées par la connaissance de la donnée initiale associée au système (8). Dans ce contexte, il est classique d'ajouter dans le membre de droite de (8) un opérateur de régularisation $\mathcal{R}$, piloté par un petit paramètre ϵ représentant la taille des petites échelles introduites et destiné à tendre vers zéro. Nous obtenons le système suivant :

$$\partial_t \mathbf{u}^\epsilon + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}^\epsilon) = \partial_x \mathcal{R}(\epsilon \partial_x \mathbf{u}^\epsilon, \epsilon^2 \partial_{xx} \mathbf{u}^\epsilon, ...), \quad \mathbf{u}(x,t) \in I\!R^N, \quad x \in I\!R, \quad t > 0, \tag{9}$$

permettant de régulariser les solutions du système (8), et dans la limite $\epsilon \to 0$ de sélectionner la solution physique de ce système.

Soit (U, F) un couple d'applications régulières de $I\!R^N \to I\!R$ (appelées entropie et flux d'entropie) satisfaisant la relation de compatibilité $DF = DUD\mathbf{f}$, et tel que l'application U soit strictement convexe. Sous des hypothèses classiques sur $\mathcal{R}$ ($\mathcal{R}$ est dissipative pour U), la solution limite $\mathbf{u} = \lim_{\epsilon \to \mathbf{0}} \mathbf{u}^\epsilon$ obtenue est une solution faible (au sens des distributions) du système (8), compatible avec la validité de l'inégalité d'entropie suivante :

$$\partial_t U(\mathbf{u}) + \partial_x F(\mathbf{u}) \leq 0. \tag{10}$$

• Lorsque tous les champs du système (8) sont VNL (ce qui correspond à une propriété de type convexité sur le flux $\mathbf{f}$) ou LD, les solutions faibles du problème de Riemann (8) pour la donnée initiale

$$\mathbf{u}(x,0) = \begin{cases} \mathbf{u}_L & \text{si} \quad x < 0, \\ \mathbf{u}_R & \text{si} \quad x > 0, \end{cases} \tag{11}$$

avec $\mathbf{u}_L$ et $\mathbf{u}_R \in I\!R^N$, sont sélectionnées de manière **unique** par la validité de l'inégalité d'entropie (10), au moins pour des valeurs de $\mathbf{u}_L$ et $\mathbf{u}_R$ suffisamment proches l'une de l'autre, c'est-à-dire telles que $|\mathbf{u}_R - \mathbf{u}_L| < C$ où C est une constante à préciser (voir LeFloch [88] pour plus de détails). En d'autres termes, l'inégalité d'entropie (10) sélectionne de manière unique la solution physique de (8). Notons que cette solution coïncide avec la solution **classique** proposée par Lax [83], [84], et basée sur le critère de sélection suivant :

un j-choc connectant deux états $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_1$ est admissible si et seulement si

$$\lambda_j(\mathbf{u}_0) \geq \sigma \geq \lambda_j(\mathbf{u}_1), \tag{12}$$

où $\sigma = \sigma(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1)$ représente la vitesse de propagation du choc. Un choc **classique** au sens de Lax est donc **compressif** en ce sens que les caractéristiques associées aux deux états de la discontinuité rentrent dans le choc (Figure 2).

On montre par ailleurs que la solution **classique** obtenue par le principe de sélection

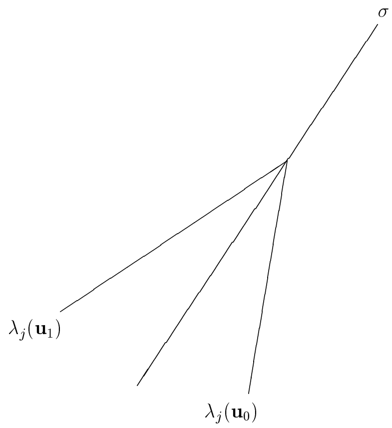

FIG. 2 – *Choc compressif*

(10), ou de manière équivalente par le principe de sélection (12), satisfait également le critère de sélection des solutions faibles introduit par Liu [102] :

un j-choc connectant deux états $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_1$ est admissible si et seulement si

$$\sigma(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}) \geq \sigma(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1), \tag{13}$$

pour tout $\mathbf{u}$ appartenant à la courbe de Hugoniot (issue de $\mathbf{u}_0$) et situé entre $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_1$.

Les critères de sélection des solutions faibles par l'inégalité d'entropie (10), par l'inégalité de Lax (12) ou par les inégalités de Liu (13) sont donc équivalents, lorsque tous les champs caractéristiques du système (8) sont vraiment non linéaires ou linéairement dégénérés. Notons que l'on retrouve ce résultat lorsque (8) n'est constitué que d'une seule équation scalaire ($N = 1$) avec une fonction flux convexe (le champ caractéristique de l'équation (8) est alors VNL). Dans ce cas, une fois encore, l'inégalité d'entropie (10) est suffisante pour sélectionner une unique solution faible du problème de Riemann (8)-(11). Cette solution faible peut être également et de manière équivalente caractérisée par la validité des inégalités de Lax, qui s'écrivent ici, à la traversée d'une discontinuité séparant deux états constants u_0 et u_1 :

$$f'(u_0) \geq \sigma \geq f'(u_1), \tag{14}$$

(avec $\sigma = \sigma(u_0, u_1) = (f(u_1) - f(u_0))/(u_1 - u_0)$ d'après les relations de saut de Rankine-Hugoniot), ou par la validité des inégalités d'Oleinik :

$$\frac{f(u) - f(u_0)}{u - u_0} \geq \frac{f(u_1) - f(u_0)}{u_1 - u_0}, \quad \forall\, u \in [\min(u_0, u_1), \max(u_0, u_1)], \tag{15}$$

dont le critère de Liu (13) constitue une généralisation au cas des systèmes ($N > 1$).

• Lorsque l'un au moins des champs caractéristiques du système (8) n'est ni VNL, ni LD (situation qui nous intéresse ici), l'inégalité d'entropie (10) n'est plus suffisante pour sélectionner les solutions faibles. En conséquence, même pour des états $\mathbf{u}_L$ et $\mathbf{u}_R$ suffisamment proches (au sens $|\mathbf{u}_R - \mathbf{u}_L| < C$), le problème de Riemann (8)-(11) complété par l'inégalité d'entropie (10) n'admet pas une unique solution. Afin de surmonter cette difficulté, Lax [83], [84] propose de sélectionner les solutions du problème de Riemann (8)-(11) par la validité des inégalités (12). On remarque que ce critère de sélection est indépendant de toute constante physique éventuellement présente dans le système physique dont dérive (8). En conséquence, la solution faible sélectionnée ne peut (sauf cas particulier) coïncider avec celle obtenue par une régularisation du type (9). Les paramètres de viscosité et de capillarité étant déterminants dans de nombreuses applications physiques, nous proposons, afin d'en garder le souvenir, de définir les solutions onde de choc du système (8) comme limites d'une solution onde progressive du système régularisé (9), lorsque les petites échelles sont négligées. Une discontinuité séparant deux états constants $\mathbf{u}_0$ et $\mathbf{u}_1$ et se déplaçant à la vitesse σ sera donc admissible si et seulement s'il existe une application régulière

$$\mathbf{u}(x,t) = \overline{\mathbf{u}}(\xi), \quad \xi = x - \sigma t,$$

solution du système (9), et telle que

$$\lim_{\xi \to -\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_0, \quad \lim_{\xi \to +\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_1.$$

Dans le contexte qui nous intéresse ici, l'existence et l'unicité des solutions onde progressive du système (9) ont été largement étudiées ces dernières années, et ce pour plusieurs opérateurs de régularisation $\mathcal{R}$: nous renvoyons par exemple le lecteur à Bona et Schonbek [16], Jacobs, McKinney et Shearer [71], Hayes et LeFloch [69], Bedjaoui et LeFloch [7], ..., pour une équation scalaire ($N = 1$) et à Schulze et Shearer [117], Slemrod [123], Abeyaratne et Knowles [1], [2], Truskinovsky [138], [139], LeFloch [86], Bedjaoui et LeFloch [8], [9], ..., pour un système de lois de conservation (typiquement $N = 2$).

L'analyse onde progressive montre que les solutions onde de choc ainsi définies sont compatibles avec l'inégalité d'entropie (10) mais ne vérifient pas, en général, les inégalités de Lax (12). Dans ce cas, de tels chocs sont dits **non classiques** et sont par définition "**sous-compressifs**", puisque les caractéristiques associées aux états gauche et droit du choc considéré se déplaçant à la vitesse σ le traversent (Figure 3).

Rappelons que l'approximation numérique des chocs non classiques est difficile puis-

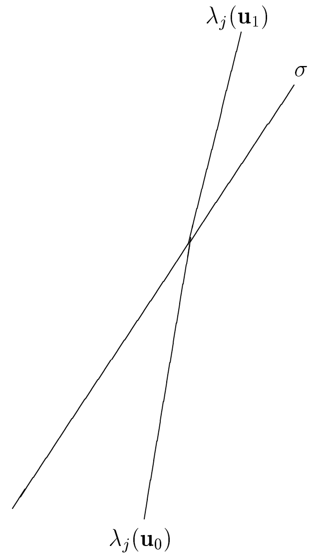

FIG. 3 – *Choc sous-compressif*

qu'ils dépendent des mécanismes de régularisation et que la forme de l'opérateur de régularisation considéré doit être respectée. Soulignons également que l'inégalité d'entropie (10) ne caractérisant pas la solution recherchée, forcer sa validité au niveau discret n'est plus suffisant pour justifier le bien-fondé d'une méthode numérique donnée. Contrairement au cadre usuel de champs VNL (ou LD), le théorème de Lax-Wendroff n'apparaît donc plus totalement adapté à notre propos. Nous verrons aux chapitres IV 1 et IV 2 comment respecter au mieux ces contraintes sur des exemples précis.
Le critère de sélection par analyse onde progressive introduit ci-dessus sélectionne les solutions onde de choc non classiques admissibles, non plus par la validité de l'inégalité d'entropie (10) mais plutôt par la validité d'une égalité d'entropie du type :

$$\partial_t U(\mathbf{u}) + \partial_x F(\mathbf{u}) = \mathcal{M}, \tag{16}$$

où $\mathcal{M}$ désigne une mesure de Borel négative et bornée. Cette mesure est déterminée par l'analyse onde progressive du système (9). Un choc non classique possède sa propre dissipation d'entropie, déterminée par le critère de sélection. Différents opérateurs de régularisation génèrent a priori différentes mesures $\mathcal{M}$.
Le principe de sélection introduit ci-dessus peut aussi être réinterprété dans le formalisme des fonctions cinétiques : pour un état gauche $\mathbf{u}_L$ donné, l'analyse onde progressive définit un état droit $\mathbf{u}_R = \phi(\mathbf{u}_L)$ et une vitesse de propagation σ déterminée par les relations de Rankine-Hugoniot :

$$-\sigma(\phi(\mathbf{u}_L) - \mathbf{u}_L) + (\mathbf{f}(\phi(\mathbf{u}_L)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_L)) = 0,$$

de telle sorte que la discontinuité :

$$\mathbf{u}(x,t) = \begin{cases} \mathbf{u}_L & \text{si} \quad x < \sigma t, \\ \mathbf{u}_R & \text{si} \quad x > \sigma t, \end{cases} \tag{17}$$

soit une solution non classique admissible du système (8). La consistance avec l'inégalité d'entropie (10) au sens des distributions implique

$$D := -\sigma(U(\phi(\mathbf{u}_L)) - U(\mathbf{u}_L)) + (F(\phi(\mathbf{u}_L)) - F(\mathbf{u}_L)) \leq 0.$$

Une fois de plus, différents opérateurs de régularisation génèrent des fonctions cinétiques ϕ possiblement distinctes. Réciproquement, différentes fonctions cinétiques sont associées à différentes régularisations. Ainsi, le concept de fonction cinétique semble bien adapté pour traduire simplement les effets d'un opérateur de régularisation donné, et assurer l'unicité d'une solution faible entropique du système (8). Notons que la connaissance d'une fonction cinétique ϕ détermine la dissipation d'entropie D à travers un choc non classique, σ étant déterminé par les relations de Rankine-Hugoniot habituelles. La mesure de Borel $\mathcal{M}$ intervenant dans (16) est dès lors explicitement connue (comme une fonction de $\mathbf{u}_L$) à travers une telle discontinuité par la donnée de la fonction cinétique ϕ. Nous renvoyons le lecteur à LeFloch [88] pour une revue sur les fonctions cinétiques. D'un point de vue numérique, celles-ci seront considérées dans les chapitres IV 1, IV 2, et IV 3.

Pour conclure ces rappels, nous précisons que les considérations présentées ici dans le contexte des systèmes hyperboliques restent valables pour les systèmes mixtes de type hyperbolique-elliptique, en ce sens que l'inégalité d'entropie (10) ne suffit pas à garantir l'unicité des solutions faibles. De plus, de tels systèmes génèrent (par régularisation visco-capillaire) des discontinuités non classiques sous-compressives correspondant à des transitions de phase subsoniques.

Travaux effectués

La principale motivation des travaux effectués concerne l'approximation numérique des chocs non classiques introduits ci-dessus, ainsi que l'étude de leur comportement (stabilité, dépendance par rapport à l'opérateur de régularisation, comportement asymptotique, interaction, ...).

Dans la littérature, il existe plusieurs approches permettant de traiter numériquement les modèles donnant naissance à des solutions non classiques. Les deux "principales" suivent les caractérisations mises en évidence ci-dessus. La première approche propose de représenter le plus fidèlement possible l'opérateur de régularisation considéré au niveau discret. Les discrétisations obtenues contiennent des termes de diffusion et de dispersion qui permettent d'obtenir numériquement des chocs sous-compressifs (voir Hayes et LeFloch [64], Zhong, LeFloch et Rohde [94], Fan [46], [47], Fan et Slemrod [50], Chalons et LeFloch [24], [25], ...). La deuxième approche propose d'imposer la vitesse de propagation d'une onde non classique au niveau discret par l'intermédiaire d'une fonction cinétique supposée connue. Cette approche est communément répertoriée sous le nom de "sharp interface approach" (interfaces raides) et est associée aux méthodes de type level-set, suivi de front et Glimm (voir Hou, LeFloch et Rosakis [70], LeFloch [86], Abeyaratne et Knowles [3], [2], Truskinovsky [141], [142], Chalons et LeFloch [26], [27], ...).

Les chocs non classiques étant dépendants de l'opérateur de régularisation considéré, les solutions numériques obtenues par la première approche se trouvent être très sensibles à la dissipation numérique, pas toujours maîtrisée, du schéma utilisé. En ce sens, la deuxième approche semble mieux adaptée à notre propos. Remarquons que celle-ci suppose en contrepartie la connaissance explicite de la fonction cinétique associée à une régularisation donnée, et donc à un problème donné.

Dans ce manuscrit, nous mettons en œuvre les deux techniques pour approcher et étudier le comportement des solutions de systèmes conservatifs ayant un intérêt physique et générant des chocs non classiques sous-compressifs.
Ainsi,

(i) les chapitres IV 1 et IV 2 proposent une approximation numérique du problème (8)-(10), d'une part lorsque l'on fait le choix $N = 1$ avec une fonction flux non convexe (cas académique) et d'autre part lorsque l'on considère les deux lois de conservation modélisant la dynamique des fluides de van der Waals. Les schémas numériques présentés sont basés sur une discrétisation précise des régularisations visco-capillaires considérées, et leur stabilité est assurée par la consistance discrète en un sens à préciser avec l'inégalité d'entropie (10). À l'aide de ces schémas et suivant les travaux de Hayes et LeFloch [64], nous étudions pour les deux modèles considérés le comportement des chocs non classiques et des transitions de phase observées (dépendance par rapport aux coefficients de viscosité et de capillarité, tracé des fonctions cinétiques correspondantes, ...).

(ii) le chapitre IV 3 utilise la méthode de Glimm pour discrétiser le système (8). Le solveur de Riemann considéré pour implémenter cette méthode est associé à une fonction cinétique donnée. Tirant profit des propriétés de stabilité et de précision satisfaites par la méthode de Glimm (convergence, discontinuités raides, ...), nous étudions la stabilité et le comportement asymptotique en temps (pour des fonctions périodiques) des chocs non classiques associés aux fonctions cinétiques utilisées. Pour ces études, nous considérons une loi de conservation scalaire avec une fonction flux non convexe et un système de deux lois de conservation intervenant en élastodynamique non linéaire.