Ecole Doctorale de Sciences Mathématiques de Paris Centre

Université Paris Diderot - Paris 7

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Spécialité Mathématiques

Christophe CHALONS

Titre de l'habilitation

Approximation numérique de quelques problèmes hyperboliques : relaxation, chocs nonclassiques, transitions de phase, couplage

soutenue publiquement le 23 juin 2008

après avis des rapporteurs :

M. Yves ACHDOU	Professeur, Université Paris Diderot - Paris 7
M. Franccois BOUCHUT	Directeur de Recherches, CNRS
M. Dietmar KRÖNER	Professeur, Université de Freiburg (Allemagne)
M. Roberto NATALINI	Directeur de Recherches, CNR (Italie)

et devant le jury composé de :

M. Yves ACHDOU	Professeur, Université Paris Diderot - Paris 7
M. Grégoire ALLAIRE	Professeur, Ecole Polytechnique
M. Franccois BOUCHUT	Directeur de Recherches, CNRS
M. Frédéric COQUEL	Chargé de Recherches, CNRS
M. Bruno DESPRÉS	Directeur de Recherches, CEA
M. Robert EYMARD	Professeur, Université Paris-Est Marne-la-Vallée
M. Dietmar KRÖNER	Professeur, Université de Freiburg (Allemagne)

A mes enfants Marie et Téo A mon épouse Ludivine

Remerciements

Mes premiers remerciements sont adressés à Laure Elie, directrice de l'UFR de Mathématiques de l'Université Paris Diderot - Paris 7 et Yvon Maday, directeur du laboratoire Jacques-Louis Lions (LJLL). Ils m'ont accueilli dans leur équipe et fait ainsi bénéficier de conditions de travail idéales.

Je remercie vivement Yves Achdou, Franccois Bouchut, Dietmar Kröner et Roberto Natalini d'avoir accepté de rédiger un rapport sur mon travail, et Grégoire Allaire, Frédéric Coquel, Bruno Després et Robert Eymard d'avoir accepté de participer à mon jury. C'est pour moi un grand honneur de pouvoir tous les associer à mon travail.

Je dois énormément à Frédéric Coquel. Il n'a cessé de m'encourager et me fait partager depuis toutes ces années (9 ans déjà...) sa passion et sa connaissance toujours aussi impressionnante des systèmes hyperboliques et de leur traitement numérique. Travailler à ses côtés est un très grand plaisir et une source permanente d'enrichissement. Je tiens à le remercier très chaleureusement pour tout ce qu'il a fait pour moi et pour la confiance qu'il m'accorde continuellement.

Je souhaite maintenant remercier vivement l'ensemble de mes collaborateurs pour tout ce qu'ils m'ont apporté, scientifiquement et humainement. Parmi eux je ne peux m'empêcher de citer l'ensemble des membres du groupe de travail CEA-LJLL avec qui j'ai passé tant de temps ces cinq dernières années : Annalisa, Edwige, Filipa, Frédéric le vrai et Frédéric le faux (on ne sait plus qui est qui), Jacques, Nicolas et Pierre-Arnaud. Je suis certain qu'ils n'imaginent pas à quel point leur amitié m'est précieuse. J'espère que notre collaboration se poursuivra encore longtemps. Je n'oublie pas les « petits derniers » Benjamin et Thomas.

Je suis très reconnaissant envers Annalisa Ambroso pour sa gentillesse, pour tout ce qu'elle a fait pour moi, et notamment pour avoir été à l'origine de ma délégation pour une année au laboratoire LETR du CEA Saclay. Cette nomination n'aurait pas été possible sans le soutien et l'investissement de Jacques Segré pour surmonter toutes les difficultés administratives. Un grand merci à tous les deux. Je remercie également Daniel Caruge et Eric Royer de m'avoir accueilli dans leurs locaux, et Pascal Omnès, Samuel Kokh et Stéphane Dellacherie d'avoir facilité mon intégration.

Je tiens à saluer les doctorants, les post-doctorants et les permanents de l'UFR de Mathématiques, du LJLL et du LETR. Grâce à eux, l'ambiance de travail a toujours été très agréable.

Enfin, mes remerciements les plus forts iront à Ludivine, Marie et Téo. Sans en avoir conscience, mes enfants ont joué un rôle déterminant dans l'aboutissement de ce travail. La patience, la tolérance et les encouragements permanents de mon épouse me sont toujours aussi précieux. Nous franchissons tous ensemble une étape de plus. L'aventure continue...

Table des matières

1	Introduction 1.1 Introduction générale 1.2 Liste des travaux	9 9 9
2	Approximation par relaxation 2.1 Approximation par relaxation des équations d'Euler 2.2 Schéma de relaxation et propriétés de stabilité 2.3 Implicitation du schéma de relaxation 2.4 Autres applications 2.4.1 Un modèle d'écoulement de gaz faiblement ionisés 2.4.2 Un modèle diphasique nonconservatif à 5 équations	13 14 17 20 24 24 26
3	Chocs nonclassiques et transitions de phase 3.1 L'approche Transport-Equilibre 3.2 L'approche par reconstruction discontinue 3.3 Application et variante de l'approche Transport-Equilibre 3.3.1 Un modèle de mouvement de foule 3.3.2 Une méthode de Godunov de type « sharp interface » 3.4 La dynamique des fluides de van der Waals	31 33 38 40 41 41 44
4	Trafic routier 4.1Approximation numérique du modèle de Colombo avec transitions de phase4.2Approximation numérique du modèle de Aw-Rascle	49 51 55
5	Couplage de modèles en thermohydraulique 5.1 Introduction générale 5.2 Travaux effectués 5.3 Travaux en cours et perspectives	59 59 62 63
	nnexe	69
A	Le système nonconservatif des équations de Navier-Stokes multi-pression A.1 Résolution du problème de Riemann A.2 Schéma numérique par projection nonlinéaire A.3 Schémas numériques par projection linéaire A.4 Algorithme implicite en temps	71 73 75 79 83

Chapitre 1

Introduction

1.1 Introduction générale

Ce mémoire présente mon activité de recherche depuis que je suis maître de conférences à l'université Paris Diderot-Paris 7 et rattaché au laboratoire Jacques-Louis Lions. Les travaux antérieurs ne sont pas abordés dans la partie principale de ce rapport excepté dans le chapitre 2 où, dans un souci de clarté et de cohérence, une méthode de relaxation utilisée dans ma thèse de doctorat est rappelée. L'annexe A propose une revue des résultats obtenus au cours de cette thèse sur le système des équations de Navier-Stokes multi-pression. Ainsi, ce rapport aborde les sujets principaux auxquels je me suis intéressé depuis mes débuts dans la recherche.

Mes travaux portent essentiellement sur l'étude numérique de systèmes d'équations aux dérivées partielles motivés par des applications physiques. Je me concentre le plus souvent sur la construction de schémas numériques vérifiant de « bonnes »propriétés mais lorsque cela s'y prête, j'aborde un spectre plus large allant de l'analyse mathématique (étude des solutions onde progressive, étude du problème de Riemann, étude de convergence) au calcul scientifique (construction d'algorithmes implicites, développement de codes multidimensionnels et simulations réalistes). Le chapitre 2 et l'annexe A en sont une illustration.

Plus précisément, le deuxième chapitre propose une étude complète d'une méthode d'approximation par relaxation des équations de la dynamique des gaz. Le troisième chapitre concerne l'approximation numérique des chocs nonclassiques et propose des stratégies nouvelles pour traiter cette problématique. Le quatrième chapitre s'intéresse à des modèles issus du trafic routier, avec ou sans changement de phase entre un milieu fluide et un milieu congestionné. Enfin, le cinquième chapitre porte sur le couplage de modèles en thermohydraulique au niveau d'une interface fixe. Il s'inscrit dans le cadre d'un contrat de collaboration entre le laboratoire J.L. Lions et le CEA Saclay.

1.2 Liste des travaux

Cette section donne la liste des travaux de l'auteur, séparés en trois catégories :

- les contributions principales qui regroupent les articles publiés, acceptés ou soumis, et les actes de congrès (proceedings) présentant des résultats nouveaux n'apparaissant dans aucun article publié, accepté ou soumis. La numérotation commence par la lettre A.
- les contributions « secondaires » qui regroupent les actes de congrès (proceedings) présentant des résultats apparaissant déjà dans un article publié, accepté ou soumis (et mentionné dans la catégorie ci-dessus). La numérotation commence par la lettre B.
- les autres contributions qui regroupent une note CRAS, deux travaux non publiés et un travail en préparation. La numérotation commence par la lettre C.

Les contributions [A11], [A13], [A14], [A15], [A16], [A17], [A24] sont extraites de la thèse de doctorat de l'auteur dont la référence est : [T1] Bilans d'entropie discrets dans l'approximation numérique des chocs non classiques. Application aux équations de Navier-Stokes multi-pression et à quelques systèmes visco-capillaires, Thèse de Doctorat de l'École Polytechnique, 2002.

Articles publiés ou acceptés

[A1] The interface coupling of the gas dynamics equations, à paraître dans Quaterly of Applied Mathematics, avec P.A. Raviart et N. Seguin

[A2] Transport-Equilibrium schemes for computing nonclassical shocks. Scalar conservation laws, à paraître dans Numerical Methods for Partial Differential Equations

[A3] Godunov scheme and sampling technique for computing phase transitions in traffic flow modeling, à paraître dans Interfaces and Free Boundaries, avec P. Goatin

[A4] Well-balanced time implicit formulation of relaxation schemes for the Euler equations, à paraître dans SIAM J. Sci. Comput., avec F. Coquel et C. Marmignon

[A5] Coupling of general Lagrangian systems, à paraître dans Mathematics of Computation, avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[A6] Relaxation methods and coupling procedure, à paraître dans International Journal for Numerical Methods in Fluids, avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[A7] Transport-Equilibrium schemes for computing contact discontinuities in traffic flow modeling, Commun. Math. Sci., No 3, pp 533-551 (2007), avec P. Goatin

[A8] Numerical approximation of a macroscopic model of pedestrian flows, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 29(2), pp 539-555 (2007)

[A9] The coupling of homogeneous models for two-phase flows, International Journal On Finite Volumes (IJFV), Vol. 4(1), pp 1-39 (2007), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[A10] Numerical capture of shock solutions of nonconservative hyperbolic systems via kinetic functions, Analysis and Simulation of Fluid Dynamics (in Advances in Mathematical Fluid Mechanics, Birkhauser series), pp. 45–68 (2006), avec F. Coquel

[A11] Euler equations with several independent pressure laws and entropy satisfying explicit projection schemes, Math. Models Methods Appl. Sci., Vol. 16(9), pp. 1469–1504 (2006), avec **F. Coquel**

[A12] Non-monotonic traveling waves in van der Waals fluids, Analysis and Applications, Vol. 3(4), pp 1-28 (2005), avec N. Bedjaoui, F. Coquel et P.G. LeFloch

[A13] Navier-Stokes equations with several independent pressure laws and explicit predictorcorrector schemes, Numerisch Math., Vol. 101(3), pp 451-478 (2005), avec F. Coquel

[A14] The Riemann problem for the multi-pressure Euler system, J. Hyp. Diff. Eq., Vol. 2(3), pp 745-782 (2005), avec F. Coquel

[A15] Computing undercompressive waves with the random choice scheme. Nonclassical shock waves, Interfaces and Free Boundaries, Vol. 5, pp 129-158 (2003), avec P.G. LeFloch

[A16] High-order entropy conservative schemes and kinetic relations for van der Waals fluids, J. Comput. Phys., Vol. 167, pp 1-23 (2001), avec P.G. LeFloch

[A17] A fully discrete scheme for diffusive-dispersive conservation laws, Numerisch Math., Vol. 89, pp 493-509 (2001), avec P.G. LeFloch

Articles soumis

[A18] Relaxation approximation of the Euler equations, avec J.F. Coulombel

[A19] A convergent and conservative scheme for nonclassical solutions based on kinetic relations.

I., Preprint du laboratoire J.L. Lions (2007), avec B. Boutin, F. Lagoutière et P.G. LeFloch [A20] Relaxation and numerical approximation of a two fluid two pressure model, soumis au congrès Finite volumes for complex applications, V, Aussois, Juin 2008 (un article long est sur le point d'être soumis), avec A. Ambroso, F. Coquel et T. Galié

Proceedings originaux

[A21] Interface model coupling via prescribed local flux balance, 18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Paper 07-3822 (2007), avec A. Ambroso, F. Coquel et T. Galié

[A22] Capturing infinitely sharp discrete shock profiles with the Godunov scheme, Proceedings of the Eleventh International Conference on Hyperbolic Problems. Theory, Numerics, Applications, S. Benzoni-Gavage and D. Serre (Eds), Springer, pp 363-370 (2008), avec F. Coquel

[A23] Development of a Relaxation Scheme for Weakly Ionised Gases, 36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Paper 05-0603, Reno (NV) (2005), avec O. Rouzaud, C. Marmignon et T. Soubrié

[A24] Numerical approximation of the Navier-Stokes equations with several independent specific entropies, Proceedings of the Ninth International Conference on Hyperbolic Problems. Theory, Numerics, Applications, T.Y. Hou and E. Tadmor (Eds), pp 407-418 (2003), avec F. Coquel

Proceedings

[B1] A sharp interface and fully conservative scheme for computing nonclassical shocks, Proceedings of the Enumath Conference, Graz (2007), avec B. Boutin, F. Lagoutière et P.G. LeFloch

[B2] Interface coupling of different models for multiphase flows, Proceedings of the Sixth International Congress on Industrial and Applied Mathematics. Zurich (2007), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[B3] Time implicit formulation of a Relaxation approximation of the Euler equations for real gases, 18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Paper 07-4335 (2007), avec F. Coquel et C. Marmignon

[B4] Transport-Equilibrium Schemes for Pedestrian Flows with Nonclassical Shocks, Traffic and Granular Flows'05, Springer, pp 347-356 (2007)

[B5] Computing phase transitions arising in traffic flow modeling, Proceedings of the Eleventh International Conference on Hyperbolic Problems. Theory, Numerics, Applications, S. Benzoni-Gavage and D. Serre (Eds), Springer, pp 559-566 (2008), avec P. Goatin

[B6] A relaxation method for the coupling of systems of conservation laws, Proceedings of the Eleventh International Conference on Hyperbolic Problems. Theory, Numerics, Applications, S. Benzoni-Gavage and D. Serre (Eds), Springer, pp 947-954 (2008), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[B7] Extension of interface coupling to general Lagrangian systems, Numerical Mathematics and Advanced Applications, Enumath 2005, Springer, pp 852-860 (2006), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[B8] Numerical coupling of two-phase flows, Recent progress in scientific computing, SCPDE 2005, Science press, pp 168-178 (2005), avec A. Ambroso, F. Coquel, T. Galié, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[B9] Homogeneous models with phase transition : coupling by finite volume methods, Finite Volumes for Complex Applications IV, Hermes Science, pp 483-492 (2005), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[B10] Couplage de deux systèmes de la dynamique des gaz, Actes du 17ème Congrès de Mécanique (CFM) (2005), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

[B11] Coupling of multiphase flow models, Proceedings of the Eleventh International Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH) (2005), avec A. Ambroso, F. Coquel, E. Godlewski, J.M. Hérard, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin

Autres contributions

[C1] Transport-Equilibrium Schemes for Computing Nonclassical Shocks, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342, 623-626 (2006)

[C2] Implicit Euler computations for steady and unsteady transonic flows, rapport interne du post-doctorat de l'auteur

[C3] Computations of Hypersonic Weakly Ionised Flows using a Relaxation Scheme, avec O. Rouzaud, C. Marmignon et T. Soubrié

[C4] Numerical contact discontinuities in single fluid and multifluid computations, en cours de rédaction, avec F. Coquel

Chapitre 2

Approximation par relaxation

Ce chapitre présente les travaux effectués par l'auteur (et ses collaborateurs) dans le cadre de l'approximation par relaxation du système des équations d'Euler (section 2.1), d'un modèle d'écoulement de gaz faiblement ionisés (section 2.4.1) et d'un modèle diphasique (section 2.4.2). L'objet de ces contributions ainsi qu'un lien vers les différents articles publiés sur ces sujets seront donnés au début de chaque section. Le cas échéant, des précisions supplémentaires seront apportées sur les résultats obtenus dans ces publications.

Cadre général. Rappelons tout d'abord que *les systèmes* d'équations aux dérivées partielles *avec relaxation* interviennent dans la modélisation de nombreux phénomènes physiques. Citons par exemple la théorie cinétique des gaz [22], les transitions de phase [84], les écoulements multiphasiques [56], ou encore le trafic routier [87]. Ils représentent un système physique *perturbé* et les mécanismes de retour vers un équilibre stable de ce système interviennent sous la forme d'un terme source pondéré par un coefficient λ dépendant éventuellement des quantités physiques mises en jeu. Le plus souvent, l'inverse λ^{-1} de ce coefficient est associé à un *temps de relaxation* vers l'état d'équilibre du système, et est supposé petit par rapport aux autres échelles de temps caractéristiques du système.

En une dimension d'espace et pour des solutions régulières, la forme générale d'un système avec relaxation est

$$\partial_t \mathbf{U} + \mathcal{A}(\mathbf{U})\partial_x \mathbf{U} = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{U}), \qquad (2.1)$$

où t > 0 est le temps et $x \in \mathbb{R}$ la variable d'espace. Le vecteur $\mathbf{U} = \mathbf{U}(x, t)$ représente l'inconnue du système et prend ses valeurs dans un ouvert Ω de \mathbb{R}^N avec N un entier naturel supposé strictement plus grand que 1. Les fonctions $\mathcal{A} : \Omega \to \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ et $\mathcal{Q} : \Omega \to \mathbb{R}^N$ sont supposées régulières et représentent respectivement la matrice de convection et le terme de relaxation du système (2.1). De nouveau, λ^{-1} représente un temps de relaxation et l'égalité $\mathcal{Q}(\mathbf{U}) = 0$ est caractéristique d'un état d'équilibre \mathbf{U} du système. Le plus souvent, la forme de \mathcal{Q} est telle qu'il existe une matrice de projection \mathcal{P} de taille $n \times N$ et de rang $n \in \mathbb{N}$ avec 0 < n < N, telle que

$$\mathcal{PQ}(\mathbf{U}) = 0, \ \forall \ \mathbf{U} \in \Omega, \tag{2.2}$$

et un opérateur Maxwellien $\mathcal{M}:\mathcal{P}\Omega\to\Omega$ tel que

$$\mathcal{Q}(\mathcal{M}(\mathbf{u})) = 0 \text{ et } \mathcal{P}\mathcal{M}(\mathbf{u}) = \mathbf{u}, \ \forall \ \mathbf{u} \in \mathcal{P}\Omega.$$
(2.3)

Notons que la définition de cet opérateur Maxwellien suppose l'existence et l'unicité d'un antécédent $\mathcal{M}(\mathbf{u})$ de \mathbf{u} par \mathcal{P} associé à un état d'équilibre du système ($\mathcal{Q}(\mathcal{M}(\mathbf{u})) = 0$).

D'un point de vue mathématique, la question principale liée aux systèmes avec relaxation de la forme (2.1) concerne l'étude de leur comportement asymptotique lorsque le paramètre de relaxation λ tend vers $+\infty$. Formellement, le passage à la limite lorsque $\lambda \to \infty$ dans (2.1) entraîne $\mathcal{Q}(\mathbf{U}) = 0$. La propriété (2.2) implique par ailleurs que les solutions du système (2.1) vérifient le système homogène (*i.e.* indépendant de λ) de *n* équations suivant :

$$\partial_t \mathcal{P} \mathbf{U} + \mathcal{P} \mathcal{A}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{U} = 0. \tag{2.4}$$

On s'attend donc à ce que les solutions du système (2.1) convergent lorsque λ tend vers $+\infty$ vers les solutions du système

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{P}\mathcal{A}(\mathcal{M}(\mathbf{u}))\partial_x \mathcal{M}(\mathbf{u}) = 0.$$
(2.5)

Les premiers travaux liés à la justification rigoureuse de ce passage à la limite formel sont ceux de Liu [70] dans le cadre des solutions régulières, et de Chen et Liu [24] et Chen, Levermore et Liu [23] dans le cadre des solutions faibles. Depuis, de nombreux auteurs se sont intéressés à ce vaste sujet. On trouve par exemple dans les travaux de Yong [88] une théorie sur les systèmes du premier ordre hyperboliques, quasi-linéaires et symétrisables. Plus généralement, nous renvoyons le lecteur à [74] pour une revue sur le sujet (voir aussi [15], [49]...).

Du point de vue de la terminologie, on dira que (2.5) est le système équilibre ou relaxé issu de (2.1), et que (2.1) est le système (ou modèle) de relaxation associé à (2.5).

Approximation par relaxation. Les travaux présentés dans ce chapitre sont motivés par l'approximation numérique des solutions faibles de certains systèmes d'équations aux dérivées partielles *homogènes.* Ils ne concernent donc pas directement l'étude des systèmes avec relaxation de la forme (2.1). Le cheminement des idées suit en réalité un sens opposé à celui du paragraphe précédent. Etant donné le système

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{a}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = 0, \tag{2.6}$$

avec $\mathbf{a}: \omega \to \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ une matrice de convection dépendant régulièrement de l'inconnue $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t)$ (ω est un ouvert de \mathbb{R}^n représentant l'espace des états admissibles), nous chercherons en effet à construire un système de relaxation de la forme (2.1) dont les solutions devront converger vers celles de (2.6) dans le régime asymptotique d'un grand paramètre de relaxation. L'objectif sera ensuite de proposer, sur la base de ce système de relaxation, des méthodes d'approximation numérique des solutions du système initial (2.6). On parlera alors de *méthodes (ou schémas) de relaxation*. De la qualité du modèle de relaxation dépendront la simplicité et les propriétés de précision, de stabilité et de robustesse des schémas obtenus.

Les schémas de relaxation ont été introduits dans le travail de Jin et Xin [57] qui met en évidence l'intérêt de ces méthodes dans le cadre d'un système de lois de conservation lorsque la partie convective du système de relaxation est linéaire. La littérature existante sur ce sujet est vaste puisque différents modèles de relaxation ont depuis été proposés pour des systèmes similaires ou différents. De manière non exhaustive, citons par exemple [30], [A13], [16], [5], [12], [10]... Dans tous ces travaux, l'idée générale reste la même et consiste à proposer un système de relaxation dont la partie convective est plus facile à résoudre que celle du système initial. Elle est linéaire dans [57] et le plus souvent quasilinéaire avec des champs caractéristiques linéairement dégénérés. Enfin, les méthodes numériques obtenues sont toutes basées sur une stratégie de décomposition (ou splitting) d'opérateurs, consistant à résoudre le système convectif simplifié dans un premier temps, et les termes source de relaxation dans un second temps.

2.1 Approximation par relaxation des équations d'Euler

Les résultats présentés dans cette section sont issus d'une collaboration avec J.F. Coulombel et ont été démontrés dans [A18]. L'objectif est d'introduire un modèle de relaxation pour les équations d'Euler 3×3 et de justifier théoriquement la convergence lorsque le paramètre de relaxation tend vers $+\infty$. Dans le cadre des solutions régulières, nous énoncerons un résultat de convergence local en temps en appliquant le résultat de Yong [88]. Dans le cadre des solutions discontinues, nous montrerons que l'ensemble des chocs admissibles des équations d'Euler admettent un profil régulier (*i.e.* une onde progressive) solution du système de relaxation proposé.

L'article [A18] propose également une illustration numérique des principaux résultats de convergence obtenus, ainsi qu'une étude similaire pour les équations d'Euler barotropes (2×2) . Les équations d'Euler et le système de relaxation. En une dimension d'espace, les équations d'Euler s'écrivent

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0\\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + p) = 0\\ \partial_t (\rho E) + \partial_x (\rho E u + p u) = 0, \end{cases}$$
(2.7)

où $\rho > 0$, u, p et $E = u^2/2 + \epsilon$ représentent respectivement la densité, la vitesse, la pression et l'énergie totale du fluide ($\epsilon > 0$ est l'énergie interne spécifique). L'équation d'état complète $\epsilon = \epsilon(\tau, S)$ du fluide est supposée connue, où $\tau = 1/\rho$ est le volume spécifique et S l'entropie spécifique. Nous supposerons que les hypothèses thermodynamiques classiques suivantes sont vérifiées (voir [72] et les références associées) :

(H1) ϵ est une fonction \mathcal{C}^{∞} sur $]0, +\infty[\times\mathbb{R}$ telle que $p = -\partial_{\tau}\epsilon > 0$ et $\theta = \partial_{S}\epsilon > 0$. De plus, les dérivées de ϵ vérifient :

$$\frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial\tau^{2}} > 0, \quad \frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial\tau\,\partial S} < 0, \quad \frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial\tau^{2}} \frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial S^{2}} > \left(\frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial\tau\,\partial S}\right)^{2}, \qquad (2.8)$$
$$-\frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial\tau\,\partial S} < \frac{2\theta}{p} \frac{\partial^{2}\epsilon}{\partial\tau^{2}}, \quad \frac{\partial^{3}\epsilon}{\partial\tau^{3}} < 0.$$

Sous l'hypothèse **(H1)**, on montre facilement que le système (2.7) est strictement hyperbolique avec deux champs extrêmes vraiment nonlinéaires associés aux valeurs propres réelles $u \pm c$, avec $c = \tau \sqrt{-\partial_{\tau} p}$ la vitesse du son, et un champ intermédiaire linéairement dégénéré associé à la valeur propre u. On montre également que la fonction $-\rho S$ est une entropie (mathématique) strictement convexe de (2.7). Les solutions faibles de (2.7) seront donc sélectionnées de manière classique par la validité de l'inégalité d'entropie

$$\partial_t \rho S + \partial_x (\rho S u) \ge 0. \tag{2.9}$$

Nous proposons le système de relaxation suivant pour (2.7):

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0\\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + \pi) = 0\\ \partial_t (\rho S) + \partial_x (\rho S u) = \lambda \rho (\tau - \mathcal{T})^2 (a^2 + \partial_\tau p(\mathcal{T}, S))\\ \partial_t (\rho \mathcal{T}) + \partial_x (\rho \mathcal{T} u) = \lambda \rho (\tau - \mathcal{T}) (\theta(\mathcal{T}, S) + (\mathcal{T} - \tau) \partial_S p(\mathcal{T}, S)). \end{cases}$$

$$(2.10)$$

Dans ce système, $\lambda > 0$ est le coefficient de relaxation, \mathcal{T} est associé à un relèvement du covolume $\tau = 1/\rho$, tandis que la nouvelle loi de pression π est définie par :

$$\pi = p(\mathcal{T}, S) + a^2 \left(\mathcal{T} - \tau\right). \tag{2.11}$$

Il s'agit donc d'une linéarisation de la pression d'équilibre $p(\tau, S)$ dans la direction de la première variable et au voisinage du relèvement \mathcal{T} . La valeur de la constante positive *a* sera précisée ultérieurement.

Enfin, l'énergie totale spécifique de relaxation Σ du système (2.10) est définie par

$$\Sigma = \frac{u^2}{2} + \epsilon(\mathcal{T}, S) + \frac{\pi^2 - p^2(\mathcal{T}, S)}{2 a^2}.$$
(2.12)

Elle coïncide avec l'énergie spécifique E du système initial lorsque $\mathcal{T} = \tau$, tandis que de simples manipulations des équations formant le système (2.10) et de la relation de fermeture (2.11) montrent qu'elle vérifie la loi de conservation attendue suivante :

$$\partial_t(\rho \Sigma) + \partial_x(\rho \Sigma u + \pi u) = 0.$$
(2.13)

Il est important de remarquer qu'à ce niveau de description, l'énergie totale Σ doit être comprise comme une fonction des inconnues principales ρ , ρu , ρS et ρT du système de relaxation (2.10). Dans toute la suite, Σ sera néanmoins considérée comme une inconnue principale de ce système, l'entropie S étant rejetée de manière naturelle en tant que fonction des nouvelles inconnues. Ceci n'est en réalité possible que sous l'hypothèse

$$\partial_S \Sigma = \theta(\mathcal{T}, S) + (\mathcal{T} - \tau) \partial_S p(\mathcal{T}, S) > 0$$
(2.14)

permettant l'inversion de Σ par rapport à S dans (2.12). La température θ étant par définition positive, on s'attend à ce que l'inégalité (2.14) soit satisfaite proche de la situation d'équilibre $\mathcal{T} = \tau$, ce qui suffira à notre propos.

En reprenant les notations introduites en début de chapitre pour le système avec relaxation, nous avons donc

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho \Sigma \\ \rho T \end{pmatrix}, \quad \mathcal{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho (\tau - T) \left(\theta(T, S) + (T - \tau) \partial_S p(T, S) \right) \end{pmatrix}$$

de sorte que la matrice \mathcal{P} et la Maxwellienne \mathcal{M} sont définies par

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{M}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \rho \times \tau = 1 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix},$$

sous l'hypothèse (2.14).

Notons enfin que l'entropie du système de relaxation ρS est dissipée dans (2.10) sous la condition sous-caractéristique de Whitham

$$a^2 + \partial_\tau p(\mathcal{T}, S) > 0. \tag{2.15}$$

Sous cette hypothèse, le système proposé est donc consistant au sens de Chen, Levermore et Liu [23].

Un résultat de convergence pour les solutions régulières. Le résultat principal de convergence des solutions régulières du système de relaxation vers celles des équations d'Euler lorsque λ tend vers $+\infty$ est le suivant :

Théorème 1 Soit $s \geq 2$, et $(\tau_0, u_0, S_0, \mathcal{T}_0) \in H^{s+2}(\mathbb{T})$ une donnée initiale prenant ses valeurs dans un sous-ensemble compact de $]0, +\infty[\times\mathbb{R}^2\times]0, +\infty[$, et telle que $\mathcal{T}_0 = \tau_0$ (on dit que la donnée initiale est à l'équilibre). Alors, il existe une constante a > 0 et un temps T > 0 tel que :

- pour tout $\lambda \geq 1$, il existe une unique solution régulière $(\tau^{\lambda}, u^{\lambda}, S^{\lambda}, \mathcal{T}^{\lambda}) \in C([0, T]; H^{s}(\mathbb{T}))$ de (2.10)-(2.13) coïncidant avec la donnée initiale $(\tau_{0}, u_{0}, S_{0}, \mathcal{T}_{0})$ à l'instant t = 0,
- le système des équations d'Euler (2.7)-(2.9) admet une unique solution régulière $(\overline{\tau}, \overline{u}, \overline{S}) \in C([0, T]; H^{s+2}(\mathbb{T}))$ coïncidant avec la donnée initiale (τ_0, u_0, S_0) à l'instant t = 0,
- $-(\tau^{\lambda}, u^{\lambda}, S^{\lambda}) \text{ converge vers } (\overline{\tau}, \overline{u}, \overline{S}) \text{ dans } C([0, T]; H^{s}(\mathbb{T})) \text{ lorsque } \lambda \text{ tend vers } +\infty, \text{ et } \mathcal{T}^{\lambda} \text{ converge vers } \overline{\tau} \text{ dans } C([0, T]; H^{s}(\mathbb{T})) \text{ lorsque } \lambda \text{ tend vers } +\infty.$

Il s'agit d'un résultat de convergence local en temps que nous avons établi en vérifiant les hypothèses du théorème général présenté dans [88]. Il repose sur la validité de propriétés structurelles du système de relaxation et sur l'hypothèse d'une donnée initiale *bien préparée* (c'est-à-dire vérifiant la condition d'équilibre $T_0 = \tau_0$). Nous renvoyons le lecteur à [A18] pour une discussion sur ce point et pour la démonstration du théorème.

Un résultat d'existence de profils de chocs entropiques. L'objectif est de montrer que les ondes de choc entropiques du système (2.7)-(2.9) admettent des profils réguliers associés au système de relaxation (2.10)-(2.13). Et ce quelque soit l'amplitude de la discontinuité. Il s'agit donc d'étendre le résultat d'existence général présenté dans [89] pour des chocs de faible amplitude.

Soient donc deux états constants $(\rho_{\ell}, (\rho u)_{\ell}, (\rho E)_{\ell})$ et $(\rho_r, (\rho u)_r, (\rho E)_r)$, et une vitesse de propagation σ tels que l'onde de choc :

$$(\rho, \rho u, \rho E) = \begin{cases} (\rho_{\ell}, (\rho u)_{\ell}, (\rho E)_{\ell}) & \text{si} \quad x < \sigma t, \\ (\rho_r, (\rho u)_r, (\rho E)_r) & \text{si} \quad x > \sigma t, \end{cases}$$
(2.16)

soit solution des équations d'Euler (2.7)-(2.9). Les relations de Rankine-Hugoniot

$$\begin{cases}
j := \rho_r (u_r - \sigma) = \rho_\ell (u_\ell - \sigma), \\
j^2 (\tau_r - \tau_\ell) + p(\tau_r, S_r) - p(\tau_\ell, S_\ell) = 0, \\
\epsilon(\tau_r, S_r) - \epsilon(\tau_\ell, S_\ell) + \frac{p(\tau_r, S_r) + p(\tau_\ell, S_\ell)}{2} (\tau_r - \tau_\ell) = 0,
\end{cases}$$
(2.17)

avec $j \neq 0$, et l'inégalité d'entropie :

$$j(S_r - S_\ell) \ge 0.$$
 (2.18)

sont donc satisfaites. D'après [72] et sous l'hypothèse (H1), les inégalités de Lax suivantes sont vérifiées :

$$0 < \frac{u_r - \sigma}{c_r} < 1 < \frac{u_\ell - \sigma}{c_\ell} \quad \text{si} \quad j > 0,$$

$$0 < \frac{\sigma - u_\ell}{c_\ell} < 1 < \frac{\sigma - u_r}{c_r} \quad \text{si} \quad j < 0,$$

$$(2.19)$$

avec $\tau_r < \tau_\ell$ et $S_r > S_\ell$ si j > 0, tandis que $\tau_r > \tau_\ell$ et $S_r < S_\ell$ si j < 0.

Un profil de choc pour (2.16) est une solution on de progressive régulière $(\rho, u, S, \mathcal{T})(\lambda(x - \sigma t))$ du système (2.10)-(2.13) satisfais ant les conditions asymptotiques suivantes :

$$\lim_{\xi \to +\infty} (\rho, u, S, \mathcal{T})(\xi) = (\rho_r, u_r, S_r, \tau_r), \quad \lim_{\xi \to -\infty} (\rho, u, S, \mathcal{T})(\xi) = (\rho_\ell, u_\ell, S_\ell, \tau_\ell).$$
(2.20)

La propriété d'existence d'un profil de choc pour (2.16) est résumée dans le théorème suivant :

Théorème 2 Supposons que l'hypothèse **(H1)** soit vérifiée et soit (2.16) une onde de choc des équations d'Euler vérifiant (2.17)-(2.18) (et donc (2.19)). Alors, pourvu que la constante a soit choisie telle que

$$a^{2} + \max_{[\tau_{r}, \tau_{\ell}] \times [S_{\ell}, S_{r}]} \partial_{\tau} p > 0, \quad a^{2} > j^{2} \, \frac{\max(\tau_{r}, \tau_{\ell})}{\min(\tau_{r}, \tau_{\ell})},$$
(2.21)

il existe un profil de choc $(\rho, u, S, T)(\lambda(x - \sigma t))$ solution de (2.10)-(2.13) et (2.20). De plus, les fonctions ρ, u, S et T sont monotones.

La démonstration de ce théorème est assez technique et est donnée dans [A18]. Elle repose sur une analyse détaillée du système dynamique résultant des équations satisfaites par le profil de choc, et sur le théorème de la variété centrale (voir [76] par exemple).

Pour conclure, notons que (2.20) implique la convergence de l'énergie du système relaxation Σ vers l'énergie des équations d'Euler E lorsque $\xi \to +\infty$.

2.2 Schéma de relaxation et propriétés de stabilité

Le paragraphe précédent nous a permis d'apporter une justification théorique du système de relaxation (2.10)-(2.13) pour approcher les solutions (régulières ou discontinues) de (2.7)-(2.9). Notre objectif est désormais d'utiliser ce système pour définir une méthode numérique stable, précise et peu coûteuse. Les résultats de cette section sont issus d'un travail en collaboration avec F. Coquel. Ils ont été obtenus dans un cadre plus général, celui des équations d'Euler multi-pression, et ont été publiés dans [A13]. Nous renvoyons le lecteur à l'annexe A pour plus de détails sur ce sujet.

Notations. Nous introduisons les notations condensées

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0 \tag{2.22}$$

avec $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho E u + p u)^t$ pour le système des équations d'Euler (2.7), et

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{U}) \tag{2.23}$$

avec $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = (\rho u, \rho u^2 + \pi, \rho \Sigma u + \pi u, \rho T u)^t$ pour le système de relaxation (2.10)-(2.13). On rappelle que les vecteurs \mathbf{u} , \mathbf{U} et \mathcal{Q} ont été définis précédemment, et que l'énergie totale de relaxation $\rho \Sigma$ est préférée à l'entropie ρS dans le vecteur des inconnues principales, ce qui est licite sous l'hypothèse (2.14).

Dans ce qui suit, Δt et Δx représentent les pas de temps et d'espace. Nous posons $\nu = \frac{\Delta t}{\Delta x}$ et définissons les interfaces $x_{j+1/2} = j\Delta x$ pour $j \in \mathbb{Z}$ et les instants intermédiaires $t^n = n\Delta t$ pour $n \in \mathbb{N}$. On se place dans le contexte des méthodes de volumes finis. La solution approchée $x \mapsto \mathbf{u}_{\nu}(x,t^n)$ de (2.22) est supposée constante à chaque instant t^n sur les cellules $\mathcal{C}_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$. Les valeurs correspondantes sont notées \mathbf{u}_j^n , de sorte que

$$\mathbf{u}_{\nu}(x,t^n) = \mathbf{u}_j^n$$
 pour tout $x \in \mathcal{C}_j, \ j \in \mathbb{Z}, \ n \in \mathbb{N}.$

En notant \mathbf{u}_0 la condition initiale nous posons

$$\mathbf{u}_{j}^{0} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{u}_{0}(x) dx, \ \forall j \in \mathbb{Z},$$

quand n = 0. Nous introduisons également la solution approchée $x \mapsto \mathbf{U}_{\nu}(x, t^n)$ constante par morceaux du système (2.23) en posant

$$\mathbf{U}_j^n = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_j^n \\ (\rho \mathcal{T})_j^n \end{pmatrix}.$$

La fonction $x \mapsto \mathbf{U}_{\nu}(x, t^0)$ est définie à l'équilibre, ce qui signifie $(\rho \mathcal{T})_j^0 = 1$.

Définition et propriétés de l'algorithme. Le schéma proposé est très classique et composé de deux pas. Le premier pas traite la partie convective de (2.23), tandis que le second prend en compte le terme source de relaxation dans le régime asymptotique $\lambda \to +\infty$.

Premier pas : évolution en temps $(t^n \to t^{n+1-})$ Dans ce premier pas, on commence par résoudre le problème de Cauchy suivant pour $t \in [0, \Delta t]$

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0, \ x \in \mathbb{R}, \\ \mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_{\nu}(x, t^n). \end{cases}$$
(2.24)

Il est facile de voir que le système (2.23) avec $\lambda = 0$ est strictement hyperbolique dès que a > 0et $\rho > 0$, avec les valeurs propres $\lambda_1(\mathbf{U}) = u - a\tau$, $\lambda_2(\mathbf{U}) = u$ et $\lambda_3(\mathbf{U}) = u + a\tau$. De plus, ces valeurs propres sont associées à des champs caractéristiques linéairement dégénérés. La conséquence agréable de cette propriété, et qui justifie à elle seule l'utilisation du modèle, est que la solution du problème de Riemann associé à (2.23) avec $\lambda = 0$ est explicitement connue. Elle est donnée dans le théorème 3 ci-dessous.

Puisque $x \mapsto \mathbf{U}_{\nu}(x, t^n)$ est constante par morceaux, la solution exacte du problème (2.24) est obtenue en juxtaposant les solutions des problèmes de Riemann posés à chaque interface $x_{j+1/2}$, pourvu que Δt soit tel que

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_{\mathbf{U}} \{ |\lambda_i(\mathbf{U})|, \ i = 1, ..., 3 \} \le \frac{1}{2}.$$

$$(2.25)$$

Plus précisément, en posant $x_j = (j + 1/2)\Delta x$ pour $j \in \mathbb{Z}$,

$$\mathbf{U}_{\nu}(x,t) = \mathbf{U}_{\mathbf{r}}(\frac{x - x_{j+1/2}}{t}; \mathbf{U}_{j}^{n}, \mathbf{U}_{j+1}^{n}) \text{ si } (x,t) \in [x_{j}, x_{j+1}] \times [0, \Delta t],$$
(2.26)

où $(x,t) \mapsto \mathbf{U}_{\mathbf{r}}(\frac{x}{t};\mathbf{U}_L,\mathbf{U}_R)$ est la solution du problème de Riemann

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0, \ x \in \mathbb{R}, \ t > 0, \\ \mathbf{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{if } x < 0, \\ \mathbf{U}_R & \text{if } x > 0. \end{cases}$$
(2.27)

Pour définir à l'instant $t^{n+1-} = t^n + \Delta t$ une solution approchée constante par morceaux sur chaque cellule C_j , nous proposons la procédure de moyenne habituelle

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1-} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{j}^{n+1-} \\ (\rho T)_{j}^{n+1-} \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{U}_{\nu}(x, \Delta t) dx, \ j \in \mathbb{Z}.$$
 (2.28)

En utilisant la formule de Green, on obtient

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1-} = \mathbf{U}_{j}^{n} - \nu(\mathbf{F}_{j+1/2}^{n} - \mathbf{F}_{j-1/2}^{n}) \quad \text{avec} \quad \mathbf{F}_{j+1/2}^{n} = \mathbf{F}(\mathbf{U}_{\mathbf{r}}(0^{+};\mathbf{U}_{j}^{n},\mathbf{U}_{j+1}^{n})).$$
(2.29)

La définition du paramètre $a = a_{j+1/2}$ intervenant dans la résolution des problèmes de Riemann posés à chaque interface $x_{j+1/2}$ n'a pas encore été précisée. En accord avec la condition de Whitham (2.15), le théorème 4 proposera une définition de ce paramètre permettant d'obtenir des propriétés de stabilité importantes.

Théorème 3

Soient \mathbf{U}_L et \mathbf{U}_R deux états constants tels que $\rho_L > 0$ et $\rho_R > 0$. Supposons que a > 0 vérifie la condition

$$\lambda_1(\mathbf{U}_L) = u_L - a\tau_L < u^* < \lambda_3(\mathbf{U}_R) = u_R + a\tau_R,$$

$$u^* = \frac{1}{2}(u_L + u_R) - \frac{1}{2a}(\pi_R - \pi_L).$$
 (2.30)

Alors, la solution autosimilaire $(x,t) \mapsto \mathbf{U}_{\mathbf{r}}(x/t;\mathbf{U}_L,\mathbf{U}_R)$ du problème de Riemann (2.27) est composée de quatre états constants séparés par trois discontinuités de contact :

$$\mathbf{U}_{\mathbf{r}}(\frac{x}{t};\mathbf{U}_{L},\mathbf{U}_{R}) = \begin{cases} \mathbf{U}_{L} & si \quad \frac{x}{t} < \lambda_{1}(\mathbf{U}_{L}), \\ \mathbf{U}_{L}^{*} & si \quad \lambda_{1}(\mathbf{U}_{L}) < \frac{x}{t} < \lambda_{2}(\mathbf{U}_{L}^{*}), \\ \mathbf{U}_{R}^{*} & si \quad \lambda_{2}(\mathbf{U}_{R}^{*}) < \frac{x}{t} < \lambda_{3}(\mathbf{U}_{R}), \\ \mathbf{U}_{R} & si \quad \lambda_{3}(\mathbf{U}_{R}) < \frac{x}{t}, \end{cases}$$

avec $\lambda_2(\mathbf{U}_L^*) = \lambda_2(\mathbf{U}_R^*) = u^*$. Les états intermédiaires \mathbf{U}_L^* et \mathbf{U}_R^* sont obtenus à partir des relations suivantes :

$$\begin{split} \tau_L^* &= \tau_L + (u^* - u_L)/a, \quad \tau_R^* = \tau_R - (u^* - u_R)/a, \\ u_L^* &= u_R^* = u^*, \\ \Sigma_L^* &= \Sigma_L + (\pi_L u_L - \pi^* u^*)/a, \quad \Sigma_R^* = \Sigma_R - (\pi_R u_R - \pi^* u^*)/a \\ \pi^* &= \frac{1}{2}(\pi_L + \pi_R) - \frac{a}{2}(u_R - u_L), \\ \mathcal{T}_L^* &= \mathcal{T}_L, \quad \mathcal{T}_R^* = \mathcal{T}_R. \end{split}$$

De plus, nous avons $\rho_L^* = 1/\tau_L^* > 0$ et $\rho_R^* = 1/\tau_R^* > 0$.

Deuxième pas : relaxation $(t^{n+1-} \to t^{n+1})$ Dans ce deuxième pas, on propose de résoudre à l'instant $t^n + \Delta t$ le problème

$$\partial_t \mathbf{U} = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{U}), \ x \in \mathbb{R}, \tag{2.31}$$

dans le régime asymptotique $\lambda \to +\infty$. Nous choisissons la fonction $x \mapsto \mathbf{U}_{\nu}(x, t^{n+1-})$ obtenue à l'issue du pas précédent comme condition initiale :

$$\mathbf{U}_{\nu}(x, t^{n+1-}) = \mathbf{U}_{j}^{n+1-}$$
 pour tout $x \in \mathcal{C}_{j}, \ j \in \mathbb{Z}.$

En utilisant la définition de \mathcal{Q} , il s'agit donc de poser

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{j}^{n+1} \\ (\rho T)_{j}^{n+1} \end{pmatrix},$$
$$(\rho T)_{j}^{n+1} = 1.$$
(2.32)

avec $\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^{n+1-}$ et

Ceci achève la description du schéma de relaxation.

Avec F. Coquel, nous avons montré dans [A13] (dans le cadre plus général des équations d'Euler multi-pression) que cet algorithme vérifiait les propriétés de stabilité et de précision suivantes (voir également [16], [17]).

Théorème 4

Supposons que la constante $a := a_{j+1/2}$ choisie localement à chaque interface $x_{j+1/2}$ et le couple $(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) := (\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n)$ satisfont pour tout $j \in \mathbb{Z}$ la condition (2.30) et les conditions de Whitham

$$\frac{\partial p}{\partial \tau}(\tau_L, S_L) + a^2 > 0, \quad \frac{\partial p}{\partial \tau}(\tau_L^*, S_L) + a^2 > 0, \\ \frac{\partial p}{\partial \tau}(\tau_R, S_R) + a^2 > 0, \quad \frac{\partial p}{\partial \tau}(\tau_R^*, S_R) + a^2 > 0,$$
(2.33)

où nous avons utilisé les définitions du théorème 3 pour $\tau_L^* = 1/\rho_L^*$ et $\tau_R^* = 1/\rho_R^*$. Alors, sous la condition CFL (2.25) et en utilisant des notations claires, le schéma de relaxation proposé satisfait les propriétés suivantes :

- (i) Propriétés de stabilité :
 - Stabilité L^1 : $\rho_j^{n+1} > 0$, $\epsilon_j^{n+1} > 0$ pour tout $j \in \mathbb{Z}$.
 - Inégalité d'entropie :

$$(\rho S)_{j}^{n+1} \leq (\rho S)_{j}^{n} - \nu \Big((\rho Su)(0^{+}; \mathbf{U}_{j}^{n}, \mathbf{U}_{j+1}^{n}) - (\rho Su)(0^{+}; \mathbf{U}_{j-1}^{n}, \mathbf{U}_{j}^{n}) \Big), \quad j \in \mathbb{Z}.$$

• Principes du maximum :

$$\min(S_{j-1}^n, S_j^n, S_{j+1}^n) \le S_j^{n+1} \le \max(S_{j-1}^n, S_j^n, S_{j+1}^n), \quad j \in \mathbb{Z}.$$

(ii) Propriété de précision :

• Les discontinuités de contact stationnaires du système (2.22) sont exactement résolues.

Illustration numérique. Nous proposons d'illustrer la validité du schéma proposé. Nous utilisons pour cela une loi de pression associée à un gaz parfait polytropique, de coefficient adiabatique $\gamma = 1.4$, et considérons comme donnée initiale celle du tube à choc de Sod. La figure 2.1 compare les solutions numériques obtenues pour différents maillages. L'examen des résultats montre que les solutions numériques sont en très bon accord avec la solution exacte attendue.

Nous renvoyons le lecteur à [T1], [A13] pour davantage d'illustrations numériques.

2.3 Implicitation du schéma de relaxation

Les travaux présentés dans cette section ont été menés en collaboration avec F. Coquel et C. Marmignon. Initiés dans [T1], ils ont fait l'objet d'une présentation au congrès CFD de l'AIAA en juin 2007 [B3] et d'un article plus long [A4]. Nous gardons ici une présentation monodimensionnelle mais les articles [B3], [A4] considèrent les équations d'Euler en plusieurs dimensions d'espace. Le lecteur intéressé trouvera donc dans [B3], [A4] une extension multidimensionnelle des algorithmes proposés.

Le schéma de relaxation *explicite en temps* s'est avéré efficace pour approcher les solutions du système (2.7)-(2.9). Nous nous intéressons à la construction d'une formulation implicite en temps de ce schéma. Ce travail est motivé par le calcul de solutions stationnaires multidimensionnelles, problématique qui intéresse particulièrement l'ONERA. Nous adopterons une stratégie de marche en temps qui consiste à résoudre les équations instationnaires (2.7)-(2.9) dans le régime asymptotique $t \to +\infty$. Dans ce contexte, l'utilisation de schémas implicites en temps est préconisée afin d'éviter des conditions trop restrictives sur la taille du pas de temps Δt .

Deux implicitations sont proposées. Bien que *naturelle*, la première implicitation ne permet pas d'obtenir au niveau discret des solutions parfaitement stationnaires. Nous expliquerons théoriquement et illustrerons numériquement le défaut de convergence. Sur la base de ces explications, nous



FIG. 2.1 – Densité (en haut et à gauche) - Vitesse (en haut et à droite) - Pression (en bas)

proposerons une méthode implicite en temps *équilibre* (elle respectera l'équilibre attendu entre la partie convective et les termes source du modèle de relaxation) qui s'avérera très efficace. A des fins de linéarisation, la définition de ces deux implicitations utilisera le résultat d'équivalence suivant entre la fonction flux numérique $\mathbf{F}_{j+1/2}^n$ proposée en (2.29) et la fonction flux numérique de la méthode de Roe.

Théorème 5 Soient \mathbf{U}_L et \mathbf{U}_R deux états constants tels que $\rho_L > 0$ et $\rho_R > 0$. Alors, en utilisant des notations habituelles, il existe une linéarisation de Roe $\mathbf{A}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$ du système $\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0$ satisfaisant les propriétés

 $\begin{array}{ll} (i) & \mathbf{A}(\mathbf{U},\mathbf{U}) = \nabla_{\mathbf{U}}\mathbf{F}(\mathbf{U}), \\ (ii) & \mathbf{A}(\mathbf{U}_L,\mathbf{U}_R) \ (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L) = \mathbf{F}(\mathbf{U}_R) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_L), \\ (iii) & \mathbf{A}(\mathbf{U}_L,\mathbf{U}_R) & est \ \mathbb{R}\text{-}diagonalisable, \end{array}$

et telle que

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}_{\mathbf{r}}(0^{\pm};\mathbf{U}_{L},\mathbf{U}_{R})) = \frac{1}{2} \Big(\mathbf{F}(\mathbf{U}_{L}) + \mathbf{F}(\mathbf{U}_{R}) - |\mathbf{A}(\mathbf{U}_{L},\mathbf{U}_{R})| (\mathbf{U}_{R} - \mathbf{U}_{L}) \Big).$$
(2.34)

Notations. Les implicitations proposées dans [B3], [A4] sont basées sur une écriture différente du système de relaxation (2.10)- $(2.13)^1$. Le principe de construction pourrait être compris à l'aide de (2.10)-(2.13) mais nous décidons dans un souci de rigueur d'adopter cette nouvelle écriture. Elle consiste à remplacer la loi d'évolution sur ρT par une équation équivalente sur $\rho \Pi$. Cette transformation est licite sous la condition de Whitham (2.15) permettant d'inverser T et Π dans (2.11). A une modification près des termes de relaxation, nous sommes donc amenés à considérer

¹Cette écriture ne modifie pas la forme explicite du schéma et ses propriétés (théorèmes 3, 4 et 5).

le modèle

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho \, u) = 0\\ \partial_t (\rho \, u) + \partial_x (\rho \, u^2 + \pi) = 0\\ \partial_t (\rho \, \Sigma) + \partial_x (\rho \, \Sigma \, u + \pi u) = 0\\ \partial_t (\rho \, \pi) + \partial_x (\rho \, \pi \, u + a^2 u) = \lambda \, \rho \, (p - \pi), \end{cases}$$

$$(2.35)$$

et les notations

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho \Sigma \\ \rho \pi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + \pi \\ \rho \Sigma u + \pi u \\ \rho \pi u + a^2 u \end{pmatrix}, \quad \mathcal{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho (p - \pi) \end{pmatrix}.$$

La Maxwellienne associée de ce modèle s'écrit

$$\mathcal{M}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \rho \times \Pi = \rho p \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix},$$

de sorte que la relation d'équilibre (2.32) dans le deuxième pas de l'algorithme doit être remplacée par la relation équivalente

$$(\rho\Pi)_{j}^{n+1} = (\rho p)_{j}^{n+1}$$

Avec un léger abus dans les notations, on écrira sous l'hypothèse **(H1)** (voir [46] pour plus de détails)

$$(\rho p)_j^{n+1} = \rho_j^{n+1} p(\rho_j^{n+1}, (\rho \epsilon)_j^{n+1}).$$

Une première méthode de relaxation implicite en temps. Nous proposons dans ce paragraphe une première implicitation naturelle de la méthode de relaxation utilisée dans la section 2.2. Afin de réduire la complexité de l'algorithme et puisque notre intérêt concerne le calcul de solutions stationnaires, cette méthode sera linéarisée grâce à l'existence de la matrice de Roe $\mathbf{A}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$ (voir [73], [53]). Plus précisément, les deux pas de la section 2.2 s'écrivent maintenant :

Premier pas : évolution en temps $(t^n \to t^{n+1-})$ Dans ce premier pas, la formule de mise à jour (2.29) est remplacée par

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1-} = \mathbf{U}_{j}^{n} - \nu(\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1-} - \mathbf{F}_{j-1/2}^{n+1-}), \quad j \in \mathbb{Z},$$
(2.36)

où, grâce à l'équivalence (2.34) et en utilisant des notations classiques, nous avons posé :

$$\begin{split} \mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1-} &= \mathbf{F}_{j+1/2}^n &+ \quad \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{U}} \ \mathbf{F}(\mathbf{U}_j^n) + |\mathcal{A}(\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n)|) \ \delta(\mathbf{U}_j^n) \\ &+ \quad \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{U}} \ \mathbf{F}(\mathbf{U}_{j+1}^n) - |\mathcal{A}(\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n)|) \ \delta(\mathbf{U}_{j+1}^n), \end{split}$$

avec

$$\delta(\mathbf{U}_i^n) = \mathbf{U}_i^{n+1-} - \mathbf{U}_i^n.$$

On montre facilement que la résolution de (2.36) revient à résolute un système linéaire en l'inconnue $\delta(\mathbf{U}_j^n)_{j\in\mathbb{Z}}$ avec une matrice tridiagonale par blocs 4×4 . Nous renvoyons le lecteur à [B3], [A4] pour plus de détails sur ce point et sur les composantes non nulles d'une ligne de la matrice associée à ce système.

Deuxième pas : relaxation $(t^{n+1-} \rightarrow t^{n+1})$

Le deuxième pas reste inchangé. Ainsi, à partir de la solution \mathbf{U}_{j}^{n+1-} du système linéaire (2.36), nous posons $\mathbf{u}_{j}^{n+1} = \mathbf{u}_{j}^{n+1-}$, *i.e.*

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n+1-}, \ (\rho u)_j^{n+1} = (\rho u)_j^{n+1-}, \ (\rho E)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1-},$$

et la relation d'équilibre

$$(\rho\pi)_{j}^{n+1} = \rho_{j}^{n+1} p(\rho_{j}^{n+1}, (\rho\epsilon)_{j}^{n+1}).$$

Ceci conclut la description de la première formulation implicite en temps.

Bien que naturelle et robuste, il se trouve que cette première méthode ne converge pas en temps long vers des solutions parfaitement stationnaires. Ce défaut de convergence sera illustré numériquement et peut s'expliquer comme suit. Les deux pas de la méthode reposent sur une résolution de l'équation $\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0$, et sur celle de l'équation différentielle ordinaire $\partial_t \mathbf{U} = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{U})$ dans le régime $\lambda \to \infty$. Il est ainsi facile d'admettre, au moins formellement, que la convergence vers une solution stationnaire \mathbf{U} exigerait de celle-ci la satisfaction de

$$\partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{Q}(\mathbf{U}) = 0$$

Or en vertu du lemme suivant (voir [A4] pour une démonstration), et de la condition de Whitham (2.15), ces deux équations ne peuvent être simultanément vérifiées pour *toute* solution stationnaire **U**. Ceci explique donc théoriquement le défaut de convergence observé numériquement.

Lemme 1 Soit U une fonction de la variable d'espace x telle que

$$\partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0 \ et \ \mathcal{Q}(\mathbf{U}) = 0.$$

Alors U vérifie aussi

$$(a^2 - \rho^2 c^2) \ \partial_x u = 0,$$

où c est la vitesse du son introduite dans la section 2.1.

Une méthode de relaxation implicite en temps équilibre. A la lumière des explications données ci-dessus, une implicitation raisonnable de la méthode de relaxation se doit de respecter parfaitement la relation d'équilibre $\partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{U})$ afin d'éviter la validité de l'égalité $\partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0$. Celle-ci est en effet incompatible avec la relation $\mathcal{Q}(\mathbf{U}) = 0$ imposée à chaque pas de temps dans le deuxième pas de l'algorithme. Pour atteindre cet objectif, nous proposons une modification du premier pas. Il reposera désormais sur une résolution implicite en temps linéarisée de l'équation $\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{U})$, dans le régime $\lambda \to \infty$.

Premier pas : évolution en temps $(t^n \rightarrow t^{n+1-})$

En remplacement de (2.36), nous proposons de résoudre dans le régime asymptotique $\lambda \to \infty$ le problème suivant :

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1-} = \mathbf{U}_{j}^{n} - \nu(\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1-} - \mathbf{F}_{j-1/2}^{n+1-}) + \lambda \overline{\mathcal{Q}}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-}), \quad j \in \mathbb{Z},$$

avec $\overline{\mathcal{Q}}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-}) = \mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n}) + \nabla_{\mathbf{U}} \mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n}) \delta(\mathbf{U}_{j}^{n}).$ (2.37)

Les fonctions flux numériques $\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1-}$ gardent la même définition que précédemment, et la contribution $\overline{\mathcal{Q}}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-})$ représente une linéarisation de $\mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-})$. Le système reste donc linéaire. D'après la forme du terme source \mathcal{Q} , seule la dernière équation de (2.36) est en réalité modifiée. En faisant tendre λ vers $+\infty$ dans (2.37), on obtient $\overline{\mathcal{Q}}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-}) = 0$. Cette égalité est importante puisqu'elle permet d'obtenir explicitement la valeur de $(\rho \pi)_{j}^{n+1-}$ à l'instant t^{n+1-} , et donc de se ramener à la résolution d'un système linéaire dont la matrice est tridiagonale par blocs 3×3 . Il n'y a donc plus de surcoût lié à la variable de relaxation $(\rho \pi)$ dans l'algorithme. Nous renvoyons le lecteur à [B3], [A4] pour plus de détails sur ce point et sur les composantes non nulles d'une ligne de la matrice associée à ce système.

Deuxième pas : relaxation $(t^{n+1-} \rightarrow t^{n+1})$

La solution \mathbf{U}_{j}^{n+1-} obtenue à l'issue du pas précédent ne vérifie qu'une condition *linéarisée* d'équilibre, à savoir $\overline{\mathcal{Q}}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-}) = 0$. Afin de forcer la relation d'équilibre $\mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n+1}) = 0$ de la solution à la fin de chaque pas de temps, nous proposons de garder inchangé le deuxième pas de la première méthode de relaxation implicite en temps proposée ci-dessus. Illustration numérique. Nous considérons le cas d'un écoulement stationnaire bidimensionnel supersonique à l'infini amont, et arrivant sur un cylindre simulant l'avant-corps d'un véhicule de rentrée dans l'atmosphère. L'interaction d'un tel écoulement avec le cylindre est à l'origine de la formation d'un choc fort détaché. La loi de pression considérée est celle d'un gaz parfait polytropique dont le coefficient adiabatique est $\gamma = 1.2$. Les conditions à l'infini amont sont associées à un nombre de Mach M_{∞} égal à 10 et à une pression statique $p_{\infty} = 40Pa$. Le domaine de calcul consiste en un maillage curviligne composé de 60×48 cellules.

La figure 2.2 (gauche) montre l'historique de la norme L^2 de la dérivée en temps de la densité avec la première implicitation. Pour obtenir cette courbe, environ 15000 pas de temps ont été effectués en prenant un nombre CFL égal à 25 durant les 7000 premières itérations, et à 5 pendant les suivantes. L'utilisation de ces petites valeurs montre que le plateau observé sur la courbe de convergence est caractéristique d'une méthode ne pouvant pas converger vers une solution stationnaire (et non d'un problème de stabilité de la méthode). Au contraire, nous observons que la deuxième implicitation converge vers une solution parfaitement stationnaire. Comme cela est attendu, la convergence se fait plus ou moins rapidement selon que le nombre CFL utilisé (25 ou 200) est grand ou non. La figure 2.2 (droite) représente les iso-valeurs de la densité pour la solution stationnaire obtenue avec un nombre CFL égal à 200.



FIG. 2.2 – Norme L^2 de la dérivée discrète en temps de la densité en fonction du nombre d'itérations effectuées (gauche) - Iso-valeurs de la densité pour la solution stationnaire obtenue avec un nombre CFL égal à 200 (droite)

2.4 Autres applications

Cette section décrit très brièvement l'utilisation de la méthode de relaxation pour d'autres systèmes. Le cadre de la section 2.4.1 est celui des gaz faiblement ionisés. Dans la section 2.4.2, un modèle diphasique nonconservatif est considéré.

2.4.1 Un modèle d'écoulement de gaz faiblement ionisés

Ce travail a été réalisé dans le cadre de la thèse de T. Soubrié (financement ONERA), en collaboration avec C. Marmignon et O. Rouzaud. Nous renvoyons le lecteur aux contributions [A23], [C3] pour plus de détails (voir aussi [83]).

Introduction et modélisation. On s'intéresse à l'approximation des solutions d'un système

gouvernant l'évolution d'un mélange de gaz réactifs ionisés en déséquilibre thermique. De tels plasmas sont étudiés dans le cadre d'écoulements *hypersoniques* autour de véhicules de rentrée dans l'atmosphère. Les températures associées sont suffisamment élevées pour induire une excitation de vibration, la dissociation de molécules diatomiques et une ionisation.

Plus précisément, on considère un mélange de gaz composé d'électrons et de n espèces lourdes, un nombre ni, $1 \le ni \le n$ d'entre elles étant ionisées. Les espèces lourdes sont décrites avec la même vitesse u, tandis que pour une meilleure description de l'écoulement, nous définissons

- une température T pour les modes de translation-rotation des espèces lourdes en équilibre thermique,

- des températures de vibration $T_{v,j}$, $j \in \{1, ..., n\nu\}$ et des énergies de vibration $e_{v,j}$, $j \in \{1, ..., n\nu\}$ pour les $n\nu$, $1 \le n\nu \le n$, espèces lourdes en déséquilibre thermique,

- et une température de translation T_e pour les électrons, distincte de T.

Le modèle considéré est un système convectif (les termes diffusifs et les termes source ne sont pas pris en considération dans ce travail) *conservatif* proposé par Coquel et Marmignon dans [31], [32], sous l'hypothèse d'une viscosité et d'une conductivité des électrons négligeables. Il s'écrit

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho_i + \partial_x (\rho_i u) &= 0, \quad i = 1, ..., n, \\
\partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + p + p_e) &= 0, \\
\partial_t (\rho E) + \partial_x (\rho E + p + p_e) u &= 0, \\
\partial_t (\rho S_e) + \partial_x (\rho S_e u) &= 0, \\
\partial_t (\rho_i e_{\nu, j}) + \partial_x (\rho_j e_{\nu, j} u) &= 0, \quad j = 1, ..., n\nu,
\end{aligned}$$
(2.38)

où ρ_i , ρ , p, p_e , ρE et ρS_e représentent la densité de la *i*-ième espèce lourde, la densité du mélange, la pression des espèces lourdes, la pression du gaz d'électrons, l'énergie totale du mélange et l'entropie du gaz d'électrons. Les n premières équations sont associées à la conservation de la masse de chaque espèce lourde. Les deux suivantes gouvernent la conservation de la quantité de mouvement ρu et de l'énergie totale ρE du mélange. Enfin, les $n\nu$ dernières équations font référence à la conservation des énergies de vibration des $n\nu$ espèces moléculaires en déséquilibre tandis que la précédente traduit la conservation de l'entropie ρS_e du gaz d'électrons. Les relations de fermeture de ce système sont précisées dans [A23], [C3].

Du point de vue numérique, Coquel et Marmignon proposent dans [31], [32] d'approcher les solutions faibles de (2.38) par l'intermédiaire d'un schéma de Roe. Celui-ci est basé sur la construction d'une linéarisation *exacte* de type Roe, tenant compte de la présence dans les équations des deux pressions relatives aux espèces lourdes et au gaz d'électrons. Dans [A23], [C3], nous proposons d'approcher numériquement les solutions faibles de (2.38) par l'intermédiaire d'une méthode de relaxation facilitant par construction le traitement des deux pressions p et p_e .

Le modèle de relaxation. Le modèle de relaxation proposé s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_i + \partial_x (\rho_i u) &= 0, \quad i = 1, ..., n, \\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + \pi) &= 0, \\ \partial_t (\rho E) + \partial_x (\rho E + \pi) u &= 0, \\ \partial_t (\rho S_e) + \partial_x (\rho S_e u) &= 0, \\ \partial_t (\rho_j e_{\nu,j}) + \partial_x (\rho_j e_{\nu,j} u) &= 0, \quad j = 1, ..., n\nu, \\ \partial_t (\rho \pi) + \partial_x (\rho \pi + a^2) u &= \lambda \rho (p + p_e - \pi). \end{aligned}$$

On remarque que seules les nonlinéarités liées à la pression totale $p + p_e$ ont été relaxées. On note également que la variable de relaxation associée π tend vers $p + p_e$ (au moins formellement) lorsque le paramètre λ tend vers l'infini dans la dernière équation de (2.39).

La procédure numérique associée à ce système est tout fait semblable à celle proposée dans la section 2.2. Elle est composée d'un premier pas résolvant la partie convective de (2.39), et d'un second pas tenant compte du terme source de relaxation dans le régime $\lambda \to +\infty$. Nous renvoyons le lecteur à [A23], [C3] pour plus de détails.

Simulations numériques. L'évaluation de la méthode de relaxation proposée a été réalisée sur

plusieurs tests. Nous présentons un premier calcul 1D réalisé pour une donnée initiale de type Riemann (tube à choc). Les résultats obtenus sont comparés à ceux de la méthode de Godunov exacte et de la méthode de Roe proposée par Coquel et Marmignon. Ensuite, nous considérons un problème 2D correspondant à l'expérience de vol RAM-C II. Les résultats obtenus sont comparés à ceux de la méthode de Roe. D'autres simulations sont proposées dans [A23], [C3].

Configuration 1D: tube à choc. Le mélange de gaz considéré contient trois espèces, à savoir des atomes d'azote N, des ions N⁺ et des électrons. La description des états gauche et droit de la donnée initiale est donnée dans [A23], [C3] et correspond à celle du test A. Les résultats sont présentés sur la figure 2.3 montrant la pression des espèces lourdes, la pression du gaz d'électrons et la pression totale. Nous obtenons un très bon accord des résultats fournis par les différentes méthodes.

Configuration 2D : RAM-C II. Le projet RAM-C a été lancé dans les années soixante et fournit des données en vol de rentrée dans l'atmosphère terrestre. Les données du problème sont précisées dans [C3]. La figure 2.4 montre les profils de température et de pression des espèces lourdes et des électrons le long de la ligne d'arrêt. Nous observons un très bon accord entre les deux méthodes.



FIG. 2.3 – Pression des espèces lourdes (en haut à gauche), des électrons (en haut à droite) et totale (en bas)

2.4.2 Un modèle diphasique nonconservatif à 5 équations

Ce travail est encore *en cours de réalisation* dans le cadre de la thèse de T. Galié, en collaboration avec A. Ambroso et F. Coquel. Il est motivé par l'approximation des solutions d'un système modélisant des écoulements compressibles eau-vapeur. Une première publication [A20] a été sou-



FIG. 2.4 – Températures (à gauche) et pressions (à droite) des espèces lourdes et du gaz d'électrons le long de la ligne d'arrêt

mise pour le congrès Finite Volumes for Complex Applications qui aura lieu en juin 2008 à Aussois. Un article long est sur le point d'être soumis.

Introduction et modélisation. Le domaine des écoulements diphasiques dispose d'une littérature très riche du point de vue de la modélisation. Chaque modèle peut être associé à des hypothèses d'écoulement particulières et/ou présenter certaines propriétés agréables du point de vue mathématique. Le modèle considéré ici est basé sur une approche à deux vitesses et deux pressions (une par phase, liquide ou vapeur). Il consiste en une forme réduite du modèle de Baer-Nunziato, dans la mesure où les termes source d'échange entre les phases ne sont pas pris en compte dans ce paragraphe.

En une dimension d'espace et sous l'hypothèse d'une loi d'état barotrope pour chaque phase (la densité ne dépend que de la pression), le système convectif s'écrit sous la forme condensée suivante :

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) + \mathbf{c}(\mathbf{u}) \partial_x \mathbf{u} = 0, \ t > 0, \ x \in \mathbb{R}.$$
(2.39)

Le vecteur des inconnues **u** est défini par

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} \alpha_2 \rho_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \end{pmatrix},$$

et α_1 , ρ_1 et u_1 (respectivement $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$, ρ_2 et u_2) représentent le taux de vide, la densité et la vitesse de la phase 1 (respectivement de la phase 2). L'espace des états associé à ce vecteur est

$$\omega = \{ (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_1 \rho_1 u_1, \alpha_2 \rho_2, \alpha_2 \rho_2 u_2)^t \in \mathbb{R}^5 \text{ tel que} \\ \alpha_k > 0 \text{ et } \rho_k > 0 \text{ pour } k = 1, 2, \ \alpha_1 + \alpha_2 = 1 \}.$$

Les fonctions $\mathbf{f}: \omega \to \mathbb{R}^5$ et $\mathbf{c}: \omega \to \mathbb{R}^{5 \times 5}$ sont telles que

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 + \alpha_1 p_1(\rho_1) \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2^2 + \alpha_2 p_2(\rho_2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_I \partial_x \alpha_1 \\ 0 \\ -p_I \partial_x \alpha_1 \\ 0 \\ p_I \partial_x \alpha_1 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

La première équation du système (2.39) est une équation de transport à la vitesse interfaciale u_I du taux de vide. Les suivantes sont des lois d'évolution pour les phases 1 et 2 similaires aux équations

d'Euler pour chaque phase. La différence réside dans la présence de contributions non nulles dans le terme nonconservatif $\mathbf{c}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$ de couplage entre les phases. Ils mettent en relation la pression interfaciale p_I et le taux de vide α_1 . Notons que le terme $\mathbf{c}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$ est vraiment nonconservatif au sens où il empêche l'obtention d'une formulation conservative des équations (2.39).

D'un point de vue théorique, on montre que sous des hypothèses particulières de modélisation des grandeurs u_I et p_I , les produits nonconservatifs peuvent être définis sans aucune ambiguïté (voir [42]). D'un point de vue numérique, une attention particulière doit cependant être portée à la discrétisation de ces termes nonconservatifs. Enfin, le système (2.39) est de nature hyperbolique résonante (voir [A20] et les références proposées), ce qui rend très difficile la résolution du problème de Riemann correspondant.

Le modèle de relaxation. Nous proposons d'approcher les solutions du système (2.39) par une méthode de relaxation. L'objectif de ce paragraphe est de présenter le système de relaxation correspondant. La philosophie est identique à celle des sections 2.1 et 2.4.1. Nous partons du principe qu'une des difficultés majeures dans la résolution du système (2.39) est liée aux nonlinéarités des lois de pression $\rho_k \mapsto p_k(\rho_k)$. Nous introduisons alors un système étendu avec termes source faisant apparaître deux quantités scalaires nouvelles π_k associées aux pressions p_k . L'objectif est d'aboutir à un système convectif quasilinéaire et de rejeter les nonlinéarités principales de (2.39) dans les termes source. Bien entendu, cette procédure de relaxation suppose que les solutions du système (2.39) sont les limites des solutions du système étendu dans la limite asymptotique d'un coefficient de relaxation infini (voir section 2.1). Nous proposons l'approximation suivante du système (2.39) :

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{d}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{U} = \lambda \mathcal{Q}(\mathbf{v}), \ t > 0, \ x \in \mathbb{R},$$
(2.41)

où le vecteur des inconnues s'écrit maintenant

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathcal{T}_1 \\ \mathcal{T}_2 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} \alpha_2 \rho_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \end{pmatrix},$$

tandis que les fonctions \mathbf{F} et \mathbf{d} sont telles que

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 + \alpha_1 \pi_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2^2 + \alpha_2 \pi_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d}(\mathbf{U}) \partial_x \mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_I \partial_x \alpha_1 \\ 0 \\ -\pi_I \partial_x \alpha_1 \\ 0 \\ \pi_I \partial_x \alpha_1 \\ u_I \partial_x \mathcal{T}_1 \\ u_I \partial_x \mathcal{T}_2 \end{pmatrix}.$$

Les quantités \mathcal{T}_k et π_k doivent être comprises comme des relaxations de $\tau_k = 1/\rho_k$ et p_k , et nous posons

$$\pi_k = p_k(1/\mathcal{T}_k) + a_k^2(\mathcal{T}_k - \tau_k), \ k = 1, 2$$

Les paramètres a_1 et a_2 seront choisis de sorte à vérifier les conditions de Whitham

$$a_k > \rho_k \sqrt{p'_k(\rho_k)}, \quad k = 1, 2,$$
 (2.42)

pour tous les ρ_k en considération. Enfin, nous posons $\mathcal{Q}(\mathbf{U}) = (0, 0, 0, 0, 0, (\tau_1 - \mathcal{T}_1), (\tau_2 - \mathcal{T}_2))^t$. L'intérêt principal de ce système réside dans le fait que tous ses champs caractéristiques sont linéairement dégénérés. Il est important de noter qu'il reste *nonconservatif* et de nature hyperbolique résonante. Ainsi, la résolution du problème de Riemann correspondant reste difficile et le traitement numérique associé à (2.41) non trivial. Dans le cadre de la thèse de T. Galié, nous avons réussi à mettre en place un schéma ayant de bonnes propriétés de robustesse et de précision. En particulier, le solveur de Riemann approché qui lui est associé présente la particularité de capturer exactement les ondes de couplage (entre les deux phases) du système équilibre. Cette propriété n'était pas garantie compte-tenu de la présence des deux vitesses u_1 et u_2 . Nous renvoyons le lecteur à l'article court [A20] pour plus de détails.

Illustration numérique. Nous considérons le test classique du robinet de Ransom qui consiste en un écoulement d'eau en présence de gravité dans un tube vertical de longueur 12 mètres. Les paramètres de simulation sont donnés dans [77] et une solution analytique est disponible pour ce problème. Notons qu'outre la gravité, un terme de retour à l'équilibre sur l'écart des pressions a été ajouté dans notre modèle. Les détails sont donnés dans la version longue de l'article [A20]. La figure 2.5 donne un avant-goût des résultats obtenus pour différents maillages. La solution numérique tend vers la solution analytique lorsque le pas du maillage tend vers 0.



FIG. 2.5 – Vitesse u_2

Chapitre 3

Chocs nonclassiques et transitions de phase

Les travaux présentés dans ce chapitre concernent l'analyse et l'approximation numérique des solutions nonclassiques de lois de conservation. Ce sujet de recherche m'intéresse depuis le début de ma thèse de doctorat et occupe encore aujourd'hui une place importante dans mon travail. Mes premières études ont été menées en collaboration avec P.G LeFloch et ont donné lieu à la publication des articles [A17], [A16], [A15]. Elles sont toutes antérieures à la soutenance de ma thèse et ne seront pas abordées ici. Depuis mon recrutement en 2003, j'ai mis en place une nouvelle stratégie numérique, appelée Transport-Equilibre, qui s'est avérée plus efficace et moins coûteuse que la plupart des méthodes disponibles dans la littérature sur ce sujet. De nature « statistiquement conservative », elle génère des solutions numériques en parfait accord avec les solutions exactes. Ce travail a donné lieu à la rédaction d'une note CRAS [C1] et de l'article [A2]. Il est abordé dans la section 3.1. Dans le cadre de la thèse de B. Boutin (financement CEA) et en collaboration avec F. Lagoutière et P.G. LeFloch, nous avons amélioré cette approche en mettant au point dans [A19] un algorithme conservatif (au sens strict du terme, par opposition aux schémas Transport-Equilibre). Il est basé sur une procédure de reconstruction discontinue et converge numériquement vers la solution nonclassique du problème posé. Il est décrit dans la section 3.2. La section 3.3 présente quelques variantes et utilisations de l'approche Transport-Equilibre ([A8] et [A22]), tandis que la section 3.4 concerne les fluides de van der Waals ([A12]) et les travaux en cours sur cette application.

Problématique générale. Considérons un système strictement hyperbolique de lois de conservation avec donnée initiale de la forme suivante

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0, \ \mathbf{u}(x,t) \in \mathbb{R}^N, \ x \in \mathbb{R}, \ t > 0, \\ \mathbf{u}(x,0) = \mathbf{u}_0(x), \end{cases}$$
(3.1)

et supposons que la fonction flux $\mathbf{f} : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ est régulière et telle que le système (3.1) admette un ou plusieurs champs caractéristiques non vraiment non linéaires (non VNL) et non linéairement dégénérés (non LD). Dans le cas d'une équation scalaire et pour fixer les idées, cela revient à supposer que la fonction flux $\mathbf{f} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ n'est ni convexe ni concave.

D'une manière générale, les solutions du problème (3.1) développent en temps fini des discontinuités (à cause de la nonlinéarité de la fonction f) et ne sont pas déterminées de manière unique par la donnée initiale \mathbf{u}_0 . Il est habituel de demander aux solutions faibles de (3.1) de vérifier au sens des distributions l'inégalité d'entropie

$$\partial_t U(\mathbf{u}) + \partial_x F(\mathbf{u}) \le 0, \tag{3.2}$$

pour un couple donné (U, F) d'applications régulières telles que $DF = DUD\mathbf{f}$ et $\mathbf{u} \mapsto U(\mathbf{u})$ est convexe. Ces applications sont appelées entropie et flux d'entropie du système (3.1). Lorsque tous les champs du système (3.1) sont VNL (*i.e.* lorsque f est une fonction convexe ou concave dans le cas N = 1), la solution faible du problème de Riemann (3.1)-(3.2) pour la donnée initiale

$$\mathbf{u}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{si} \quad x < 0, \\ \mathbf{u}_r & \text{si} \quad x > 0, \end{cases}$$
(3.3)

avec \mathbf{u}_l et \mathbf{u}_r deux états constants dans \mathbb{R}^N existe et est unique (pourvu que \mathbf{u}_l et \mathbf{u}_r soient suffisamment proches, voir [66] pour plus de détails). Cette solution coïncide avec la solution classique proposée par Lax [64], [65] et basée sur un critère de compressibilité des discontinuités de type choc. Elle vérifie également le critère de Liu [71]. Il s'agit donc de la situation idéale. Les choses se compliquent lorsque l'un au moins des champs caractéristiques du système (3.1) n'est ni VNL ni LD. Dans ce cas, le problème de Riemann de (3.1)-(3.2) peut admettre une infinité de solutions. Parmi ces solutions, une seule vérifie le critère de Lax tandis que les autres développent des chocs sous-compressifs, dits chocs nonclassiques. On parle alors de solutions nonclassiques du système (3.1). Pour obtenir l'unicité, un critère de sélection est ajouté. Il s'agit d'une relation cinétique imposée sur chaque choc nonclassique séparant deux états constants \mathbf{u}_- et \mathbf{u}_+ et se propageant à la vitesse σ (donnée par les relations de Rankine-Hugoniot). Elle s'écrit habituellement sous la forme

$$\mathbf{u}_{+} = \varphi(\mathbf{u}_{-}) \quad \text{ou} \quad \mathbf{u}_{-} = \varphi^{-1}(\mathbf{u}_{+}). \tag{3.4}$$

La fonction φ est appelée fonction cinétique et φ^{-1} désigne son inverse.

Nous renvoyons le lecteur à l'ouvrage [66] pour plus de détails et pour une théorie générale des chocs classiques et nonclassiques (voir également [45], [82], [33]...). Notons que les chocs nonclassiques sont naturellement présents dans beaucoup de modèles issus d'applications physiques (changements de phase dans les fluides compressibles, dans les matériaux solides...).

Il est désormais bien connu que l'approximation numérique des solutions nonclassiques est un problème difficile. La principale difficulté consiste à imposer au niveau discret la relation cinétique (3.4). Dans la littérature, il existe deux classes de méthodes pour aborder ce problème.

La première tente d'imposer le critère cinétique en introduisant dans le schéma numérique des contributions liées à la discrétisation de termes de viscosité et de capillarité. Au niveau continu, ces petites échelles régularisent les solutions de (3.1)-(3.2) et génèrent les chocs nonclassiques dans la limite d'un paramètre ϵ (représentant la taille des petites échelles) tendant vers 0. Au niveau numérique, cela revient à proposer un schéma d'ordre élevé dont l'équation équivalente ressemble le plus possible au problème régularisé. En pratique, cette approche conduit à des schémas sous forme *conservative* et donne des résultats satisfaisants pour des solutions d'amplitude modérée. Les chocs nonclassiques de grande amplitude ne sont pas très bien calculés à cause de leur grande sensibilité vis à vis de la diffusion numérique (et des petites échelles en général). Pour plus de détails, nous renvoyons par exemple à [54], [51], [68], [A17], [A16] ou encore [T1] et les références citées à l'intérieur.

La deuxième classe de méthodes, connue sous le nom d'approche « sharp interface » (interface raide) manipule directement la fonction cinétique φ . Les méthodes de « front tracking » et le schéma de Glimm font partie de cette classe. Elles donnent des solutions numériques en parfait accord avec les solutions exactes (quelle que soit l'amplitude), et ont la particularité de produire des discontinuités sans aucune diffusion numérique. Ces méthodes sont en revanche très coûteuses puisqu'elles nécessitent la connaissance du solveur de Riemann, ce qui empêche toute utilisation pour des applications complexes. De plus, elles ne sont que « statistiquement conservatives » : *i.e.* elles ne sont pas stricto sensu conservatives mais convergent malgré tout vers la solution attendue.

Les méthodes développées dans les sections 3.1 et 3.2 sont basées sur une approche « sharp interface ». Notre objectif est de conserver les avantages qui lui sont associés, tout en supprimant les inconvénients. Ainsi, les schémas proposés permettent de s'affranchir de la connaissance explicite du solveur de Riemann. L'approche par reconstruction discontinue est de plus un schéma conservatif au sens strict du terme. Ce schéma possède donc tous les avantages des deux grandes classes de méthodes.

3.1 L'approche Transport-Equilibre

Dans cette section et dans la suivante, on se focalise sur le cas scalaire correspondant au choix N = 1. Le cas des systèmes sera considéré dans les sections 3.3 et 3.4. On cherche donc à approcher les solutions nonclassiques du problème

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x f(u) = 0, \ u(x,t) \in \mathbb{R}, \ x \in \mathbb{R}, \ t > 0, \\ u(x,0) = u_0(x), \end{cases}$$
(3.5)

complété par l'inégalité d'entropie

$$\partial_t U(u) + \partial_x F(u) \le 0. \tag{3.6}$$

Dans un souci de pédagogie, on propose de décrire l'approche Transport-Equilibre en faisant le choix très académique $f(u) = u^3$ qui est le prototype d'une fonction flux non convexe. Le cas des fonctions flux plus générales est traité dans [A2]. On pose alors $U(u) = u^2$, $F(u) = \frac{3}{4}u^4$, et

$$\varphi(u) = -\beta \, u.$$

Un calcul simple montre que le choix $\beta \in [1/2, 1)$ permet d'assurer la compatibilité du critère cinétique avec l'inégalité d'entropie (3.6). Par compatibilité, nous entendons qu'un choc nonclassique doit vérifier (3.6) au sens des distributions, c'est-à-dire

$$-\sigma\Big(U(\varphi(u)) - U(u)\Big) + \Big(F(\varphi(u)) - F(u)\Big) \le 0$$

La vitesse de propagation $\sigma = \sigma(u, \varphi(u))$ est donnée par la relation de Rankine-Hugoniot

$$\sigma(u,v) = \frac{f(u) - f(v)}{u - v}, \ \forall \ u \neq v.$$

$$(3.7)$$

La solution du problème de Riemann. Etant donnés deux états constants u_l et u_r , on considère la donnée initiale u_0 définie par

$$u_0(x) = \begin{cases} u_l & \text{si} \quad x < 0, \\ u_r & \text{si} \quad x > 0, \end{cases}$$
(3.8)

et on pose $\varphi^{\sharp}(u) = -u - \varphi(u)$. D'après [66], la solution du problème de Riemann est définie comme suit.

Si $u_l > 0$:

(1) Si $u_r \ge u_l$, la solution est une onde de détente joignant u_l à u_r .

(2) Si $u_r \in [\varphi^{\sharp}(u_l), u_l)$, la solution est un choc classique joignant u_l à u_r .

(3) Si $u_r \in (\varphi(u_l), \varphi^{\sharp}(u_l))$, la solution est un choc nonclassique joignant u_l à $\varphi(u_l)$, suivi d'un choc classique joignant $\varphi(u_l)$ à u_r .

(4) Si $u_r \leq \varphi(u_l)$, la solution est un choc nonclassique joignant u_l à $\varphi(u_l)$, suivi d'une onde de détente joignant $\varphi(u_l)$ à u_r .

Si $u_l < 0$:

(1) Si $u_r \leq u_l$, la solution est une onde de détente joignant u_l à u_r .

(2) Si $u_r \in [u_l, \varphi^{\sharp}(u_l))$, la solution est un choc classique joignant u_l à u_r .

(3) Si $u_r \in (\varphi^{\sharp}(u_l), \varphi(u_l))$, la solution est un choc nonclassique joignant u_l à $\varphi(u_l)$, suivi d'un choc classique joignant $\varphi(u_l)$ à u_r .

(4) Si $u_r \ge \varphi(u_l)$, la solution est un choc nonclassique joignant u_l à $\varphi(u_l)$, suivi d'une onde de détente joignant $\varphi(u_l)$ à u_r .

Le point de départ. Le principe des schémas Transport-Equilibre part du constat suivant. D'un côté, les schémas de type Godunov habituels sont peu coûteux et fonctionnent correctement pour approcher les solutions régulières et les chocs classiques. Ils ne conviennent pas pour l'approximation des chocs nonclassiques. De l'autre, le schéma de Glimm est très bien adapté aux chocs

nonclassiques mais nécessite la connaissance du solveur de Riemann et peut s'avérer coûteux. Notre objectif est donc de proposer une méthode hybride basée sur une méthode de type Godunov mais faisant appel à une stratégie semblable à la méthode de Glimm au voisinage des chocs nonclassiques. Pour passer d'une méthode à l'autre, nous invoquerons un critère simple d'apparition des chocs nonclassiques.

Notre méthode est composée de deux pas : un pas Transport et un pas Equilibre. Dans le pas Transport, nous localiserons les chocs nonclassiques et les ferons avancer en temps à l'aide d'une procédure d'échantillonnage. Dans le pas Equilibre, nous introduirons une fonction flux numérique pour prendre en compte les parties classiques de la solution.

Le critère d'apparition des chocs nonclassiques. Avant de décrire les deux pas de la méthode de manière détaillée, nous proposons de définir ce qui nous servira par la suite de critère d'apparition des chocs nonclassiques dans la solution d'un problème de Riemann local (*i.e.* au niveau d'une interface du maillage). Nous remarquons tout d'abord que la quantité $u\varphi^{\sharp}(u) = -u^2(1-\beta)$ est toujours strictement négative. Ainsi, la solution du problème de Riemann donnée ci-dessus nous informe que les chocs nonclassiques ne peuvent apparaître que pour des données u_l et u_r telles que $u_l u_r < 0$. La réciproque n'est pas vraie puisque dans le cas $u_l u_r < 0$ et $u_l u_r \ge u_l \varphi^{\sharp}(u_l)$ la solution reste classique et consiste en un choc joignant directement $u_l \ge u_r$. Nous introduisons donc les deux ensembles suivants :

$$\mathcal{C} = \{(u_l, u_r) \text{ tel que } u_l u_r < 0 \text{ et } u_l u_r \ge u_l \varphi^{\sharp}(u_l)\},$$
(3.9)

$$\mathcal{N} = \{ (u_l, u_r) \text{ tel que } u_l u_r < 0 \text{ et } u_l u_r < u_l \varphi^{\sharp}(u_l) \},$$
(3.10)

correspondant respectivement au cas d'une solution classique et nonclassique lorsque $u_l u_r < 0^1$. Le critère d'apparition d'un choc nonclassique sera donc $(u_l, u_r) \in \mathcal{N}$.

Description de la méthode. On décrit maintenant les deux pas de la méthode. Les notations utilisées sont tout à fait habituelles : Δt et Δx sont les pas de temps et d'espace supposés constants, $x_{j+1/2} = j\Delta x$ pour $j \in \mathbb{Z}$ sont les interfaces du maillage et $t^n = n\Delta t$ pour $n \in \mathbb{N}$ les instants intermédiaires. On pose $\nu = \Delta t/\Delta x$ et $x_j = (x_{j-1/2} + x_{j+1/2})/2$. La valeur approchée à l'instant t^n de la solution exacte sur une cellule $C_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ sera notée u_j^n et on suppose connue une fonction flux numérique $(u, v) \mapsto g(u, v)$ consistante avec f au sens des volumes finis (g(u, u) = f(u)). Pour fixer les idées, on peut considérer par exemple la fonction flux numérique associée à la méthode de Godunov, *i.e.* g(u, v) = f(u) $(f(u) = u^3 \text{ donc } f'(u) \ge 0 \text{ pour tout } u)$. On suppose connue la suite $(u_j^n)_{j \in \mathbb{Z}}$ et on cherche à définir $(u_j^{n+1})_{j \in \mathbb{Z}}$.

Premier pas $(t^n \to t^{n+1/2})$ L'objectif de ce premier pas est de repérer la présence éventuelle de discontinuités joignant les deux zones de convexité/concavité de la fonction f et, le cas échéant, de les faire évoluer pendant un intervalle de temps Δt . On rappelle que la vitesse de propagation d'une discontinuité séparant deux états constants u et v est donnée par (3.7).

Soit v la fonction définie sur l'intervalle $[x_{j-1}, x_{j+1}]$ par (voir aussi la figure 3.1)

$$v(x,t) = \begin{cases} u_{j-1}^{n} & \text{si} \quad x \in [x_{j-1}, x_{j-1/2}[, u_{j}^{n,-} & \text{si} \quad x \in [x_{j-1/2}, x_{j-1/2} + \sigma_{j-1/2}t[, u_{j}^{n} & \text{si} \quad x \in [x_{j-1/2} + \sigma_{j-1/2}t, x_{j+1/2}[, u_{j+1}^{n} & \text{si} \quad x \in [x_{j+1/2}, x_{j+1}], \end{cases}$$
(3.11)

avec $\sigma_{j-1/2} \ge 0$ pour tout j. Cette fonction modélise l'entrée dans la cellule C_j d'une discontinuité issue de l'interface $x_{j-1/2}$ entre les états $u_j^{n,-}$ et u_j^n . La définition de l'état d'équilibre $u_j^{n,-}$ va dépendre de la nature de la solution du problème de Riemann posé à l'interface $x_{j-1/2}$, *i.e.* dont les états initiaux sont $u_l = u_{j-1}^n$ et $u_r = u_j^n$. Plus précisément, • si $(u_{j-1}^n, u_j^n) \in \mathcal{C}, u_{j-1}^n$ et u_j^n n'appartiennent pas à la même zone de convexité/concavité de f et

sont joints par un choc classique. On pose donc naturellement $u_j^{n,-} = u_{j-1}^n$ et $\sigma_{j-1/2} = \sigma(u_j^n, u_j^{n,-})$.

¹La situation $u_l u_r \ge 0$ correspond à deux états appartenant à une même zone de convexité/concavité de la fonction flux et n'engendre donc pas de difficulté particulière.



FIG. 3.1 – Définition de v(x, t).

FIG. 3.2 – Définition de $v(x, t^{n+1/2})$.

• si $(u_{j-1}^n, u_j^n) \in \mathcal{N}, u_{j-1}^n$ et u_j^n n'appartiennent pas à la même zone de convexité/concavité de f et la solution du problème de Riemann contient un choc nonclassique vérifiant le critère cinétique $u_+ = \varphi(u_-) \iff u_- = \varphi^{-1}(u_+) \ (u_- \text{ et } u_+ \text{ sont les états gauche et droit}).$ On propose alors de poser $u_j^{n,-} = \varphi^{-1}(u_j^n)$ et $\sigma_{j-1/2} = \sigma(u_j^n, u_j^{n,-})$. • autrement, u_{j-1}^n et u_j^n sont dans la même région de convexité/concavité de f. Notre objectif dans

• autrement, u_{j-1}^n et u_j^n sont dans la même région de convexité/concavité de f. Notre objectif dans cette situation est d'utiliser une méthode de type Godunov associée à la fonction flux numérique g. Pour cela, il est nécessaire de poser dans ce premier pas $\sigma_{j-1/2} = 0$, de sorte que $u_j^{n,-}$ n'a pas besoin d'être défini (voir la figure 3.1).

Pour obtenir la nouvelle approximation $u_j^{n+1/2}$ à l'instant $t^{n+1/2}$, on propose d'utiliser une procédure d'échantillonnage sur la cellule C_j de la fonction $x \mapsto v(x, \Delta t)$. Cette procédure est identique à celle de la méthode de Glimm. Etant donnée une suite équidistribuée de nombres (a_n) dans l'intervalle]0, 1[, elle consiste à poser

$$v(x,t^{n+1/2}) = \begin{cases} u_{j-1}^n & \text{si } x \in [x_{j-1}, x_{j-1/2}], \\ u_j^{n+1/2} & \text{si } x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}], \\ u_{j+1}^n & \text{si } x \in [x_{j+1/2}, x_{j+1}], \end{cases}$$
(3.12)

avec

$$u_j^{n+1/2} = \begin{cases} u_j^{n,-} & \text{si} & a_{n+1} \in]0, \nu \sigma_{j-1/2}[, \\ u_j^n & \text{si} & a_{n+1} \in [\nu \sigma_{j-1/2}, 1[. \end{cases}$$
(3.13)

Voir aussi la figure 3.2.

Deuxième pas $(t^{n+1/2} \rightarrow t^{n+1})$ L'objectif de ce deuxième pas est de prendre en compte l'évolution en temps des parties de la solution numérique contenues dans une même zone de convexité/concavité. Nous proposons pour cela d'utiliser une formule de mise à jour nonconservative de la forme suivante :

$$u_j^{n+1} = u_j^{n+1/2} - \nu(g_{j+1/2}^L - g_{j-1/2}^R), \quad j \in \mathbb{Z},$$
(3.14)

où les flux numériques $g_{i+1/2}^L$ et $g_{i-1/2}^R$ sont définis par

$$g_{j+1/2}^{L} = g(u_{j}^{n+1/2}, u_{j+1}^{n+1/2, -}), \quad g_{j-1/2}^{R} = g(u_{j-1}^{n+1/2, +}, u_{j}^{n+1/2}).$$
 (3.15)

Celle-ci met donc en jeu la fonction flux numérique g ainsi que des états d'équilibre $u_{j-1}^{n+1/2,+}$ et $u_{i+1}^{n+1/2,-}$ à définir. Compte tenu de l'objectif de ce deuxième pas, ces états seront situés dans la même zone de convexité/concavité que la valeur de l'inconnue à l'instant $t^{n+1/2}$ sur la cellule C_i , c'est-à-dire $u_i^{n+1/2}$. Plus précisément, on propose les définitions suivantes qui sont en accord avec celles du premier pas (voir aussi la fonction $x \mapsto v(x, t^{n+1/2})$ sur la figure 3.2) : • si $(u_j^{n+1/2}, u_{j+1}^n) \in \mathcal{C}$ (respectivement $(u_{j-1}^n, u_j^{n+1/2}) \in \mathcal{C}$), l'état d'équilibre $u_{j+1}^{n+1/2,-}$ (resp.

 $u_{j-1}^{n+1/2,+}$) associé à u_{j+1}^n (resp. u_{j-1}^n) est simplement $u_j^{n+1/2}$. • si $(u_j^{n+1/2}, u_{j+1}^n) \in \mathcal{N}$ (respectivement $(u_{j-1}^n, u_j^{n+1/2}) \in \mathcal{N}$), la solution du problème de Rie-

mann correspondant contient un choc nonclassique. Nous posons donc $u_{j-1}^{n+1/2,+} = \varphi(u_{j-1}^n)$ et

 $\begin{aligned} u_{j+1}^{n+1/2,-} &= \varphi^{-1}(u_{j+1}^n). \\ \bullet \text{ autrement, } u_j^{n+1/2} \text{ et } u_{j+1}^n \text{ (respectivement } u_{j-1}^n \text{ et } u_j^{n+1/2} \text{) sont déjà dans la même zone de convexité/concavité. Nous posons simplement } u_{j-1}^{n+1/2,+} &= u_{j-1}^n \text{ et } u_{j+1}^{n+1/2,-} = u_{j+1}^n, \text{ de sorte que } g_{j+1/2}^L &= g(u_j^{n+1/2}, u_{j+1}^n) \text{ et } g_{j-1/2}^R = g(u_{j-1}^n, u_j^{n+1/2}). \end{aligned}$

Pour résumer, les flux numériques $g_{j+1/2}^L$ et $g_{j-1/2}^R$ sont définis dans ce deuxième pas par

$$g_{j+1/2}^{L} = \begin{cases} g(u_{j}^{n+1/2}, u_{j}^{n+1/2}) & \text{si} & (u_{j}^{n+1/2}, u_{j+1}^{n}) \in \mathcal{C}, \\ g(u_{j}^{n+1/2}, \varphi^{-1}(u_{j+1}^{n})) & \text{si} & (u_{j}^{n+1/2}, u_{j+1}^{n}) \in \mathcal{N}, \\ g(u_{j}^{n+1/2}, u_{j+1}^{n}) & \text{autrement}, \end{cases}$$
(3.16)

et

$$g_{j-1/2}^{R} = \begin{cases} g(u_{j}^{n+1/2}, u_{j}^{n+1/2}) & \text{si} & (u_{j-1}^{n}, u_{j}^{n+1/2}) \in \mathcal{C}, \\ g(\varphi(u_{j-1}^{n}), u_{j}^{n+1/2}) & \text{si} & (u_{j-1}^{n}, u_{j}^{n+1/2}) \in \mathcal{N}, \\ g(u_{j-1}^{n}, u_{j}^{n+1/2}) & \text{autrement.} \end{cases}$$
(3.17)

Ceci conclut la description de l'algorithme.

Le théorème suivant résume les propriétés satisfaites par la méthode. La démonstration est donnée dans [A2]. On notera en particulier que le schéma coïncide par construction avec la méthode de Glimm quand la solution exacte est un choc nonclassique, et avec la méthode de Godunov (si g(u, v) = f(u) lorsque la solution exacte est située dans une même zone de convexité/concavité. La méthode est donc convergente dans ces deux cas particuliers. La convergence dans le cas général reste une question ouverte à ce jour.

Théorème 6 Sous une condition CFL habituelle, le schéma proposé est consistant avec le problème continu au sens suivant.

(i) <u>Etat constant</u> : si $u := u_{j-1}^n = u_j^n = u_{j+1}^n$, alors $u_j^{n+1} = u$. (ii) <u>Chocs nonclassiques et chocs classiques</u> (joignant les deux zones de convexité/concavité) : soient u_l et u_r tels que $(u_l, u_r) \in \mathcal{C}$ ou $(u_l, u_r) \in \mathcal{N}$. Supposons que $u_j^0 = u_l$ si $j \le 0$ et $u_j^0 = u_r$ si $j \ge 1$. Alors, le schéma proposé est équivalent à la méthode de Glimm et converge donc vers la solution exacte du problème posé, c'est-à-dire $u(x,t) = u_l$ si $x < \sigma(u_l, u_r)t$ et $u(x,t) = u_r$ sinon. La discontinuité est donc raide au niveau numérique.

 u_{i}^{n} et $\overline{u_{i+1}^{n}}$ sont dans une même zone de convexité/concavité. Alors le schéma proposé est équivalent au schéma conservatif habituel défini par

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \nu(g(u_j^n, u_{j+1}^n) - g(u_{j-1}^n, u_j^n))$$

et possède donc toutes les propriétés de stabilité associées à la fonction flux numérique g considérée. Le schéma peut donc aussi être convergent dans cette situation si l'on choisit par exemple le flux associé à la méthode de Godunov.
Résultats numériques. Nous illustrons maintenant le bien-fondé de l'algorithme par deux simulations numériques issues de [A2] et associées à la fonction cinétique $\varphi(u) = -0.75u$. Il s'agit de deux problèmes de Riemann avec $(u_l, u_r) = (4, -2)$ (test C¹) et $(u_l, u_r) = (4, -5)$ (test D¹). L'ensemble des paramètres ainsi que d'autres simulations peuvent être trouvés dans [A2]. Les résultats sont présentés sur la figure 3.3 pour un maillage de 100 points, et la solution numérique est comparée avec la solution exacte. On observe un parfait accord, et on remarque que les chocs nonclassiques sont calculés sans aucune diffusion numérique. Le tableau 3.1 quantifie en norme L^1 les erreurs commises entre la solution numérique et la solution exacte pour différents maillages. On observe que cette erreur tend vers zéro avec la taille des mailles. Enfin, il est clair que l'algorithme proposé n'est pas conservatif. Le tableau 3.2 montre que les erreurs relatives de conservation sont très faibles, ce qui explique d'une certaine manière la très bonne qualité des résultats obtenus.



FIG. 3.3 – Solutions nonclassiques : test C^1 (à gauche) et D^1 (à droite)

Nombre de points	Test \mathbf{C}^1	${\bf Test} {\bf D}^1$
100	1.51	0.248331
500	$1.70e^{-2}$	$5.38e^{-2}$
1000	$8.51e^{-3}$	$3.48e^{-2}$
2000	$4.26e^{-3}$	$1.79e^{-2}$

TAB. $3.1 - \text{Erreurs } L^1$

TAB. 3.2 – Erreurs relatives de conservation

Nombre de points	Test C^1	Test D^1
100	$2.96e^{-2}$	$4.77e^{-2}$
500	$4.47e^{-3}$	$1.24e^{-2}$
1000	$2.38e^{-3}$	$6.03e^{-3}$
2000	$1.14e^{-3}$	$3.23e^{-3}$



FIG. 3.4 – Illustration de la procédure de reconstruction

3.2 L'approche par reconstruction discontinue

Comme nous venons de le souligner, l'approche Transport-Equilibre possède le défaut de ne pas être rigoureusement conservative. Ce défaut peut néanmoins être qualifié de *léger* dans la mesure où il n'empêche pas la convergence de la méthode. L'objectif de cette section est de montrer comment lever cette imperfection tout en préservant les bonnes propriétés de l'approche Transport-Equilibre : faible coût d'évaluation, respect du critère cinétique au niveau discret, capture des chocs nonclassiques sans diffusion numérique, convergence (vérifiée sur quelques simulations). De même que précédemment et dans un souci de pédagogie, nous nous focaliserons sur le cas d'une équation scalaire. La fonction flux sera supposée régulière et sans point sonique, *i.e.* $f'(u) \neq 0$, $\forall u$. Pour fixer les idées on supposera que f'(u) > 0, $\forall u$ (voir l'article [A19] pour le cas général). L'extension au cas des systèmes est un travail en cours dans le cadre de la thèse de B. Boutin (voir également la section 3.4).

Le point de départ. Les schémas conservatifs proposés dans la littérature ne fonctionnent pas correctement lorsque l'amplitude de la solution devient trop importante à cause de la grande sensibilité des chocs nonclassiques vis à vis de la diffusion numérique (voir l'introduction générale en début de chapitre et les références proposées). Au contraire, les schémas de type « sharp interface »capturent les discontinuités sans diffusion numérique et marchent parfaitement. L'idée est donc de construire un schéma conservatif qui capture les discontinuités sans diffusion numérique, et adapté aux solutions nonclassiques. Nous suggérons pour cela d'utiliser les schémas par reconstruction discontinue proposés par F. Lagoutière. Ces schémas sont des algorithmes non dissipatifs, c'est-à-dire permettant la capture de profils de choc (classique) discrets peu ou pas diffusés. Il sont décrits en détail dans [62], [63] (voir également [37], [61], [18]). Pour adapter ces schémas aux solutions nonclassiques, nous exploiterons la notion d'état d'équilibre utilisée dans l'approche Transport-Equilibre.

Description de la méthode. L'objectif étant de proposer une méthode conservative, nous partons de la formule habituelle

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \nu(g_{j+1/2} - g_{j-1/2}), \quad j \in \mathbb{Z},$$
(3.18)

où nous avons utilisé des notations classiques. Il s'agit de définir le flux numérique $g_{j+1/2}$. L'idée de la reconstruction discontinue est la suivante. Habituellement, la valeur u_j^n s'interprète comme une approximation à l'instant t^n de la moyenne de la solution exacte sur la cellule C_j . Ici, u_j^n sera (le cas échéant) comprise comme la projection sur les constantes d'une discontinuité nonclassique localisée dans cette cellule. Pour définir les états gauche et droit de cette discontinuité reconstruite, notés respectivement $u_{j,l}^n$ et $u_{j,r}^n$, nous dirons qu'elle fait partie de la solution du problème de Riemann associée aux états initiaux u_{j-1}^n et u_{j+1}^n . Le raisonnement sera donc centré autour de C_j . La figure 3.4 illustre cette procédure de reconstruction. La question est maintenant de définir les états gauche et droit $u_{j,l}^n$ et $u_{j,r}^n$, ainsi que la distance normalisée $d_j^n \in [0, 1]$. Pour cela, nous imposons tout d'abord à la reconstruction d'être conservative, ce qui signifie

$$d_j^n u_{j,l}^n + (1 - d_j^n) u_{j,r}^n = u_j^n,$$

où de manière équivalente

$$d_{j}^{n} = \frac{u_{j,r}^{n} - u_{j}^{n}}{u_{j,r}^{n} - u_{j,l}^{n}}$$

La distance d_j^n s'exprime donc simplement en fonction des états gauche et droit. Notons dès à présent que la procédure de reconstruction ne sera effectuée que si $d_j^n \in [0, 1]$.

Pour définir les états $u_{j,l}^n$ et $u_{j,r}^n$, nous imposons à la reconstruction d'être exacte lorsque la solution du problème de Riemann associée aux états initiaux u_{j-1}^n et u_{j+1}^n est un choc nonclassique. Autrement dit, si $u_{j+1}^n = \varphi(u_{j-1}^n)$, on demande à avoir $u_{j,l}^n = u_{j-1}^n$ et $u_{j,r}^n = u_{j+1}^n$. Pour vérifier cette condition, nous proposons de poser dans le cas général

$$u_{j,l}^n = \varphi^{-1}(u_{j+1}^n)$$
 et $u_{j,r}^n = \varphi(u_{j-1}^n).$

Pour faire le lien avec l'approche Transport-Equilibre qui a motivé cette définition, remarquons que $u_{j,l}^n$ (respectivement $u_{j,r}^n$) peut être compris comme un état d'équilibre associé à u_{j+1}^n (resp. u_{j-1}^n).

Passons maintenant à la définition du flux numérique $g_{j+1/2}$. On définit tout d'abord la vitesse de propagation

$$\sigma(u_{j,l}^n, u_{j,r}^n) = \frac{f(u_{j,r}^n) - f(u_{j,l}^n)}{u_{j,r}^n - u_{j,l}^n} > 0,$$

et le temps $\Delta t_{j+1/2}$ nécessaire à la discontinuité reconstruite pour atteindre l'interface $x_{j+1/2}$ si l'on suppose qu'elle se déplace à la vitesse $\sigma(u_{j,l}^n, u_{j,r}^n)$. Nous avons donc

$$\Delta t_{j+1/2} = \frac{1 - d_j^n}{\sigma(u_{j,l}^n, u_{j,r}^n)} \Delta x.$$

Pendant l'intervalle de temps Δt , on s'attend donc à ce que le flux numérique sur l'interface $x_{j+1/2}$ prenne successivement les valeurs $f(u_{j,r}^n)$ et $f(u_{j,l}^n)$. Ceci bien entendu si la procédure de reconstruction a été possible sur la cellule C_j . Dans le cas contraire, on posera tout simplement $g_{j+1/2} = f(u_j^n)$ (on rappelle qu'on a supposé $f'(u) > 0, \forall u$). En résumé, nous avons

$$\Delta t g_{j+1/2} = \begin{cases} \min(\Delta t_{j+1/2}, \Delta t) f(u_{j,r}^n) + \max(\Delta t - \Delta t_{j+1/2}, 0) f(u_{j,l}^n) & \text{si} & 0 \le d_j^n \le 1, \\ \Delta t f(u_j^n) & \text{sinon,} \end{cases}$$
(3.19)

ce qui conclut la description de l'algorithme.

Remarque 1 La schéma proposé est un schéma à 4 points puisque le flux numérique $g_{j+1/2}$ dépend (par l'intermédiaire de $u_{j,l}^n$ et $u_{j,r}^n$) de u_{j-1}^n , u_j^n et u_{j+1}^n .

Le théorème suivant résume les propriétés satisfaites par la méthode. Il est démontré dans [A19]. Ces propriétés sont semblables à celles vérifées par l'approche Transport-Equilibre, mais rappelons que le schéma est ici conservatif. On notera en particulier que le schéma fournit une solution *exacte* lorsque la solution est un choc nonclassique. Une telle discontinuité est donc diffusée sur une cellule au plus !

Théorème 7 Sous une condition CFL habituelle, le schéma proposé est consistant avec le problème continu au sens suivant.

(i) <u>Consistance du flux</u> : si $u := u_{j-1}^n = u_j^n = u_{j+1}^n$, alors $g_{j+1/2}^n = f(u)$. (ii) <u>Chocs nonclassiques</u> : soient u_l et u_r tels que $u_r = \varphi(u_l)$. Supposons que $u_j^0 = u_l$ si $j \le 0$ et $u_j^0 = u_r$ si $j \ge 1$. Alors, le schéma proposé est exact au sens où

$$u_j^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t^n) dx, \quad j \in \mathbb{Z}, \ n \in \mathbb{N},$$

où $(x,t) \mapsto u(x,t)$ est la solution exacte définie par $u(x,t) = u_l$ si $x < \sigma(u_l, u_r)t$ et $u(x,t) = u_r$ sinon. La discontinuité est donc diffusée au niveau numérique sur une cellule au plus.

(iii) <u>Solution classique</u> (restant dans une même zone de convexité/concavité) : supposons que u_{j-2}^n , u_{j-1}^n , u_j^n et u_{j+1}^n soient dans une même zone de convexité/concavité. Alors le schéma proposé est équivalent au schéma décentré classique, et possède donc toutes les propriétés de stabilité qui lui sont associées.

Résultats numériques. On considère deux simulations numériques issues de [A19] et associées comme précédemment à la fonction cinétique $\varphi(u) = -0.75u$. Il s'agit de deux problèmes de Riemann avec $(u_l, u_r) = (4, -5)$ (test 1) et $(u_l, u_r) = (4, -2)$ (test 2). Pour plus de détails et d'autres simulations (interaction de deux chocs nonclassiques, donnée initiale périodique...), nous renvoyons le lecteur à [A19]. Les résultats sont présentés sur les figures 3.5 et 3.6 montrant les profils en u ainsi qu'une courbe de convergence en norme L^1 . On observe un parfait accord entre les solutions exactes et numériques, et la convergence semble assurée avec un ordre proche de 0.84 pour le premier test et proche de 1 pour le deuxième. On remarque également que les chocs nonclassiques sont calculés avec un seul point de diffusion numérique.



FIG. 3.5 – Test 1 - Solution nonclassique – Convergence en norme L^1 (log(*Erreur*) versus log(Δx))



FIG. 3.6 – Test 2 - Solution nonclassique – Convergence en norme L^1 (log(*Erreur*) versus log(Δx))

3.3 Application et variante de l'approche Transport-Equilibre

Nous présentons brièvement dans cette section une application et une variante de l'approche Transport-Equilibre. L'application proposée est décrite dans le paragraphe 3.3.1 et concerne l'approximation des solutions nonclassiques d'un modèle de mouvement de foule (voir l'article [A8]). Dans le paragraphe 3.3.2, nous montrons comment modifier la méthode de Godunov habituelle pour obtenir des chocs (classiques) discrets sans aucune diffusion numérique. L'approche est générale mais les modèles considérés dans les illustrations numériques sont ceux de la dynamique des gaz, barotrope ou non, en coordonnées lagrangiennes. Voir l'article [A22]. La stratégie proposée peut être vue comme une réinterprétation (ou tout au moins comme une variante) de l'approche Transport-Equilibre.

3.3.1 Un modèle de mouvement de foule

Le modèle considéré dans [A8] est un modèle macroscopique proposé par Colombo et Rosini [29] pour décrire les mouvements de foule dans les écoulements de piétons. Il s'écrit sous la forme suivante

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q(\rho) = 0, \quad q(\rho) = \rho v(\rho), \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times]0, +\infty[,\\ \rho(x,0) = \rho_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$
(3.20)

où ρ désigne la densité de piétons, v la vitesse des piétons, et q la fonction flux. Ce modèle est semblable à celui de Lighthill-Whitam [69] et Richards [79]. Il traduit la conservation du nombre total de piétons et suppose que la vitesse v dépend uniquement de la densité ρ . On suppose que $\rho \in [0, R]$ où R est une densité maximale donnée.

Habituellement, le modèle (3.20) est utilisé pour modéliser le trafic de voitures et la vitesse v est une fonction décroissante sur [0, R] avec $v(0) = v_{max}$ et v(R) = 0 (v_{max} est une vitesse maximale) et telle que la fonction flux q soit concave sur [0, R]. Dans ce contexte, les solutions faibles de (3.20) sont *classiques* et n'engendrent donc pas de difficulté numérique.

Afin de reproduire des caractéristiques spécifiques au trafic de piétons, comme par exemple le phénomène de surcompression dans les mouvements de foule, Colombo et Rosini [29] proposent de modifier la forme habituelle de q en introduisant tout d'abord une nouvelle densité caractéristique $R^* > R$. Celle-ci est associée à une densité maximale de piétons dans des situations de panique exceptionnelles. La fonction flux est maintenant une fonction concave-convexe et croissantedécroissante sur [0, R] et convexe-concave et croissante-décroissante sur $[R, R^{\star}]$ comme illustré sur la figure 3.7 avec R = 2 et $R^* = 3$. En conséquence, des discontinuités nonclassiques ne vérifiant pas les critères de sélection habituels tels les inégalités de Lax sont contenues dans le modèle. Elles sont effectivement retenues dans la résolution du problème de Riemann, ceci pour permettre à des états de panique ($\rho \in [R, R^*]$) d'apparaître dans une situation a priori calme ($\rho \in [0, R]$). Un tel phénomène est naturel si l'on considère par exemple le cas d'une densité constante $\rho_l \in [0, R]$ de piétons arrivant avec une vitesse $v(\rho_l) > 0$ à l'extrémité d'une file d'attente stationnaire modélisée par une densité constante $\rho_r = R$ (et donc $v(\rho_r) = 0$). Une approche classique modéliserait cette situation par une onde de choc propageant l'extrémité de la file d'attente avec une vitesse négative, alors qu'un phénomène de surcompression est attendu. Pour faire apparaître des densités supérieures à R, et donc supérieures aux densités initiales ρ_l et ρ_r , il est nécessaire de considérer des solutions nonclassiques puisque les solutions classiques vérifient un principe du maximum.

Pour approcher numériquement les solutions nonclassiques de ce modèle, nous décrivons dans [A8] une méthode Transport-Equilibre semblable à l'approche décrite dans la section 3.1. Sans rentrer dans les détails de l'algorithme, soulignons que le cadre est ici différent puisque la fonction flux n'est ni concave-convexe ni convexe-concave globalement sur $[0, R^*]$. Une autre difficulté concerne le caractère non inversible de la fonction cinétique associée au solveur de Riemann proposé par Colombo et Rosini. Nous sommes parvenus à passer outre ces difficultés et à proposer un schéma numérique donnant des solutions numériques en parfait accord avec les solutions exactes, et dont les profils de choc nonclassique discrets ne contiennent aucune diffusion numérique. La figure 3.8 en donne une illustration et nous renvoyons le lecteur à [A8] pour plus de détails.

3.3.2 Une méthode de Godunov de type « sharp interface »

Nous décrivons brièvement dans ce paragraphe une stratégie numérique basée sur la méthode de Godunov et permettant de calculer des chocs (*classiques*) sans diffusion numérique. L'article [A22] donne les détails nécessaires à la programmation de la méthode.



FIG. 3.7 – Forme typique de la fonction q pour le trafic de piétons



FIG. 3.8 – Exemple de solution nonclassique : densité $x\mapsto\rho(x)$

On considère un système strictement hyperbolique de N lois de conservation, avec des champs caractéristiques vraiment nonlinéaires ou linéairement dégénérés :

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0, \\ \mathbf{u}(x,0) = \mathbf{u}_0(x), \end{cases} \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^*_+, \ \mathbf{u}(x,t) \in \mathbb{R}^N. \end{cases}$$
(3.21)

Ce système est complété par une inégalité d'entropie de la forme

$$\partial_t U(\mathbf{u}) + \partial_x F(\mathbf{u}) \le 0. \tag{3.22}$$

En utilisant des notations habituelles, la méthode de Godunov consiste à moyenner sur chaque cellule C_j la juxtaposition des solutions des problèmes de Riemann posés à chaque interface $x_{j+1/2}$, c'est-à-dire la fonction définie sous une condition CFL classique par

$$\mathbf{u}(x,t) = \mathbf{u}_{\mathbf{r}}(\frac{x - x_{j+1/2}}{t}; \mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) \text{ pour tout couple } (x,t) \in [x_j, x_{j+1}] \times [0, \Delta t]$$
(3.23)

(voir la figure 3.9 pour une illustration). Les discontinuités numériques obtenues par cette méthode



FIG. 3.9 – Un exemple de solutions de problèmes de Riemann aux interfaces $x_{i+1/2}$

contiennent de la diffusion numérique, sauf dans le cas très particulier d'une vitesse de propagation nulle. En effet, la méthode de Godunov est exacte dans cette situation et donne donc un profil raide, *i.e.* sans diffusion numérique. Cette observation a été le point de départ dans la construction de notre méthode composée de deux pas. Dans le premier pas, nous rendons artificiellement stationnaires les chocs présents dans les solutions des problèmes de Riemann posés aux interfaces $x_{j+1/2}$. Dans le deuxième pas, nous tenons compte de la dynamique de ces discontinuités. Nous espérons ainsi obtenir des profils de choc (stationnaires ou non) raides, pourvu que la méthode utilisée dans le deuxième pas soit adaptée.

Pour être plus précis sur cette décomposition, considérons deux états \mathbf{u}_j^n et \mathbf{u}_{j+1}^n tels que la solution du problème de Riemann correspondant $(x,t) \mapsto \mathbf{u}_r(\frac{x-x_{j+1/2}}{t}; \mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n)$ contienne au moins un choc (voir la figure 3.10). On note $\sigma_{j+1/2}$ la vitesse de propagation de ce choc (ou du choc de plus forte amplitude si la solution en contient plusieurs) et $\mathbf{u}_{j+1/2}^{n-}$ et $\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+}$ ses états gauche et droit. Sur chaque intervalle $[x_j, x_{j+1}]$, nous proposons de récrire le système $\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0$ sous



FIG. 3.10 – Un exemple de solution de problème de Riemann contenant une onde de choc

la forme $\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) - \sigma_{j+1/2} \partial_x \mathbf{u} + \sigma_{j+1/2} \partial_x \mathbf{u} = 0$, et de le résoudre en utilisant une stratégie de splitting d'opérateurs :

Premier pas $(t^n \to t^{n+1-})$ On résout le système

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) - \sigma_{j+1/2} \partial_x \mathbf{u} = 0\\ \mathbf{u}(x,0) = \begin{cases} \mathbf{u}_j^n & \text{if } x < x_{j+1/2},\\ \mathbf{u}_{j+1}^n & \text{if } x > x_{j+1/2}, \end{cases}$$
(3.24)

avec l'inégalité d'entropie (3.22) sur chaque intervalle $[x_j, x_{j+1}]$. Il est clair que la solution $(x, t) \mapsto \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{r}}(\frac{x-x_{j+1/2}}{t}; \mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n)$ de ce problème est donnée par

$$\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{r}}(\frac{x-x_{j+1/2}}{t};\mathbf{u}_{j}^{n},\mathbf{u}_{j+1}^{n}) = \mathbf{u}_{\mathbf{r}}(\frac{x-x_{j+1/2}+\sigma_{j+1/2}t}{t};\mathbf{u}_{j}^{n},\mathbf{u}_{j+1}^{n}),$$

de sorte que la discontinuité associée à l'onde de choc est maintenant localisée sur l'axe $x = x_{j+1/2}$. En d'autres termes, le choc a été rendu artificiellement stationnaire (voir la figure 3.11 pour une illustration). En utilisant la méthode de Godunov dans ce premier pas, on s'attend donc à obtenir des profils de choc discrets raides.

Deuxième pas $(t^{n+1-} \rightarrow t^{n+1})$ L'objectif de ce deuxième pas est de prendre en compte la dy-



FIG. 3.11 – Illustration de la rotation effectuée pour une solution contenant une onde de choc

namique des discontinuités rendues stationnaires. Cela revient à résoudre sur chaque intervalle $[x_j, x_{j+1}]$ l'équation de transport suivante :

$$\partial_t \mathbf{u} + \sigma_{j+1/2} \partial_x \mathbf{u} = 0, \tag{3.25}$$

avec comme donnée initiale la solution obtenue à l'issue du pas précédent. Afin de ne pas diffuser les discontinuités que l'on espère avoir rendues raides lors du premier pas, il est naturel d'utiliser une stratégie d'échantillonnage pour résoudre (3.25) (sur chaque intervalle $[x_j, x_{j+1}]$). Plus précisément, et à la manière de ce qui a été proposé pour l'approche Transport-Equilibre, on se donne une suite de nombres équidistribuée (a_n) dans]0, 1[, et on pose

$$\mathbf{u}_{j}^{n+1} = \begin{cases} \mathbf{u}_{j-1}^{n+1-} & \text{si} & a_{n+1} \in [0, \nu \sigma_{j-1/2}^{+}[, \\ \mathbf{u}_{j}^{n+1-} & \text{si} & a_{n+1} \in [\nu \sigma_{j-1/2}^{+}, 1 + \nu \sigma_{j+1/2}^{-}[, \\ \mathbf{u}_{j+1}^{n+1-} & \text{si} & a_{n+1} \in [1 + \nu \sigma_{j+1/2}^{-}, 1[, \end{cases}$$
(3.26)

avec $\sigma_{j+1/2}^+ = \max(\sigma_{j+1/2}, 0)$ et $\sigma_{j+1/2}^- = \min(\sigma_{j+1/2}, 0)$ (voir la figure 3.12). En pratique, nous utilisons la suite (a_n) de van der Corput.

Nous renvoyons le lecteur à [A22] pour plus de détails sur l'algorithme proposé et ses propriétés. A titre d'illustration, nous représentons sur la figure 3.13 (respectivement 3.14) les covolumes τ obtenus pour deux problèmes de Riemann associés au système de la dynamique des gaz barotrope (resp. non barotrope) en coordonnées lagrangiennes. Ces courbes sont issues de [A22]. Nous observons que la stratégie proposée génère effectivement des profils de choc discrets sans aucune diffusion numérique.

3.4 La dynamique des fluides de van der Waals

Nous abordons brièvement dans ce paragraphe la problématique des fluides de van der Waals. Plus précisément, nous considérons un fluide compressible vérifiant les deux lois de conservation



FIG. 3.12 – Illustration de la solution considérée sur une cellule dans le second pas



FIG. 3.13 – covolume τ : test 1 (à gauche) et test 2 (à droite)



FIG. 3.14 – covolume τ : test 3 (à gauche) et test 4 (à droite)

suivantes :

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_x u = 0, \\ \partial_t u + \partial_x p(\tau) = 0, \end{cases}$$
(3.27)

où u et τ représentent respectivement le volume spécifique et la vitesse du fluide. La loi de pression $p = p(\tau) > 0$ avec $\tau \in (0, +\infty)$ est choisie de type van der Waals, c'est-à-dire que nous supposons d'une part

$$\lim_{\tau \to 0} p(\tau) = +\infty, \qquad \lim_{\tau \to +\infty} p(\tau) = 0, \tag{3.28}$$

et d'autre part l'existence d'un couple (a, c) avec 0 < a < c et tel que

$$\begin{cases} p''(\tau) > 0, \quad \tau \in]0, a[\cup]c, +\infty[, \\ p''(\tau) < 0, \quad \tau \in]a, c[, \\ p'(a) > 0. \end{cases}$$
(3.29)

Ces hypothèses impliquent nécessairement l'existence d'un intervalle]d, e)[avec 0 < d < a < e < c et p'(d) = p'(e) = 0, sur lequel la loi de pression est croissante. Voir la figure 3.15 pour un choix particulier.

Sur $]0, d[\cup]e, +\infty[$, le modèle (3.27) est hyperbolique et admet les deux valeurs propres réelles et distinctes $\pm \sqrt{-p'(\tau)}$. En revanche, le système est elliptique sur]d, e[puisque ces valeurs propres deviennent complexes. Il s'agit là d'une première difficulté. Sur l'intervalle]0, d[correspondant à la phase liquide du fluide, la loi de pression est convexe et les champs caractéristiques associés sont vraiment nonlinéaires. Dans la phase vapeur $]e, +\infty[$, la loi de pression change de convexité en c et les champs caractéristiques ne sont donc plus vraiment nonlinéaires. Il s'agit de la deuxième difficulté du modèle.

Dans ce contexte, nous avons vu dans l'introduction du chapitre que la sélection d'une solution physique peut se faire par l'introduction d'une fonction cinétique φ et d'une relation cinétique associée $\mathbf{u}_+ = \varphi(\mathbf{u}_-)$. Celle-ci doit être imposée sur chaque discontinuité nonclassique séparant deux états $\mathbf{u}_- = (\tau_-, u_-)$ et $\mathbf{u}_+ = (\tau_+, u_+)$ appartement soit à deux phases distinctes, soit à la phase gazeuse mais situés de part et d'autre du point d'inflexion c. Nous discutons ci-dessous quelques aspects théoriques et numériques liés à l'étude de ces discontinuités, sur la base de travaux en cours ou déjà effectués.

Analyse théorique des chocs nonclassiques. Dans [A12], nous nous sommes intéressés avec N. Bedjaoui, F. Coquel et P.G. LeFloch à la régularisation visco-capillaire des chocs nonclassiques joignant les deux phases. Ainsi, nous supposons que le critère d'admissibilité $\mathbf{u}_{+} = \varphi(\mathbf{u}_{-})$ est associé à l'existence d'une solution onde progressive du système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_x u = 0, \\ \partial_t u + \partial_x p(\tau) = \alpha \,\partial_x(\beta(\tau) \,|\partial_x \tau|^q \,\partial_x u) - \partial_{xxx} \tau, \end{cases}$$
(3.30)

c'est-à-dire une solution régulière $\mathbf{u}(x,t) = (\tau, u)(x,t)$ vérifiant

$$\mathbf{u}(x,t) = \overline{\mathbf{u}}(\xi), \quad \xi = x - \lambda t,$$
$$\lim_{\xi \to -\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_{-}, \quad \lim_{\xi \to +\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_{+},$$

où λ représente la vitesse de propagation de la discontinuité. La fonction β est supposée positive et régulière, le coefficient $\alpha \geq 0$ correspond à la force de la viscosité et q est un exposant positif ou nul. Le terme $\partial_{xxx}\tau$ est un terme de capillarité.

Nous avons étudié l'existence et les propriétés de ces solutions particulières, en se focalisant sur les discontinuités appartenant à la deuxième famille d'ondes $(\lambda > 0)$. Pour cela, nous nous donnons un état gauche $\tau_{-} = \tau_{0}$ et une vitesse de propagation λ tels que les fonctions $\tau \mapsto d(\tau) = p(\tau_{0}) - \lambda^{2}(\tau - \tau_{0})$ et $\tau \mapsto p(\tau)$ s'intersectent en quatre points d'équilibre $(\tau_{i}, p(\tau_{i})), i = 0, ..., 3$ avec

$$\tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \tau_3.$$

La figure 3.15 illustre cette situation géométrique dans le cas non restrictif d'une loi de pression linéaire par morceaux donnée par

$$p(\tau) = \begin{cases} -7\tau + 10 & \text{if} \quad \tau \le 1, \\ 4\tau - 1 & \text{if} \quad 1 < \tau \le 2, \\ -\frac{5}{2}\tau + 12 & \text{if} \quad 2 < \tau \le 4, \\ -\frac{1}{5}\tau + \frac{14}{5} & \text{if} \quad \tau > 4, \end{cases}$$

et qui est, dans une certaine mesure, le cas le plus simple d'une fonction de type van der Waals. On a choisi $\tau_0 = 0.5$ sur ce graphique et plusieurs valeurs de λ , à savoir 0.80, 0.85 et 0.90. Lorsque $\lambda = 0.85$ on trouve

$$\tau_0 = 0.5, \quad \tau_1 \simeq 1.6646, \quad \tau_2 \simeq 2.8910, \quad \tau_3 \simeq 7.7727.$$

Nous avons mené notre étude en caractérisant les trajectoires connectant τ_0 à un des τ_i en fonc-



FIG. 3.15 – Pression p et ligne $\tau \mapsto d(\tau)$ pour plusieurs valeurs de λ

tion du coefficient α , et en portant une attention toute particulière aux trajectoires nonclassiques (c'est-à-dire celles joignant τ_0 à τ_2). De manière surprenante, notre analyse a montré que ces trajectoires n'étaient ni uniques ni monotones. Elles peuvent en effet exhiber un nombre dénombrable d'oscillations (*i.e.* de changements de monotonie), comme l'atteste notre principal résultat.

Théorème 8 Il existe une suite $(\overline{\alpha}_n(\tau_0, \lambda))_n$ strictement décroissante de valeurs du paramètre α telle que si $\alpha = \overline{\alpha}_n$, l'onde progressive joignant τ_0 à τ_2 possède n oscillations. De plus, - pour $\alpha \in (\overline{\alpha}_{2n+2}, \overline{\alpha}_{2n+1})$ ou $\alpha > \overline{\alpha}_0$ il existe une trajectoire joignant τ_0 à τ_1 , - pour $\alpha \in (\overline{\alpha}_{2n+1}, \overline{\alpha}_{2n})$ il existe une trajectoire joignant τ_0 à τ_3 . Enfin, la suite $\overline{\alpha}_n$ tend vers zéro : $\lim_{n \to +\infty} \overline{\alpha}_n(\tau_0, \lambda) = 0$.

Il s'agit d'une caractéristique nouvelle par rapport à la littérature existante sur ce sujet (voir par exemple les travaux de N. Bedjaoui et P.G. LeFloch [6], [7], [8]). Elle est essentiellement liée à la présence des deux points d'inflexion (a et c) qui n'étaient pas pris en compte jusque là dans la loi de pression considérée. Des illustrations numériques de ce comportement inhabituel sont données dans [A12].

Pour conclure, soulignons qu'une des conséquences de l'existence de plusieurs ondes progressives nonclassiques joignant τ_0 à τ_2 est le caractère multivalué de la fonction cinétique φ si aucun autre critère de sélection supplémentaire n'est ajouté. Ceci conduit à un problème de Riemann qui admet plusieurs solutions et qui est reste donc mal posé.

Approximation numérique. D'un point de vue numérique, nous travaillons actuellement en collaboration avec B. Boutin (dans le cadre de sa deuxième année de thèse), F. Lagoutière et P.G.

LeFloch sur l'extension du schéma par reconstruction discontinue présenté dans la section 3.2 pour une équation scalaire. Parmi les difficultés supplémentaires liées au système considéré ici figurent notamment : l'existence de deux familles d'ondes (et donc de deux fonctions cinétiques), le caractère non signé des vitesses de propagation et la présence d'une zone elliptique d'instabilité. Les études prospectives menées jusqu'à présent nous permettent d'être optimistes quant à l'obtention d'un schéma conservatif et propageant exactement les chocs nonclassiques isolés.

Chapitre 4

Trafic routier

Ce chapitre est consacré à l'approximation numérique de certains systèmes utilisés dans la modélisation du trafic routier. Mes travaux sur ce sujet ont été effectués en collaboration avec P. Goatin et ont donné lieu à la rédaction des articles [A3] et [A7] (l'article [B5] est une version courte de [A3]). Ils sont présentés dans les sections 4.1 et 4.2.

Cadre général. Il existe dans la littérature au moins deux grandes approches permettant de modéliser la dynamique du trafic routier : le point de vue *microscopique*, qui consiste à suivre chacun des véhicules impliqués individuellement, et le point de vue *macroscopique* (ou *dynamique des fluides*) qui considère l'évolution d'un groupe de véhicules sur une portion de route. Ici, nous nous intéressons uniquement aux modèles macroscopiques. Ils sont basés sur une ou plusieurs équations aux dérivées partielles.

Le prototype de ces modèles est dû à Lighthill-Whitham [69] et Richards [79] (LWR) et est composé d'une seule équation. On parle alors de modèle du premier ordre. Cette équation, dite de conservation de la masse, traduit l'égalité entre la variation du nombre de véhicules entre deux points x_1 et x_2 d'une route et la différence entre le nombre de véhicules entrant en x_1 et sortant en x_2 (on suppose que le sens de circulation est de x_1 vers x_2). Plus précisément, nous avons

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \ t > 0, \tag{4.1}$$

où ρ désigne la densité de véhicules et $v = v(\rho)$ la vitesse moyenne. Il est naturel de supposer que $\rho \in [0, R]$ où R est une densité maximale associée à un bouchon. De même, la vitesse v est une fonction positive ou nulle et strictement décroissante sur [0, R], avec v(R) = 0. Un choix possible est donné par la loi

$$v(\rho) = V(1 - \frac{\rho}{R}), \tag{4.2}$$

où V la vitesse maximale des véhicules (v(0) = V).

Les modèles dits du second ordre sont composés d'une équation supplémentaire. Le premier de ce type a été proposé par Payne [75] et Whitham [87], et amélioré par Aw-Rascle [3] en accord avec les travaux de Daganzo [34]. Le modèle de Aw-Rascle peut être vu comme un système de la dynamique des gaz isentropiques en coordonnées Eulériennes, dans lequel la dérivée en espace $\partial_x p$ de la pression (intervenant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement) a été remplacée par la dérivée convective $\partial_t p + v \partial_x p$. Plus précisément, le modèle s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \left(\rho v \right) = 0, \\ \partial_t y + \partial_x \left(y v \right) = 0, \end{cases} \quad x \in \mathbb{R}, \ t > 0.$$

$$(4.3)$$

La variable conservative y est définie par

$$y = \rho w, \quad w = v + p(\rho), \tag{4.4}$$

et p est associé à un terme de pression (comme en dynamique des gaz) qui prend en compte la réaction des conducteurs vis à vis de l'état du trafic en aval. Un choix possible est donné par la

formule

$$p(\rho) = v_{ref} \ln\left(\frac{\rho}{R}\right),\tag{4.5}$$

où R représente toujours la densité maximale autorisée, tandis que v_{ref} est une vitesse de référence supposée connue. La vitesse v des véhicules dépend maintenant de ρ et de y d'après (4.4). Nous renvoyons le lecteur à [3] pour plus de détails sur ce modèle. Il sera étudié numériquement dans la section 4.2.

Un autre modèle du second ordre a été proposé par Colombo [26]. Il est composé de deux lois de conservation sur la densité ρ et le moment q et s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \left(\rho v \right) = 0, \\ \partial_t q + \partial_x \left((q - Q) v \right) = 0, \end{cases} \quad x \in \mathbb{R}, \ t > 0.$$

$$(4.6)$$

Le paramètre constant Q dépend de la voie de circulation considérée et la vitesse v dépend là encore des deux variables conservatives, selon la loi

$$v(\rho,q) = \left(1 - \frac{\rho}{R}\right) \frac{q}{\rho}.$$
(4.7)

La constante R a le même sens que précédemment. Nous renvoyons le lecteur à [26] pour plus de détails sur le fondement de cette modélisation.

Dans des situations mettant en jeu des valeurs extrêmes de densité de véhicules, il se trouve que les modèles du premier ordre et du second ordre pris séparément peinent à représenter correctement l'état du trafic. Plus précisément, certains diagrammes expérimentaux comme celui de la figure 4.1 ci-dessous suggèrent qu'une bonne description du trafic doit présenter deux comportements qualitatifs différents :

- lorsque les densités de véhicules sont faibles, le trafic est fluide (*free flow*) et peut être décrit par le modèle LWR;
- lorsque les densités de véhicules sont grandes, le trafic est encombré (congested flow) et le diagramme fondamental de la figure 4.1 montre que l'écoulement couvre un domaine bidimensionnel. Un modèle du second ordre semble donc plus approprié.



FIG. 4.1 – A gauche : diagramme fondamental standard pour le modèle LWR. A droite : données expérimentales issues de [60] ; Ici q représente le flux ρv .

Les modèles ainsi obtenus sont dits de transition de phase entre un environnement fluide et un environnement congestionné. Plusieurs modèles de transition de phase ont été considérés dans la littérature : Drake, Schofer et May [38], Colombo [27] et Goatin [44] notamment.

Dans la section 4.1, nous étudions numériquement le modèle proposé par Colombo [27]. Il consiste à coupler le modèle LWR (4.1)-(4.2) et le modèle (4.6)-(4.7) issu de [26]. Nous obtenons donc

Ecoulement fluide :

$$\begin{array}{ll} \text{Ecoulement congestionné}:\\ (\rho,q) \in \Omega_f, \\ \left\{ \begin{array}{ll} \partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0, \\ q = \rho V, \end{array} \right. \\ v = v_f(\rho) = V \left(1 - \frac{\rho}{R}\right), \end{array} \qquad \begin{array}{ll} \text{Ecoulement congestionné}:\\ (\rho,q) \in \Omega_c, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0, \\ \partial_t q + \partial_x \left((q - Q)v\right) = 0, \\ v = v_c(\rho,q) = \left(1 - \frac{\rho}{R}\right) \frac{q}{\rho}, \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{(4.8)} \end{array}$$

où Ω_f et Ω_c sont les domaines invariants (pour les systèmes associés) définis par :

$$\begin{aligned} \Omega_f &= \left\{ (\rho, q) \in [0, R] \times [0, +\infty[: v_f(\rho) \ge V_f, q = \rho V] \right\}, \\ \Omega_c &= \left\{ (\rho, q) \in [0, R] \times [0, +\infty[: v_c(\rho, q) \le V_c, \frac{q-Q}{\rho} \in \left[\frac{Q_{-}-Q}{R}, \frac{Q_{+}-Q}{R} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Les vitesses caractéristiques V_f et V_c sont telles que le trafic est fluide (respectivement congestionné) au dessus de V_f (resp. en dessous de V_c). Les paramètres $Q_- \in]0, Q[$ et $Q_+ \in]Q, +\infty[$ déterminent la taille du domaine congestionné et dépendent des conditions environnementales.

4.1 Approximation numérique du modèle de Colombo avec transitions de phase

La principale difficulté dans l'approximation numérique des solutions du modèle (4.8) est liée au caractère non convexe (et même non connexe) du domaine $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_c$. Ce défaut de convexité empêche l'utilisation d'une méthode de type Godunov habituelle. En présence de transitions de phase, l'étape de projection L^2 inhérente à ces méthodes pourrait en effet conduire à des valeurs n'appartenant pas au domaine Ω , ce qui arrêterait l'algorithme. Nous avons donc été amenés à proposer une nouvelle méthode de Godunov basée sur une stratégie de moyenne L^2 sur des cellules décalées, et sur une procédure d'échantillonnage. Plus précisément, nous suggérons tout d'abord de décaler les cellules du maillage en suivant les transitions de phase éventuelles, de sorte que l'étape de projection n'implique plus que des valeurs appartenant à une même phase. Ensuite, nous introduisons une technique d'échantillonnage de type Glimm pour revenir sur le maillage initial. A notre connaissance, l'idée de moyenner sur des cellules décalées a été introduite pour la première fois dans l'article [90] de X.G. Zhong, T.Y. Hou et P.G. LeFloch mais dans un contexte différent et sous une forme légèrement différente. Le fait de revenir sur le maillage initial par le biais d'une procédure d'échantillonnage permet notamment (voir également les propriétés ci-dessous) d'éviter d'avoir à manipuler des maillages mobiles (comme dans [90]). Nous renvoyons le lecteur au chapitre 3 (sections 3.1 et 3.3) pour des idées similaires. L'algorithme proposé présente la particularité d'être équivalent à la méthode de Glimm, respectivement de Godunov (habituelle), lorsque la solution est une transition de phase isolée, resp. ne contient pas de transition de phase (elle est donc conservative dans ce cas). Une extension à l'ordre deux en temps et en espace a également été proposée.

Description de la méthode. Dans toute la suite, nous utiliserons des notations classiques, et la forme condensée suivante pour le modèle (4.8)

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0, \qquad \mathbf{u} \in \Omega = \Omega_f \cup \Omega_c,$$

$$(4.9)$$

avec

$$\begin{cases} \mathbf{u} = (\rho, q) & \text{et} \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = (\rho v_f(\rho), q v_f(\rho)), & \text{si} \quad (\rho, q) \in \Omega_f, \\ \mathbf{u} = (\rho, q) & \text{et} \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = (\rho v_c(\rho, q), (q - Q) v_c(\rho, q)), & \text{si} \quad (\rho, q) \in \Omega_c. \end{cases}$$

On munit également (4.9) d'une donnée initiale :

$$\mathbf{u}(.,t=0) = \mathbf{u}_0(.) \in \Omega,\tag{4.10}$$

et on pose $\mathbf{u}_j^0 = \mathbf{u}_0(x_j)$, pour tout $j \in \mathbb{Z}$. Notre algorithme est composé de deux pas. Premier pas : évolution en temps. On résout le système

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0, \ x \in \mathbb{R}, \\ \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_{\nu}(x, t^n), \end{cases}$$
(4.11)

pour $t \in [0, \Delta t]$. Rappelons que $x \mapsto \mathbf{u}_{\nu}(x, t^n)$ est une fonction constante par morceaux. Sous la condition CFL classique

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_{\mathbf{u}} \{ |\lambda_i(\mathbf{u})|, \ i = 1 \text{ si } \mathbf{u} \in \Omega_f, \ i = 1, 2 \text{ si } \mathbf{u} \in \Omega_c \} \le \frac{1}{2},$$
(4.12)

la solution de (4.11) est composée de la juxta position des solutions des problèmes de Riemann posés à chaque interface du maillage :

$$\mathbf{u}(x,t) = \mathbf{u}_{\mathbf{r}}(\frac{x - x_{j+1/2}}{t}; \mathbf{u}_{j}^{n}, \mathbf{u}_{j+1}^{n}) \text{ pour tout } (x,t) \in [x_{j}, x_{j+1}] \times [0, \Delta t].$$
(4.13)

Deuxième pas : projection (modifiée) et échantillonnage. Pour définir à l'instant t^{n+1} une solution constante par morceaux sur chaque cellule $C_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$, la méthode de Godunov propose de moyenner la solution $x \mapsto \mathbf{u}(x, \Delta t)$ donnée par (4.13) en utilisant la formule habituelle

$$\mathbf{u}_{j}^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{u}(x, \Delta t) dt, \ j \in \mathbb{Z}.$$
(4.14)

Pour les raisons données ci-dessus, nous proposons ici de moyenner la solution $x \mapsto \mathbf{u}(x, \Delta t)$ sur les cellules (possiblement) décalées $\overline{\mathcal{C}}_{j}^{n} = [\overline{x}_{j-1/2}^{n}, \overline{x}_{j+1/2}^{n})$ établies comme suit. Soit $(\sigma_{j+1/2}^{n} = \sigma(\mathbf{u}_{j}^{n}, \mathbf{u}_{j+1}^{n}))_{j \in \mathbb{Z}}$ la suite des vitesses de propagation définies aux interfaces $(x_{j+1/2})_{j \in \mathbb{Z}}$ telles que :

- si \mathbf{u}_{j}^{n} et \mathbf{u}_{j+1}^{n} ne sont pas dans la même phase (fluide ou congestionnée), alors $\sigma_{j+1/2}^{n}$ coïncide avec la vitesse de la transition de phase présente dans la solution du problème de Riemann $(x, t) \mapsto$ $\mathbf{u}_{\mathbf{r}}(\frac{x}{t}; \mathbf{u}_{j}^{n}, \mathbf{u}_{j+1}^{n});$

- si \mathbf{u}_j^n et \mathbf{u}_{j+1}^n sont dans la même phase, alors $\sigma_{j+1/2}^n = 0$. Les nouvelles interfaces $\overline{x}_{j+1/2}^n$ à l'instant t^{n+1} sont définies par $\overline{x}_{j+1/2}^n = x_{j+1/2} + \sigma_{j+1/2}^n \Delta t$, et on pose $\overline{\Delta x}_j^n = \overline{x}_{j+1/2}^n - \overline{x}_{j-1/2}^n$ pour tout $j \in \mathbb{Z}$. Voir figure 4.2 pour une illustration. Notons que sur



FIG. 4.2 – Un exemple de cellule décalée

chaque cellule $\overline{\mathcal{C}}_{j}^{n} = [\overline{x}_{j-1/2}^{n}, \overline{x}_{j+1/2}^{n}]$, la solution $x \mapsto \mathbf{u}(x, \Delta t)$ donnée par (4.13) est située dans une seule phase. L'opération de moyenne L^{2} conduit alors à une solution approchée $\overline{\mathbf{u}}_{\nu}(x, t^{n+1})$ constante par morceaux sur un maillage non uniforme :

$$\overline{\mathbf{u}}_{\nu}(x,t^{n+1}) = \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} \text{ pour tout } x \in \overline{C}_{j}^{n}, \ j \in \mathbb{Z}, \ n \in \mathbb{N},$$

avec

$$\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} = \frac{1}{\overline{\Delta x_{j}^{n}}} \int_{\overline{x_{j-1/2}^{n}}}^{\overline{x_{j+1/2}^{n}}} \mathbf{u}(x, \Delta t) dt, \ j \in \mathbb{Z}.$$

En appliquant la formule de Green sur le domaine $\overline{E} = (abcd)$ (voir figure 4.2) défini par

$$\overline{E} = \{ (x,t) \colon t \in [0,\Delta t], \ x_{j-1/2} + \sigma_{j-1/2}^n t \le x \le x_{j+1/2} + \sigma_{j+1/2}^n t \}$$

on obtient

$$\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} = \frac{\Delta x}{\overline{\Delta x}_{j}^{n}} \mathbf{u}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\overline{\Delta x}_{j}^{n}} (\overline{\mathbf{f}}_{j+1/2}^{n,-} - \overline{\mathbf{f}}_{j-1/2}^{n,+}) \text{ for all } j \in \mathbb{Z},$$
(4.15)

où les flux numériques sont définis par

$$\overline{\mathbf{f}}_{j+1/2}^{n,\pm} = \mathbf{f}(\mathbf{v}_{\mathbf{r}}(\sigma_{j+1/2}^{n,\pm};\mathbf{u}_{j}^{n},\mathbf{u}_{j+1}^{n})) - \sigma_{j+1/2}^{n}\mathbf{v}_{\mathbf{r}}(\sigma_{j+1/2}^{n,\pm};\mathbf{u}_{j}^{n},\mathbf{u}_{j+1}^{n}) \text{ pour tout } j \in \mathbb{Z}.$$
(4.16)

Afin de revenir sur le maillage (uniforme) initial composé des cellules C_j , $j \in \mathbb{Z}$, on propose maintenant de choisir aléatoirement sur la cellule C_j une valeur parmi $\overline{\mathbf{u}}_{j-1}^{n+1}$, $\overline{\mathbf{u}}_j^{n+1}$ et $\overline{\mathbf{u}}_{j+1}^{n+1}$, en

accord avec leur taux de présence dans la cellule. Plus précisément, étant donné une suite (a_n) de nombres équidistribuée sur l'intervalle (0, 1), nous posons :

$$\mathbf{u}_{j}^{n+1} = \begin{cases} \overline{\mathbf{u}}_{j-1}^{n+1} & \text{si} & a_{n+1} \in (0, \frac{\Delta t}{\Delta x} \max(\sigma_{j-1/2}^{n}, 0)), \\ \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} & \text{si} & a_{n+1} \in [\frac{\Delta t}{\Delta x} \max(\sigma_{j-1/2}^{n}, 0), 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} \min(\sigma_{j+1/2}^{n}, 0)), \\ \overline{\mathbf{u}}_{j+1}^{n+1} & \text{si} & a_{n+1} \in [1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} \min(\sigma_{j+1/2}^{n}, 0), 1), \end{cases}$$
(4.17)

pour tout $j \in \mathbb{Z}$. Nous avons utilisé la suite de van der Corput pour les tests numériques. Ceci conclut la description de l'algorithme.

Extension à l'ordre deux en temps et en espace. Nous proposons une extension à l'ordre deux en temps et en espace du schéma proposé. Rappelons tout d'abord que la notion d'ordre repose généralement sur une hypothèse de régularité des solutions. Dans notre contexte, les solutions régulières ne contiennent pas de transition de phase puisque celles-ci sont associées à des discontinuités joignant les domaines Ω_f et Ω_c . Il est par ailleurs clair que la phase de projection sur les constantes (4.15) de notre algorithme considère l'évolution en temps des phases pures tandis que la phase d'échantillonnage (4.17) vise à rendre compte de la dynamique des transitions de phase. Nous nous focaliserons donc sur l'étape de projection sur les constantes pour construire notre approche. La procédure d'échantillonnage restera inchangée.

Ordre deux en espace. Nous proposons une stratégie de type MUSCL (voir par exemple [86], [46], [85], [11], [40]) dont la procédure de reconstruction affine par morceaux est stable au sens L^1 (*i.e.* respecte l'espace des états).

Soit $\mathbf{u} \mapsto \mathbf{U} = \varphi(\mathbf{u})$ un changement de variable de Ω vers un certain ensemble $\Omega_{\mathbf{U}}$. Le point de départ de la méthode consiste à remplacer les valeurs constantes par maille \mathbf{u}_j^n par des fonctions affines en \mathbf{U} dont la valeur au centre $x_j = \frac{1}{2}(x_{j-1/2} + x_{j+1/2})$ de la cellule coïncide avec \mathbf{U}_j^n :

$$\begin{cases} \mathbf{u}^{n}(x) = \varphi^{-1}(\mathbf{U}^{n}(x)) \quad x \in \mathcal{C}_{j} = [x_{j-1/2}; x_{j+1/2}), \text{ avec} \\ \mathbf{U}^{n}(x) = \mathbf{U}_{j}^{n} + s_{j}^{n} \frac{(x-x_{j})}{\Delta x}, \quad \mathbf{U}_{j}^{n} = \varphi(\mathbf{u}_{j}^{n}), \quad j \in \mathbb{Z}. \end{cases}$$

$$(4.18)$$

La quantité s_j^n représente la pente de la reconstruction affine, et on note $\mathbf{u}_j^{n,\pm}$ et $\mathbf{U}_j^{n,\pm}$ les traces en $x = x_{j\pm 1/2}$ de \mathbf{u}^n et \mathbf{U}^n :

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{j}^{n,\pm} = \varphi^{-1}(\mathbf{U}_{j}^{n,\pm}), \\ \mathbf{U}_{j}^{n,\pm} = \mathbf{U}_{j}^{n} \pm \Delta \mathbf{U}_{j}^{n} \quad \text{avec} \quad \Delta \mathbf{U}_{j}^{n} = \frac{1}{2}s_{j}^{n}. \end{cases}$$
(4.19)

En suivant le principe de la méthode MUSCL, il s'agit alors de remplacer le couple $(\mathbf{u}_{j}^{n}, \mathbf{u}_{j+1}^{n})$ par le couple $(\mathbf{u}_{j}^{n,+}, \mathbf{u}_{j+1}^{n,-})$ dans l'évaluation des flux numériques $\overline{\mathbf{f}}_{j+1/2}^{n,\pm} = \overline{\mathbf{f}}_{j+1/2}^{n,\pm}(\mathbf{u}_{j}^{n}, \mathbf{u}_{j+1}^{n})$ définis en (4.16).

Nous souhaitons désormais porter une attention particulière au choix du vecteur \mathbf{U}_j^n et de la pente $s_j^n = 2\Delta \mathbf{U}_j^n$. L'objectif est d'assurer l'appartenance à Ω des traces $\mathbf{u}_j^{n,\pm}$, ce qui s'interprète comme une propriété de stabilité L^1 de la reconstruction.

Remarque 2 Dans le reste de cette section et pour alléger les notations, nous supposerons que les trois états \mathbf{u}_{j-1}^n , \mathbf{u}_j^n et \mathbf{u}_{j+1}^n appartiennent à la même phase (libre ou congestionnée). Dans le cas contraire, si \mathbf{u}_{j-1}^n et/ou \mathbf{u}_{j+1}^n ne sont pas dans la même phase que \mathbf{u}_j^n , ils sont remplacés en pratique par les états $\mathbf{u}_+(\mathbf{u}_{j-1}^n,\mathbf{u}_j^n)$ et/ou $\mathbf{u}_-(\mathbf{u}_j^n,\mathbf{u}_{j+1}^n)$, où $\mathbf{u}_\pm(\mathbf{u}_j^n,\mathbf{u}_{j+1}^n)$ représentent les états de part et d'autre de la transition de phase dans la solution du problème de Riemann associée aux états initiaux \mathbf{u}_j^n et \mathbf{u}_{j+1}^n . Par définition, $\mathbf{u}_+(\mathbf{u}_{j-1}^n,\mathbf{u}_j^n)$, \mathbf{u}_j^n et $\mathbf{u}_-(\mathbf{u}_j^n,\mathbf{u}_{j+1}^n)$ appartiennent alors à la même phase.

Une fois le vecteur **U** fixé, il est habituel de proposer la définition suivante de $\Delta \mathbf{U}_j^n$ basée sur le limiteur minmod :

$$\Delta \mathbf{U}_{j}^{n} = \frac{1}{2} \operatorname{minmod}(\mathbf{U}_{j+1}^{n} - \mathbf{U}_{j}^{n}, \mathbf{U}_{j}^{n} - \mathbf{U}_{j-1}^{n}).$$
(4.20)

Celle-ci sera (parfois) amenée à être modifiée pour atteindre notre objectif. Supposons tout d'abord que $\mathbf{u}_i^n \in \Omega_f$ et posons simplement $\mathbf{U} = \mathbf{u}$. La contrainte $\mathbf{u}_i^{n,\pm} \in \Omega_f$ s'écrit

$$\begin{cases} 0 \le \rho_j^{n,\pm} \le R, \\ V_f \le v_f(\rho_j^{n,\pm}), \end{cases}$$

ou encore, par définition de v_f ,

$$0 \le \rho_j^{n,\pm} \le R\left(1 - \frac{V_f}{V}\right)$$

(rappelons que V_f et V sont des quantités positives). D'après la définition $\rho_j^{n,\pm} = \rho_j^n \pm \Delta \rho_j^n$, on montre facilement que ces deux inégalités se réécrivent

$$|\Delta \rho_j^n| \le \min\left(\rho_j^n, R\left(1 - \frac{V_f}{V}\right) - \rho_j^n\right).$$
(4.21)

Ainsi, le choix de l'incrément $\Delta \rho_j^n$ suggéré en (4.20) et la contrainte (4.21) conduisent immédiatement à la définition suivante que nous retenons :

$$\Delta \rho_j^n = \operatorname{sign}(\Delta \rho) \min\left(\rho_j^n, R\left(1 - \frac{V_f}{V}\right) - \rho_j^n, |\Delta \rho|\right), \quad \operatorname{avec} \quad \Delta \rho = \frac{1}{2} \operatorname{minmod}(\rho_{j+1}^n - \rho_j^n, \rho_j^n - \rho_{j-1}^n).$$

Supposons maintenant que $\mathbf{u}_{i}^{n} \in \Omega_{c}$. Les contraintes $\mathbf{u}_{i}^{n,\pm} \in \Omega_{c}$ sont équivalentes à

$$\begin{cases} 0 \le w_1(\rho_j^{n,\pm}, q_j^{n,\pm}) \le V_c, \\ W_2^- \le w_2(\rho_j^{n,\pm}, q_j^{n,\pm}) \le W_2^+, \end{cases}$$
(4.22)

où les invariants w_1 et w_2 sont définis par $w_1(\rho, q) = v_c(\rho, q)$ et $w_2(\rho, q) = (q-Q)/\rho$ (les constantes W_2^- et W_2^+ trouvent une définition naturelle à partir de celle de Ω_c). La nonlinéarité des fonctions w_1 et w_2 rend difficile l'étude de telles contraintes, c'est pourquoi nous proposons d'effectuer la reconstruction affine directement sur ces fonctions, et donc de poser $\mathbf{U} = (w_1, w_2)(\rho, q)$. Le choix des incréments $\Delta(w_1)_i^n$ et $\Delta(w_2)_i^n$ suggéré par (4.20) conduit alors à :

$$\begin{cases} (w_1)_j^{n,\pm} = (w_1)_j^n \pm \frac{1}{2} \operatorname{minmod}((w_1)_{j+1}^n - (w_1)_j^n, (w_1)_j^n - (w_1)_{j-1}^n), \\ (w_2)_j^{n,\pm} = (w_2)_j^n \pm \frac{1}{2} \operatorname{minmod}((w_2)_{j+1}^n - (w_2)_j^n, (w_2)_j^n - (w_2)_{j-1}^n), \end{cases}$$

ce qui assure tout de suite la satisfaction des contraintes (4.22) (par définition de la fonction minmod et puisque les états \mathbf{u}_{j-1}^n et \mathbf{u}_{j+1}^n sont supposés dans Ω_c).

Ordre deux en temps. Pour conclure, nous proposons une discrétisation en temps d'ordre deux, qui coïncide avec la méthode RK2 (Runge-Kutta deuxième ordre, où encore méthode de Heun) loin des transitions de phase. Le schéma MUSCL obtenu ci-dessus s'écrit

$$\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} - \mathbf{u}_{j}^{n} = \frac{\Delta x - \Delta x_{j}^{n}}{\overline{\Delta x_{j}^{n}}} \mathbf{u}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\overline{\Delta x_{j}^{n}}} (\overline{\mathbf{f}}^{-}(\mathbf{u}_{j}^{n,+},\mathbf{u}_{j+1}^{n,-}) - \overline{\mathbf{f}}^{+}(\mathbf{u}_{j-1}^{n,+},\mathbf{u}_{j}^{n,-})).$$

A partir de cette formule, nous définissons successivement deux approximations $\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1-}$ et $\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1-}$ de la mise à jour sur la cellule $\overline{\mathcal{C}}_{j}^{n}$ en posant

$$\begin{split} \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1=} - \mathbf{u}_{j}^{n} &= \frac{\Delta x - \overline{\Delta x}_{j}^{n}}{\overline{\Delta x}_{j}^{n}} \mathbf{u}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\overline{\Delta x}_{j}^{n}} (\overline{\mathbf{f}}^{-}(\mathbf{u}_{j}^{n,+},\mathbf{u}_{j+1}^{n,-}) - \overline{\mathbf{f}}^{+}(\mathbf{u}_{j-1}^{n,+},\mathbf{u}_{j}^{n,-})). \\ \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1-} - \mathbf{u}_{j}^{n+1=} &= \frac{\Delta x - \overline{\Delta x}_{j}^{n}}{\overline{\Delta x}_{j}^{n}} \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1=} - \frac{\Delta t}{\overline{\Delta x}_{j}^{n}} (\overline{\mathbf{f}}^{-}(\mathbf{u}_{j}^{n+1=,+},\mathbf{u}_{j+1}^{n+1=,-}) - \overline{\mathbf{f}}^{+}(\mathbf{u}_{j-1}^{n+1=,+},\mathbf{u}_{j}^{n+1=,-})). \end{split}$$

Ensuite, $\overline{\mathbf{u}}_{i}^{n+1}$ est défini à partir de ces deux approximations en posant simplement

$$\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} = \mathbf{u}_{j}^{n} + \frac{1}{2} [(\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} - \mathbf{u}_{j}^{n}) + (\overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} - \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1})]$$

Loin d'une transition de phase, nous avons $\overline{\Delta x}_j^n = \Delta x$ et $\sigma_{j+1/2}^n = 0$ de sorte que la formule ci-dessus se récrit de manière équivalente sous la forme

$$\begin{split} \overline{\mathbf{u}}_{j}^{n+1} &= \mathbf{u}_{j}^{n} &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} (\mathbf{f}(\mathbf{v}_{\mathbf{r}}(0^{+};\mathbf{u}_{j}^{n,+},\mathbf{u}_{j+1}^{n,-})) - \mathbf{f}(\mathbf{v}_{\mathbf{r}}(0^{+};\mathbf{u}_{j-1}^{n,+},\mathbf{u}_{j}^{n,-}))) \\ &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} (\mathbf{f}(\mathbf{v}_{\mathbf{r}}(0^{+};\mathbf{u}_{j}^{n+1=,+},\mathbf{u}_{j+1}^{n+1=,-})) - \mathbf{f}(\mathbf{v}_{\mathbf{r}}(0^{+};\mathbf{u}_{j-1}^{n+1=,+},\mathbf{u}_{j}^{n+1=,-}))), \end{split}$$

ce qui permet effectivement de retrouver la méthode d'intégration en temps RK2. La méthode proposée est donc formellement du second ordre en temps et en espace dans les zones régulières.

Illustration numérique. La figure 4.3 issue de [A3] illustre numériquement la validité de notre approche. Les profils de densité et vitesse sont représentés. Il s'agit d'un problème de Riemann pour lequel l'état initial gauche (respectivement droit) appartient à la phase congestionnée (resp. fluide). La solution contient donc une transition de phase. Celle-ci s'avère être très bien calculée, sans aucune diffusion numérique comme cela est attendu. Nous observons également l'apport de l'extension de la méthode à l'ordre deux sur la précision de la solution. Nous renvoyons le lecteur à [A3] pour d'autres illustrations numériques.



FIG. 4.3 – **Test E** : ρ (à gauche) et v (à droite)

4.2 Approximation numérique du modèle de Aw-Rascle

Nous nous intéressons dans cette section à l'approximation numérique des solutions du modèle de Aw-Rascle (4.3)-(4.4)-(4.5) introduit précédemment. Nous faisons le choix de ne décrire que très brièvement les travaux effectués dans ce contexte avec P. Goatin, et renvoyons le lecteur à l'article [A7] pour plus de détails. Cette option de présentation est motivée par l'approche numérique utilisée pour répondre à l'objectif de l'étude : elle est de type Transport-Equilibre et a déjà été expliquée dans un autre contexte dans le chapitre 3, section 3.1. Soulignons toutefois que le modèle considéré ici est un *système* de deux lois de conservation, par opposition à l'équation de conservation *scalaire* de la section 3.1.

Quelques propriétés du modèle. L'espace des phases associé au modèle de Aw-Rascle est donné par

$$\Omega = \left\{ (\rho, y) \in \mathbb{R}^2 \text{ avec } \rho \in [0, R], \ v \in [0, v_M], \ w \in [w_m, w_M] \right\},$$
(4.23)

où les trois paramètres v_M et w_m, w_M sont des valeurs limites pour v et w. Il s'agit d'un domaine invariant (voir par exemple [3] et [A7] pour plus de détails). On montre facilement que le système considéré est strictement hyperbolique pour $\rho > 0$, avec les valeurs propres $\lambda_1 = v - \rho p'(\rho)$ et $\lambda_2 = v$. Les champs caractéristiques associés à λ_1 et λ_2 sont respectivement vraiment non linéaire et linéairement dégénéré. Ce dernier développe donc des discontinuités de type contact se propageant à la vitesse v. Nous nous focalisons ici sur l'approximation numérique de ces discontinuités.

La problématique générale. Ces dix dernières années, l'approximation numérique des discontinuités de contact a fait l'objet de nombreux travaux pour des écoulements multifluides compressibles. Dans ce contexte, les schémas conservatifs classiques de type Godunov génèrent en effet des oscillations non physiques parfois très fortes à proximité des ondes de matière. Les solutions numériques deviennent alors peu précises pour des raffinements réalistes en maillage. Il se trouve que les mêmes pathologies apparaissent pour le modèle de Aw-Rascle (4.3).

De nombreuses solutions ont été proposées dans la littérature pour remédier à ce problème, voir par exemple les articles [58], [59], [1], [81], [41], [2], [4] et les références associées. D'une manière générale, le principe consiste à utiliser un schéma conservatif classique (de type Godunov par exemple) loin des discontinuités de contact, et à introduire un traitement nonconservatif dans les régions où les problèmes apparaissent. Cette modification vise à forcer la continuité des invariants associés aux discontinuités de contact au niveau numérique. Elle est souvent associée à une technique de seuillage qui permet de détecter la présence de discontinuités de contact dans les solutions, mais qui empêche dans le même temps la stricte constance des invariants le long des discontinuités de contact isolées. Les schémas obtenus donnent toutefois de très bons résultats et semblent converger vers la solution attendue en dépit de leur caractère non conservatif. Notons que ces stratégies sont habituellement construites sur des modèles impliquant au moins deux fluides, et semblent donc difficiles à adapter au modèle « mono-fluide »(4.3). Soulignons enfin qu'avec F. Coquel, nous travaillons actuellement sur une méthode mixte Lagrangienne/Eulérienne qui s'applique aux modèles n'impliquant qu'un seul fluide et qui respecte strictement la constance des invariants le long des ondes de matière ([C4]).

Travail effectué et résultats obtenus. Sur la base des travaux effectués dans [A2] (voir également [A8]), nous avons proposé un algorithme de type Transport-Equilibre pour assurer une bonne approximation des discontinuités de contact du modèle (4.3). L'objectif est de supprimer les oscillations importantes générées par la méthode de Godunov à proximité de ces discontinuités (voir les figures 4.4, 4.5 et 4.6 ci-dessous). Pour cela, nous traitons séparément les discontinuités de contact en utilisant une stratégie d'échantillonnage à la Glimm, et continuons à utiliser le schéma de Godunov pour les autres ondes. Comme cela est attendu, l'algorithme obtenu n'est pas *stricto sensu* conservatif, mais les tests effectués montrent que la convergence vers la solution exacte semble garantie. Par ailleurs, ce qui nous paraît à la fois très intéressant et nouveau dans ce contexte, c'est la possibilité de démontrer une propriété de consistance forte de la méthode, ainsi que la validité d'un principe du maximum sur les deux invariants v et w (voir les théorèmes 9 et 10 ci-dessous). *Ces propriétés assurent que les discontinuités de contact sont toujours calculées sans aucune oscillation* :

Théorème 9 (Consistance forte) Sous une condition CFL habituelle, le schéma proposé est consistant avec le modèle (4.3) au sens suivant :

(i) <u>Etat constant</u>: Supposons que $\mathbf{u} := \mathbf{u}_{j-1}^n = \mathbf{u}_j^n = \mathbf{u}_{j+1}^n$, alors $\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}$.

(ii) <u>Discontinuité de contact isolée</u> : Soient \mathbf{u}^l et \mathbf{u}^r deux états constants pouvant être joints par une discontinuité de contact. On pose $v := v^l = v^r$. Supposons que $\mathbf{u}_j^0 = \mathbf{u}^l$ si $j \leq 0$ et $\mathbf{u}_j^0 = \mathbf{u}^r$ si j > 0. Alors, le schéma proposé est équivalent au schéma de Glimm et converge donc vers la solution exacte donnée par $\mathbf{u}(x,t) = \mathbf{u}^l$ si x < vt et $\mathbf{u}(x,t) = \mathbf{u}^r$ sinon. Nous avons donc $\mathbf{u}_j^n \in {\mathbf{u}^l, \mathbf{u}^r} \forall j \in \mathbb{Z}$ et $\forall n \in \mathbb{N}$, ce qui signifie en particulier que la vitesse v reste constante comme cela est attendu : $v_j^n = v \forall j \in \mathbb{Z}$ et $\forall n \in \mathbb{N}$.

(iii) <u>1-onde isolée</u> : Supposons que \mathbf{u}_{j-1}^n et \mathbf{u}_j^n puissent être connectés par une 1-onde. Alors, le schéma proposé coïncide avec le schéma de Godunov et vérifie donc toutes les propriétés qui lui sont associées.

Théorème 10 (Principe du maximum) Sous une condition CFL habituelle, le schéma proposé vérifie les principes du maximum suivants pour tout $j \in \mathbb{Z}$ et tout $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{cases} \inf_{j \in \mathbb{Z}} v_j^0 \le v_j^n \le \sup_{j \in \mathbb{Z}} v_j^0, \\ \inf_{j \in \mathbb{Z}} (v_j^0 + p(\rho_j^0)) \le v_j^n + p(\rho_j^n) \le \sup_{i \in \mathbb{Z}} (v_j^0 + p(\rho_j^0)) \end{cases}$$

Les figures 4.4, 4.5 et 4.6 ci-dessous illustrent numériquement le bien fondé de notre algorithme en comparaison avec le schéma de Godunov. Il s'agit de trois problèmes de Riemann. Nous renvoyons le lecteur à [A7] pour plus de détails et pour des mesures quantitatives.



FIG. 4.4 – **Test 1** : ρ (à gauche), v (à droite) et $w = v + p(\rho)$ (en bas).



FIG. 4.5 – **Test 2** : ρ (à gauche), v (à droite) et $w = v + p(\rho)$ (en bas).



FIG. 4.6 – **Test 3** : ρ (à gauche), v (à droite) et $w = v + p(\rho)$ (en bas).

Chapitre 5

Couplage de modèles en thermohydraulique

Ce chapitre est consacré au couplage de modèles en thermohydraulique. Je travaille sur cette problématique depuis la fin de l'année 2003 dans le cadre d'un contrat de collaboration entre le laboratoire Jacques-Louis Lions et le CEA Saclay. Ce contrat est dirigé par F. Coquel et implique d'autres membres du laboratoire : E. Godlewski, F. Lagoutière, P.A. Raviart et N. Seguin, mais aussi A. Ambroso (Ingénieur de recherche au CEA), B. Boutin et T. Galié (étudiants en thèse), et J. Segré (assistant scientifique au CEA).

Les contributions apportées par le groupe de travail aux questions posées par ce vaste sujet de recherche sont nombreuses. Citons tout d'abord : [A5], [A9], [A1], [A6], mais aussi [47], [48] (ces deux articles sont antérieurs à la création du groupe de travail et je ne fais pas partie des auteurs). Plusieurs présentations orales ont également été données lors de conférences nationales ou internationales, débouchant sur la rédaction d'actes de congrès : [B10], [B11], [B9], [B8], [B7], [B6], [B2], [A21].

Le plan de ce chapitre est le suivant. Nous exposons la problématique du couplage. Nous passons ensuite en revue quelques travaux effectués. Nous terminons en présentant certains travaux en cours et des perspectives de recherche.

5.1 Introduction générale

Le problème de couplage de modèles qui nous intéresse apparaît lorsqu'un phénomène physique est modélisé d'une manière différente dans deux régions de l'espace au moins. Ce type de modélisation peut être justifié lorsque l'on cherche par exemple à simuler numériquement un système complexe. Le souci de précision nous amène en effet vers l'utilisation de modèles fins permettant une représentation précise de certains phénomènes physiques, alors que dans le même temps, la notion de coût nous incite à utiliser des modèles plus grossiers. Dans ce contexte, la description complète du dispositif s'obtient par un couplage des différents modèles au niveau d'interfaces fixes. Celles-ci sont généralement non physiques au sens où elles ne délimitent pas nécessairement rigoureusement les caractéristiques de l'écoulement considéré.

Les problèmes de couplage interviennent naturellement dans de nombreuses applications physiques. En thermohydraulique par exemple, différents modèles peuvent être utilisés pour décrire l'écoulement du fluide de refroidissement dans les composantes du circuit primaire d'un réacteur à eau sous pression : *e.g.*, un modèle diphasique à six ou sept équations dans les canalisations, et un modèle de mélange traduisant la conservation de la masse, de la quantité de mouvement totale et de l'énergie totale dans le cœur du réacteur. En trafic routier, la modélisation des jonctions implique également plusieurs modèles afin de prendre en compte les caractéristiques spécifiques des différentes routes (densité maximale possible, vitesse maximale autorisée...). Voir par exemple [28], [43], [21], [20]... Dans le cadre du programme de recherche mis en place avec le CEA, nous nous sommes focalisés sur les applications visant les réacteurs nucléaires. Un des objectifs du projet NEPTUNE (projet de codéveloppement EDF, CEA, IRSN, FRAMATOME-ANP) est en effet le couplage de plusieurs codes de calculs pour simuler le fonctionnement d'un réacteur dans sa globalité. Les codes sont associés à différentes régions de l'espace et sont basés sur des modèles (et donc des méthodes numériques) différents. Il est nécessaire de comprendre comment ces systèmes peuvent être liés entre eux, ce qui soulève des questions intéressantes mais difficiles. D'un point de vue théorique tout d'abord, il faut fermer le problème c'est-à-dire définir des conditions dites de transmission (ou de couplage) permettant de préciser les informations devant être échangées par deux systèmes au niveau d'une interface. D'un point de vue numérique, il s'agit ensuite de forcer la validité des conditions de transmission au niveau discret. Nous mettons tout de suite en évidence le fait que la définition des conditions de couplage doit résulter d'un choix issu de considérations physiques portant par exemple sur la conservation ou la continuité de certaines variables. On parlera parfois de modèle interfacial.

La complexité du problème posé nous a conduit à adopter une décomposition en sous-problèmes. En particulier, notre étude s'est restreinte au cas d'une seule interface de couplage et en une dimension d'espace (voir [52], [55] pour un couplage impliquant des dimensions d'espace différentes). Ici, par souci de clarté nous supposerons de plus que la taille (*i.e.* le nombre d'inconnues) des systèmes est identique de part et d'autre de l'interface (voir [A9] pour un couplage de modèles de tailles différentes).

Les problèmes de couplage considérés sont posés comme suit. On suppose que l'écoulement est idéalement décrit par un système (S_1) dans le domaine $\mathcal{D}_1 = \{x < 0, t > 0\}$ et par un système (S_2) dans le domaine $\mathcal{D}_2 = \{x > 0, t > 0\}$. On cherche une fonction $\mathbf{u} : (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \mapsto \mathbf{u}(x, t) \in \Omega \in \mathbb{R}^n, n \ge 1$, solution de

$$(S_1) \quad : \quad \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) = 0, \quad (x, t) \in \mathcal{D}_1, \tag{5.1}$$

$$(S_2) \quad : \quad \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) = 0, \quad (x, t) \in \mathcal{D}_2, \tag{5.2}$$

et vérifiant la condition initiale

$$\mathbf{u}(x,0) = \mathbf{u}_0(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$
(5.3)

Nous verrons plus loin que des termes sources \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 non nuls pourront être pris en compte. Nous supposons que les fonctions flux $\mathbf{f}_1 : \Omega \to \mathbb{R}$ et $\mathbf{f}_2 : \Omega \to \mathbb{R}$ sont régulières et que les systèmes (S_1) et (S_2) sont hyperboliques et bien posés sur l'espace des états admissibles Ω .

Les modèles d'interface proposés en x = 0 peuvent essentiellement être regroupés en deux grands groupes. Le premier, connu sous le nom de couplage par état, vise à imposer la continuité d'un jeu de variables $\mathbf{v} = \varphi(\mathbf{u})$ au niveau de l'interface de couplage. Elle s'écrit

$$\mathbf{v}(0^{-},t) = \mathbf{v}(0^{+},t),\tag{5.4}$$

avec $\mathbf{v}(0^-, t) = \varphi_1(\mathbf{u}(0^-, t))$ et $\mathbf{v}(0^+, t) = \varphi_2(\mathbf{u}(0^+, t))$. Ici, $\mathbf{u}(0^-, t)$ (respectivement $\mathbf{u}(0^+, t)$) représente la trace à gauche (resp. à droite) de la solution du problème, et φ_1 et φ_2 définissent le changement de variable admissible $\mathbf{u} \mapsto \mathbf{v}$ pour les systèmes (S_1) et (S_2). Le deuxième, connu sous le nom de couplage par flux, cherche à assurer la continuité du flux à la traversée de l'interface :

$$\mathbf{f}_1(\mathbf{u}(0^-, t)) = \mathbf{f}_2(\mathbf{u}(0^+, t)).$$
(5.5)

Il s'agit de garantir la conservation de **u** sur tout le domaine (et non plus seulement dans les deux régions correspondant aux x < 0 et x > 0).

Le couplage par état. La nature hyperbolique des systèmes considérés ne permet pas, en général, d'imposer la continuité au sens fort des traces de la solution. En d'autres termes, la condition (5.4) est trop restrictive et doit être affaiblie. Pour cela, nous considérons les deux modèles situés de part et d'autre de l'interface comme deux problèmes aux limites distincts, et suivons le principe des conditions aux limites faibles proposé par Dubois et LeFloch [39] (voir aussi par exemple [47], [48], [A5], [A1]). Pour i = 1, 2, on note $\mathbf{u}_i(x/t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r)$ la solution du problème de Riemann

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) = 0, & x \in \mathbb{R}, \ t > 0, \\ \mathbf{u}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{si} \quad x < 0, \\ \mathbf{u}_r & \text{si} \quad x > 0, \end{cases} \tag{5.6}$$

et par $\mathbf{v}_i(x/t; \mathbf{v}_l, \mathbf{v}_r)$ la solution de ce problème exprimée en variable \mathbf{v} , *i.e.*

$$\mathbf{v}_i(x/t; \mathbf{v}_l, \mathbf{v}_r) = \varphi_i(\mathbf{u}_i(x/t; \varphi_i^{-1}(\mathbf{v}_l), \varphi_i^{-1}(\mathbf{v}_r))).$$
(5.7)

Nous définissons ensuite pour les systèmes (S_1) et (S_2) les ensembles des traces admissibles en 0⁻ et 0⁺ pour une condition aux limites $\mathbf{b} \in \Omega$ donnée :

$$\mathcal{O}_1(\mathbf{b}) = \left\{ \mathbf{v}_1(0^-; \mathbf{v}, \mathbf{b}); \mathbf{v} \in \Omega \right\}$$
(5.8)

 \mathbf{et}

$$\mathcal{O}_2(\mathbf{b}) = \left\{ \mathbf{v}_2(0^+; \mathbf{b}, \mathbf{v}); \mathbf{v} \in \Omega \right\}.$$
(5.9)

La formulation faible de la condition (5.4) s'écrit alors

$$\begin{cases} \mathbf{v}(0^{-},t) \in \mathcal{O}_1(\mathbf{v}(0^{+},t)), \\ \mathbf{v}(0^{+},t) \in \mathcal{O}_2(\mathbf{v}(0^{-},t)). \end{cases}$$
(5.10)

Cette méthode de couplage en variable \mathbf{v} assure « dès que possible »la continuité du vecteur \mathbf{v} , mais ce n'est pas toujours le cas. Lorsque l'interface de couplage devient *caractéristique*, c'est-à-dire lorsque les vitesses caractéristiques des systèmes (S_1) et (S_2) peuvent s'annuler, certaines (ou la totalité) des composantes du vecteur \mathbf{v} peuvent présenter une discontinuité sans pour autant violer la condition de couplage (5.10). Néanmoins, il est clair qu'un profil uniforme (*i.e.* constant) en \mathbf{v} est une solution stationnaire vérifiant (5.10) du problème de couplage. Enfin, notons qu'en pratique un choix astucieux du vecteur \mathbf{v} peut permettre d'assurer la continuité de certaines composantes du flux (voire de toutes), et donc la conservation sur tout le domaine de certaines composantes du vecteur \mathbf{u} .

Le couplage par flux. Imposer la continuité de la totalité du flux à la traversée de l'interface peut s'avérer naturel d'un point de vue physique. Le problème de couplage correspondant s'écrit alors sous la forme du modèle global suivant :

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}, x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \ t > 0,$$
(5.11)

avec

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}, x) = (1 - H(x))\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + H(x)\mathbf{f}_2(\mathbf{u}),$$

où H est la fonction de Heaviside. A son tour, la continuité du flux (5.5) n'implique pas nécessairement la continuité du vecteur des inconnues conservatives **u**. Cette condition de couplage n'a pas besoin d'être affaiblie.

L'approche numérique. Pour aborder numériquement le problème du couplage, on se place dans le contexte de la méthode des volumes finis. On définit avec des notations classiques les cellules du maillage par $C_{i+1/2} = [x_i, x_{i+1}], x_i = i\Delta x$, de sorte que l'interface de couplage soit naturellement placée en x = 0. Supposons connue à un instant $t^n \ge 0$ la solution approchée $\mathbf{u}_{\Delta x}(x, t^n)$. Pour faire avancer cette solution jusqu'à l'instant t^{n+1} , on se donne tout d'abord deux fonctions flux numériques $\mathbf{g_1}$ et $\mathbf{g_2}$ consistantes avec $\mathbf{f_1}$ et $\mathbf{f_2}$. On considère ensuite les schémas conservatifs à trois points suivants (sans aucune restriction) pour approcher les solutions des systèmes (S_1) et $(S_2) \ll$ loin »de l'interface de couplage :

$$\mathbf{u}_{j-1/2}^{n+1} = \mathbf{u}_{j-1/2}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{g}_{1,j} - \mathbf{g}_{1,j-1}) \quad \underline{j \leq 0},$$

$$\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+1} = \mathbf{u}_{j+1/2}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{g}_{2,j+1} - \mathbf{g}_{2,j}), \quad \underline{j \geq 0},$$

(5.12)

avec pour tout $j \neq 0$:

$$\mathbf{g}_{1,j} = \mathbf{g}_1(\mathbf{u}_{j-1/2}^n, \mathbf{u}_{j+1/2}^n), \quad \mathbf{g}_{2,j} = \mathbf{g}_2(\mathbf{u}_{j-1/2}^n, \mathbf{u}_{j+1/2}^n).$$
 (5.13)

Au niveau numérique, le couplage des systèmes (S_1) et (S_2) se fait par l'évaluation des flux $\mathbf{g}_{1,0}$ et $\mathbf{g}_{2,0}$. Il s'agit de prendre en compte les conditions de couplage théoriques choisies, c'est-à-dire par exemple (5.10) pour le couplage par état et (5.5) pour le couplage par flux.

Concernant le couplage par état, l'objectif étant d'assurer autant que possible la continuité du vecteur $\mathbf{v} = \varphi(\mathbf{u})$, une idée naturelle consiste à faire en sorte que chaque système transmette à son homologue son vecteur \mathbf{v} . Cela revient à poser

$$\mathbf{g}_{1,0} = \mathbf{g}_1(\mathbf{u}_{-1/2}^n, \varphi_1^{-1}(\varphi_2(\mathbf{u}_{1/2}^n))), \quad \mathbf{g}_{2,0} = \mathbf{g}_2(\varphi_2^{-1}(\varphi_1(\mathbf{u}_{-1/2}^n)), \mathbf{u}_{1/2}^n).$$
(5.14)

Remarquons que puisqu'en général $\mathbf{g}_1(\mathbf{u}_{-1/2}^n, \varphi_1^{-1}(\varphi_2(\mathbf{u}_{1/2}^n))) \neq \mathbf{g}_2(\varphi_2^{-1}(\varphi_1(\mathbf{u}_{-1/2}^n)), \mathbf{u}_{1/2}^n)$, le schéma numérique obtenu n'est pas conservatif. En revanche, il préserve par construction les profils constants en variable **v**. Voir par exemple [47], [48], [A5], [B6], [A6] pour une étude théorique de cette méthode, et [B11], [A9] pour une approche plus numérique.

Pour ce qui est du couplage par flux, il s'agit de définir un unique flux numérique \mathbf{g}_0 sur l'interface de couplage, *i.e.*

$$\mathbf{g}_0 = \mathbf{g}_{1,0} = \mathbf{g}_{2,0},$$

afin d'assurer la conservation du vecteur **u**. L'approche souvent adoptée pour définir ce flux consiste à introduire un modèle de relaxation global *conservatif* basé sur une variable « couleur »Y. Par exemple, dans le cadre du couplage de deux systèmes de la dynamique des gaz dont les lois de pression diffèrent, le système de relaxation proposé s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t \rho E + \partial_x (\rho E u + p u) = 0, \\ \partial_t \rho Y + \partial_x \rho Y u = \lambda \rho (Y_0 - Y). \end{cases}$$
(5.15)

La loi de pression p est donnée par $p = (1 - Y)p_1 + Yp_2$ et on pose

$$Y_0 = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0, \\ 1 & \text{si} \quad x > 0. \end{cases}$$

On remarque que dans la limite $\lambda \to \infty$ du paramètre de relaxation, ce système converge (au moins formellement) vers le problème de couplage posé. L'obtention du flux numérique \mathbf{g}_0 s'obtient alors en appliquant une méthode conservative au système (5.15), et en prenant les trois premières composantes du flux numérique correspondant. Nous renvoyons par exemple le lecteur à [B11], [B6], [A6].

5.2 Travaux effectués

Les paragraphes suivants résument brièvement certains travaux effectués.

L'article [A5] (voir aussi [B7]) considère le couplage de deux systèmes de la dynamique des gaz écrits en coordonnées Lagrangiennes, à savoir le p-système et/ou le système d'Euler « complet », avec des lois d'état différentes. Les valeurs propres de ces systèmes ont la particularité d'être soit signées, soit nulle pour l'une d'entre elles dans le système d'Euler. La géométrie des caractéristiques est donc entièrement connue au niveau de l'interface de couplage. Cette propriété est à la base des résultats obtenus dans les problèmes considérés : couplage de deux p-systèmes, de deux systèmes d'Euler ou encore d'un p-système et d'un système d'Euler. Cet article propose également un cadre théorique basé sur le formalisme de Després [36] pour le couplage de systèmes Lagrangiens plus généraux que ceux cités ci-dessus. L'article [A1] considère le couplage de deux systèmes de la dynamique des gaz en coordonnées Eulériennes. La continuité d'un vecteur \mathbf{v} est imposée au niveau de l'interface de coulage au sens faible (5.10). Nous nous focalisons sur la résolution du problème de Riemann. Il s'agit d'une question mathématique particulièrement difficile dans la mesure où la géométrie des ondes n'est plus fixée a priori comme dans le cas Lagrangien. Notre contribution donne la forme de toutes les solutions \mathbf{v} -continues au niveau de l'interface, prouve l'existence et l'unicité d'une solution subsonique, et considère la forme des solutions \mathbf{v} -discontinues. En particulier, le cas de deux états initiaux associés à une onde de matière (*i.e.* ayant même vitesse) est traité de manière quasiment exhaustive.

L'article [B11] (voir aussi [B10]) aborde ce problème de couplage d'un point de vue numérique. Plusieurs stratégies sont envisagées pour le couplage par état et le couplage par flux. Une attention particulière est portée sur la capacité (ou non) des méthodes à préserver les solutions stationnaires du modèle.

L'article [A9] (voir aussi [B9], [B8], [B2]) considère le couplage numérique de deux modèles homogènes utilisés pour décrire les écoulements diphasiques. Il s'agit plus précisément du modèle HEM (pour Homogeneous Equilibrium Model) à trois équations et du modèle HRM (Homogeneous Relaxation Model) à quatre équations. Une des particularités de ce problème est donc d'impliquer des modèles de taille différentes. Une autre caractéristique est la présence d'un terme source de relaxation non nul pour le modèle HRM (*i.e.* \mathbf{s}_1 ou \mathbf{s}_2 en reprenant les notations introduites plus haut). Il traduit un déséquilibre des potentiels chimiques entre les phases et devient nul lorsque le temps devient grand ($t \to +\infty$). Sous une hypothèse de compatibilité des modèles HEM et HRM (on suppose que le modèle HEM est la limite formelle du modèle HRM lorsque l'équilibre des potentiels chimiques est supposé), nous proposons et étudions plusieurs méthodes de couplage numériques. Les stratégies proposées diffèrent par les propriétés de conservation et/ou de continuité satisfaites par certaines grandeurs au niveau de l'interface de couplage, mais aussi par leur capacité à préserver les solutions stationnaires.

L'article [B6] (voir aussi [A6]) aborde le problème du couplage en introduisant un modèle de relaxation pour chacun des modèles devant être couplés. Ces modèles de relaxation sont construits dans l'esprit de ce qui a été fait dans le chapitre 2. En adoptant cette approche, on observe en particulier que la transmission d'un jeu de variables *adhoc* \mathbf{v} dans le couplage des systèmes de relaxation permet de sélectionner une solution conservative du problème de couplage initial, *i.e.* vérifiant (5.5).

L'article [A21] propose de modéliser la condition de couplage interfacial choisie (i.e. par exemple(5.10) ou (5.5)) par le biais d'une mesure de Dirac concentrée sur l'interface. Le problème de couplage s'écrit alors

$$\partial_t \mathbf{u} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{u}, x) = \mathcal{M}(t) \delta_{x=0}, \quad x \in \mathbb{R}, \ t > 0,$$
(5.16)

avec

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}, x) = (1 - H(x))\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + H(x)\mathbf{f}_2(\mathbf{u})$$

où H est encore la fonction de Heaviside. Dans ce travail, la masse $\mathcal{M}(t)$ est supposée connue et prescrite par la physique que l'on cherche à représenter. Elle est par exemple nulle dans le cas d'un couplage conservatif (condition (5.5)). Dans le cas général, elle traduit la perte de conservation du vecteur **u** au niveau de l'interface de couplage. Nous proposons deux méthodes pour approcher numériquement le problème (5.16). La première est basée sur la résolution de deux problèmes de Riemann locaux de part et d'autre de l'interface. La deuxième est basée sur une approche par relaxation. Une fois de plus, nous portons une attention particulière au traitement des solutions stationnaires.

5.3 Travaux en cours et perspectives

Notre objectif à moyen terme est le couplage d'un modèle de drift à quatre équations et d'un modèle diphasique à deux vitesses et deux pressions (modèle dit à sept équations). Afin de définir des conditions de couplage raisonnables pour ces deux modèles, nous travaillons actuellement sur le comportement asymptotique en temps des solutions du modèle à sept équations. Différents termes sources sont pris en compte : relaxation sur l'écart des pressions, force de traînée et forces extérieures (comme la gravité par exemple). En utilisant des développements de Chapman-Enskog, nous montrons comment faire le lien avec un modèle de drift dont la loi de fermeture est algébrique ou de type Darcy. Du point de vue numérique, notre travail se concentre sur la mise en place de méthodes *asymptotic preserving* pour la discrétisation du modèle à sept équations.

Bibliographie

- [1] R. ABGRALL, How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi-conservative approach, J. Comput. Phys., vol 125, (1996), pp 150–160.
- [2] R. ABGRALL ET S. KARNI, Computations of compressible multifluids, J. Comput. Phys., vol 169, (2001), pp 594–623.
- [3] A. AW ET M. RASCLE, Resurrection of "second order" models of traffic flow, SIAM J. Appl. Math., vol 60, (2000), pp 916–938.
- [4] T. BARBERON, P. HELLUY ET S. ROUY, *Practical computation of axisymmetrical multifluid* flows, International Journal of Finite Volumes, vol 1, (2003), pp 1–34 (electronic).
- [5] M. BAUDIN, C. BERTHON, F. COQUEL, R. MASSON ET Q.H. TRAN A relaxation method for two-phase flow models with hydrodynamic closure law Numer. Math., vol 99(3), (2005), pp. 411–440
- [6] N. BEDJAOUI ET P.G. LEFLOCH, Diffusive-dispersive traveling waves and kinetic relations I. Non-convex hyperbolic conservation laws, J. Differential Equations, vol 178, (2002), pp 574-607.
- [7] N. BEDJAOUI ET P.G. LEFLOCH, Diffusive-dispersive traveling waves and kinetic relations II. A hyperbolic-elliptic model of phase transitions dynamics, Proc. Royal Soc. Edinburgh, vol 132A, (2002), pp 545-565.
- [8] N. BEDJAOUI AND P.G. LEFLOCH, Diffusive-dispersive traveling waves and kinetic relations III. An hyperbolic model from nonlinear elastodynamics, Ann. Univ. Ferrara Sc. Mat., vol 47, (2002), pp 117-144.
- [9] C. BERTHON, Contribution à l'analyse numérique des équations de Navier-Stokes compressibles à deux entropies spécifiques. Application à la turbulence compressible, Thèse de l'Université Paris VI, 1999.
- [10] C. BERTHON Numerical approximations of the 10-moment Gaussian closure, Math. Comput., vol 75, (2006), pp. 1809–1831.
- [11] C. BERTHON, Why the MUSCL-Hancock scheme is L¹-stable, Numer. Math., vol 104, (2006), pp. 27–46.
- [12] C. BERTHON, M. BREUSS ET M.O. TITEUX, A relaxation scheme for pressureless gas dynamics, Num. Method Partial Diff. Equations, vol 22, (2006), pp. 484–505.
- [13] C. BERTHON ET F. COQUEL, Nonlinear projection methods for multi-entropies Navier-Stokes systems, Innovative methods for numerical solutions of partial differential equations (Arcachon, 1998), World Sci. Publishing, River Edge, NJ, pp 278–304, 2002.
- [14] C. BERTHON ET F. COQUEL, Nonlinear projection methods for multi-entropies Navier-Stokes systems, Math. Comput., vol 76, (2007), pp. 1163-1194.
- [15] S. BIANCHINI, B. HANOUZET ET R. NATALINI, Asymptotic behavior of smooth solutions for partially dissipative hyperbolic systems with a convex entropy, Communications in Pure and Applied Mathematics, published online : 11 Jun 2007, (2007).
- [16] F. BOUCHUT, Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for source, Frontiers in Mathematics Series, Birkhauser, 2004.

- F. BOUCHUT, A reduced stability condition for nonlinear relaxation to conservation laws, J. Hyp. Diff. Eq., vol 1(1), (2004), pp. 149–170.
- [18] F. BOUCHUT, An antidiffusive entropy scheme for monotone scalar conservation laws, J. Sci. Comput., vol 21(1), (2004), pp. 1–30.
- [19] B. BOUTIN, F. COQUEL ET E. GODLEWSKI, Dafermos regularization for the interface coupling of conservation laws, Proceedings of the Eleventh International Conference on Hyperbolic Problems. Theory, Numerics, Applications, Lyon, (2006)
- [20] G. BRETTI, R. NATALINI ET B. PICCOLI, Numerical Approximations of a Traffic Flow Model on Networks, Networks and Heterogeneous Media, vol. 1(1), (2006), pp. 57–84.
- [21] G. BRETTI, R. NATALINI ET B. PICCOLI, A Fluid-Dynamic Traffic Model on Road Networks, Archives of Computational Methods in Engineering, vol. 14, (2007), pp. 139–172.
- [22] C. CERCIGNAGNI, The Boltzmann Equation and Its Applications, Springer-Verlag, 1988.
- [23] G.Q. CHEN, D. LEVERMORE ET T.P. LIU, Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy, Comm. Pure Appl. Math., vol. 48(7), (1995), pp. 787–830.
- [24] G.Q. CHEN ET T.P. LIU, Zero relaxation and dissipation limits for hyperbolic conservation laws, Comm. Pure Appl. Math., vol 46, (1993), pp. 755–781.
- [25] J.F. COLOMBEAU ET A.Y. LEROUX, Multiplications of distributions in elasticity and hydrodynamics, J. Math. Phys., vol 29, (1988), pp 315-319.
- [26] R.M. COLOMBO, A 2 × 2 hyperbolic traffic flow model, Math. Comput. Modelling, vol 35, (2002), pp 683–688.
- [27] R.M. COLOMBO, Hyperbolic phase transitions in traffic flow, SIAM J. Appl. Math., vol 63(2), (2002), pp 708–721.
- [28] R.M. COLOMBO ET M. GARAVELLO, A well-posed Riemann problem for the p-system at a junction, Netw. Heterog. Media, vol 1(3), (2006), pp 495-511.
- [29] R.M. COLOMBO ET M.D. ROSINI, Pedestrian Flows and Nonclassical Shocks, Mathematical Methods in the Applied Sciences, vol 28(13), (2005), pp 1553-1567.
- [30] F. COQUEL, E. GODLEWSKI, A. IN, B. PERTHAME ET P. RASCLE, Some new Godunov and relaxation methods for two phase flows, Proceedings of the International Conference on Godunov methods : theory and applications, Kluwer Academic, Plenum Publisher, 2001.
- [31] F. COQUEL ET C. MARMIGNON, Simulation numérique d'écoulements faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique, Rapport de l'ONERA RSF. no 6/1929AY, 1993.
- [32] F. COQUEL ET C. MARMIGNON, A Roe-type Linearization for a Conservative and Consistent Reformulation of the Euler Equations for Weakly Ionized Gases, Congrès Enumath, 1995.
- [33] C. DAFERMOS, Hyperbolic conservation laws in continuum physics, second edition, Springer, 2005.
- [34] C.F. DAGANZO, Requirem for high-order fluid approximations of traffic flow, Trans. Res., vol 29B(4), (1995), pp 277–287.
- [35] G. DAL MASO, P.G LEFLOCH ET F. MURAT, Definition and weak stability of a non conservative product, J. Math. Pures Appli., vol 74, (1995), pp 483-548.
- [36] B. DESPRÉS, Lagrangian systems of conservation laws. Invariance properties of Lagrangian systems of conservation laws, approximate Riemann solvers and the entropy condition, Numer. Math., vol 89(1), (2001), pp 99–134.
- [37] B. DESPRÉS ET F. LAGOUTIÈRE, Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics, SIAM J. Sci. Comput., vol 16, (2001), pp 479–524.
- [38] J.S. DRAKE, J.L. SCHOFER ET A.D. MAY, A statistical analysis of speed density hypothesis, Highway Research Record, vol 154, (1967), pp 53–87.
- [39] F. DUBOIS ET P.G. LEFLOCH, Boundary conditions for nonlinear hyperbolic systems of conservation laws, J. Differential Equations, vol 71, (1988), pp 93–122.

- [40] R. EYMARD, T. GALLOUËT ET R. HERBIN, *Finite Volume Methods*, Handbook of Numerical Analysis, Vol. VII, p. 713-1020. Editors : P.G. Ciarlet and J.L. Lions, 2000.
- [41] R.P. FEDKIW, T. ASLAM, B. MERRIMAN ET S. OSHER, A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method), J. Comput. Phys., vol 152, (1999), pp 457–492.
- [42] T. GALLOUËT, J.M. HÉRARD ET N. SEGUIN, Numerical modeling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach, M3AS, vol 14(5), (2004), pp 663–700.
- [43] M. GARAVELLO ET B. PICCOLI, Traffic flow on networks, Applied Math Series n. 1, American Institute of Mathematical Sciences, 2006.
- [44] P. GOATIN, The Aw-Rascle vehicular traffic flow model with phase transitions, Math. Comput. Modelling., (2006), pp 287–303.
- [45] E. GODLEWSKI ET P.A. RAVIART, Hyperbolic systems of conservation laws, Ellipse, 1991.
- [46] E. GODLEWSKI ET P.A. RAVIART, Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws, Springer-Verlag, 1996.
- [47] E. GODLEWSKI ET P.A. RAVIART, The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. I. The scalar case., Numer. Math., vol 97(1), (2004), pp 81– 130.
- [48] E. GODLEWSKI, K.C. LETHANH ET P.A. RAVIART, The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. II. The case of systems, M2AN Math. Model. Numer. Anal., vol 39(4), (2005), pp 649–692.
- [49] B. HANOUZET ET R. NATALINI, Global existence of smooth solutions for partially dissipative hyperbolic systems with a convex entropy, Arch. Ration. Mech. Anal., vol 169, (2003), pp. 89-117.
- [50] B.T. HAYES ET P.G LEFLOCH, Nonclassical shocks and kinetic relations : Scalar conservation laws, Arch. Rational Mech. Anal., vol 139, (1997), pp 1-56.
- [51] B.T. HAYES ET P.G LEFLOCH, Nonclassical shocks and kinetic relations : Finite difference schemes, SIAM J. Numer. Anal., vol 35, (1998), pp 2169-2194.
- [52] J.M. HÉRARD ET O. HURISSE, Coupling one and two dimensional models through a thin interface, Proceedings of the 7th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Paper 05-4718 (2005)
- [53] C. HIRSCH, Numerical computation of internal and external flows, John Wiley and Sons, 1990.
- [54] T.Y. HOU ET P.G. LEFLOCH, Why nonconservative schemes converge to wrong solutions : error analysis, Math. of Comp., vol 62(206), (1994), pp 497-530.
- [55] O. HURISSE, Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques, Thèse de l'Université de Provence, Aix-Marseille I, 2006.
- [56] M. ISHII, Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flows, Eyrolles, Paris, (1975)
- [57] S. JIN ET Z. XIN, The relaxation schemes for systems of conservation laws in arbitrary space dimensions, Comm. Pure Appl. Math., vol 48, (1995), pp. 235–276.
- [58] S. KARNI, Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm, J. Comput. Phys., vol 47, (1994), pp 1115–1145.
- [59] S. KARNI, Hybrid multifluid algorithms, SIAM J. Sci. Comput., vol 17, (1994), pp 1019– 1039.
- [60] B. KERNER, The physics of traffic, Springer-Verlag, 2004.
- [61] F. LAGOUTIÈRE, Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides compressibles à plusieurs constituants, Thèse de l'Université Paris VI, 2000.
- [62] F. LAGOUTIÈRE, Stability of reconstruction schemes for scalar hyperbolic conservation laws, à paraître dans Communications in Mathematical Sciences.

- [63] F. LAGOUTIÈRE, Non-dissipative entropic discontinuous reconstruction schemes for hyperbolic conservation laws, soumis (2007)
- [64] P.D. LAX, Hyperbolic systems of conservation laws, II, Comm. Pure Appl. Math., vol 10, (1957), pp 537-566.
- [65] P.D. LAX, Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves, CBMS Monograph, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1973.
- [66] P.G. LEFLOCH, Hyperbolic Systems of Conservation Laws : The theory of classical and nonclassical shock waves, E.T.H. Lecture Notes Series, Birkhäuser, 2002.
- [67] P.G. LEFLOCH, Shock waves for nonlinear hyperbolic systems in nonconservative form, Institute for Math. and its Appl., Minneapolis, Preprint # 593, (1989)
- [68] P.G. LEFLOCH ET C. ROHDE, High-order schemes, entropy inequalities, and nonclassical shocks, SIAM J. Numer. Anal., vol 37, (2000), pp 2023-2060.
- [69] M.J. LIGHTHILL ET G.B. WHITHAM, On kinematic waves. II. A theory of traffic flow on long crowded roads, Proc. Royal Soc. London, Ser. A., vol 229, (1955), pp 317-345.
- [70] T.P. LIU, Hyperbolic systems with relaxation, Comm. Math. Phys., vol 57, (1987), pp. 153– 175.
- [71] T.P. LIU, Admissible solutions of hyperbolic conservation laws, Amer. Math. Soc., vol 30, (1981).
- [72] R. MENIKOFF ET B. PLOHR, The Riemann problem for fluid flow of real materials, Rev. Mod. Phys., vol 61, (1989), pp. 75–130.
- [73] W.A. MÜLDER ET B. VAN LEER, Experiments with implicit upwind methods for the Euler equations, J. Comp. Phys., vol 59, (1985), pp. 232–246.
- [74] R. NATALINI, Recent results on hyperbolic relaxation problems, Analysis of systems of conservation laws (Aachen, 1997), Chapman & Hall, 1999.
- [75] H.J. PAYNE, Models of freeway traffic and control, Simulation Council Proc.28, (1971), pp 51–61.
- [76] L. PERKO, Differential equations and dynamical systems, Springer-Verlag, 1991.
- [77] V.H. RANSOM, Numerical benchmark tests, Multiphase science and technology, Vol. 3, edited by G. F. Hewitt, J.M. Delhaye, N. Zuber, Washington (USA) : Hemisphere/Springer (1987), p. 468-470.
- [78] P.A. RAVIART ET L. SAINSAULIEU, A nonconservative hyperbolic system modeling spray dynamics. I. Solution of the Riemann problem, Math. Models Methods Appl. Sci., vol 5(3), (1995), pp. 297–333.
- [79] P.I. RICHARDS, Shock waves on the highway, Operations Res., vol 4, (1956), pp 42-51.
- [80] P.L. ROE, Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference scheme, J. Comp. Phys., vol 43, (1981), pp. 357–372.
- [81] R. SAUREL ET R. ABGRALL, A simple method for compressible multifluid flows, SIAM J. Sci. Comput., vol 21, (1999), pp 1115–1145.
- [82] D. SERRE, Systèmes de lois de conservation, Diderot Editeur, Arts et Sciences, 1996.
- [83] T. SOUBRIE, Prise en compte de l'ionisation et du rayonnement dans les écoulements de rentrée terrestre et martienne, Thèse de Doctorat de SUPAERO, 2006.
- [84] I. SULICIU, On the thermodynamics of fluids with relaxation and phase transitions. I-Fluids with relaxation, Int. J. Eng. Sci., vol 36, (1998), pp. 921–947.
- [85] E.F. TORO, Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics, Springer-Verlag, 1996.
- [86] B. VAN LEER, Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method, J. Comput. Phys., vol 32, (1979), pp 101–136.

- [87] J. WHITHAM, Linear and nonlinear waves, Wiley, New-York, 1974.
- [88] W.A. YONG, Singular perturbations of first-order hyperbolic systems with stiff source terms, J. Differential Equations, vol 155(1), (1999), pp. 89–132.
- [89] W.A. YONG ET K. ZUMBRUM, Existence of relaxation shock profiles for hyperbolic conservation laws, SIAM J. Appl. Math., vol 60(5), (2000), pp. 1565–1575.
- [90] X.-G. ZHONG, T.Y. HOU ET P.G. LEFLOCH, Computational methods for propagating phase boundaries, J. Comput. Phys., vol 124, (1996), pp 192–216.

Annexe A

Le système nonconservatif des équations de Navier-Stokes multi-pression

Les travaux présentés dans ce chapitre concernent l'analyse et l'approximation numérique (en une et deux dimensions d'espace) des solutions du système des équations de Navier-Stokes à plusieurs pressions indépendantes. Ils ont tous été menés en collaboration avec F. Coquel, et présentés pour la plupart dans la thèse de doctorat de l'auteur [T1]. Parmi les contributions [A24], [A13], [A14], [A11], et [A10] apportées à ce sujet, seul l'article de synthèse [A10] a été effectué après la soutenance de celle-ci.

Problématique générale. Le modèle qui nous intéresse ici s'écrit (en une dimension d'espace par souci de simplicité)

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho \, u) = 0\\ \partial_t (\rho \, u) + \partial_x (\rho \, u^2 + \sum_{i=1}^N p_i) = \varepsilon \partial_x (\sum_{i=1}^N \mu_i \partial_x u)\\ \partial_t (\rho \, \epsilon_i) + \partial_x (\rho \, \epsilon_i \, u) + p_i \partial_x u = \varepsilon \mu_i (\partial_x u)^2, \ i = 1, ..., N, \end{cases}$$
(A.1)

où avec des notations classiques ρ , $u \in {\epsilon_i, p_i, \mu_i, }_{i=1,...,N}$ représentent respectivement la densité, la vitesse et les N énergies internes, pressions, viscosités, indépendantes. Le paramètre ε est quant à lui associé à l'inverse d'un nombre de Reynolds.

Ce système joue un rôle important dans la modélisation des écoulements compressibles turbulents, celle-ci faisant naturellement intervenir une pression laminaire et une (ou des) pression(s) turbulente(s). Le système (A.1) peut être vu comme une extension des équations de Navier-Stokes usuelles obtenues en ne considérant qu'une seule loi de pression (N = 1). Néanmoins, il existe une grande différence avec le cadre habituel puisque le système (A.1) n'admet pas en général de formulation équivalente sous forme complètement conservative. Dans le cas général, il trouve donc la forme condensée suivante :

$$\partial_t \mathbf{u}^\varepsilon + \mathcal{A}(\mathbf{u}^\varepsilon) \partial_x \mathbf{u}^\varepsilon = \varepsilon \partial_x (\mathcal{D}(\mathbf{u}^\varepsilon) \partial_x \mathbf{u}^\varepsilon), \quad \mathbf{u}^\varepsilon(x, t) \in \mathbb{R}^P,$$
(A.2)

où \mathbf{u}^{ε} représente le vecteur des inconnues et \mathcal{A} une matrice non jacobienne de $\mathbb{R}^{P \times P}$, P = N + 2(c'est-à-dire telle qu'il n'existe pas de fonction flux $\mathbf{f} : \mathbb{R}^P \to \mathbb{R}^P$ satisfaisant $\mathcal{A} = D\mathbf{f}$).

Le régime des grands nombres de Reynolds qui nous intéresse ici (ϵ petit) rend la dynamique du système (A.2) principalement dictée par son opérateur convectif (opérateur du premier ordre extrait). L'approximation numérique des solutions du système (A.2) consiste donc, pour un niveau de raffinement en maillage réaliste et loin de toute paroi, à approcher les solutions du système non conservatif extrait

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{u}(x,t) \in \mathbb{R}^P.$$
 (A.3)

Dans toute la suite, on supposera que ce système est hyperbolique. Cette propriété est vérifiée sous des hypothèses classiques de modélisation des lois de pression $p_i = p_i(\rho, \rho \varepsilon_i)$ (voir [A24] par exemple). De telles hypothèses permettent d'obtenir le résultat suivant :

Lemme 2 Le système du premier ordre (A.3) est hyperbolique sur l'espace des états Ω défini par

$$\Omega = \{ \mathbf{u} = (\rho, \rho u, \{ \rho \epsilon_i \}_{1 \le i \le N}) \in \mathbb{R}^{N+2} / \rho > 0, \ \rho u \in \mathbb{R}, \ \rho \epsilon_i > 0, \ 1 \le i \le N \}$$

et admet les 3 valeurs propres suivantes :

$$\lambda_1(\mathbf{u}) = u - c \le \lambda_2(\mathbf{u}) = u \le \lambda_3(\mathbf{u}) = u + c, \ avec \ c^2(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^N c_i^2(\mathbf{u}), \ c_i^2(\mathbf{u}) = (\partial_\rho p_i)_{s_i} > 0,$$

de multiplicités respectives 1, N et 1. De plus, les 1 et 3 champs caractéristiques associés sont vraiment nonlinéaires. Les champs intermédiaires sont linéairement dégénérés.

Les systèmes hyperboliques sous forme non conservative génèrent des problèmes significatifs, tant du point de vue théorique que du point de vue numérique. Nous proposons de les rappeler brièvement.

Du point de vue théorique tout d'abord, la théorie classique des distributions ne permet pas de définir le produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ au niveau d'une discontinuité de type choc de la solution \mathbf{u} . Pour surmonter cette difficulté, Dal Maso, LeFloch et Murat [35] ont introduit une notion de solution faible pour les systèmes hyperboliques sous forme non conservative. Elle permet de donner une définition au produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x\mathbf{u}$ relativement à une famille de chemins $\phi: [0,1] \times \mathbb{R}^P \times \mathbb{R}^P \to \mathbb{R}^P$ satisfaisant des propriétés de consistance. Elle généralise la notion de solution faible au sens des distributions pour les systèmes conservatifs. Dans [67], P.G. LeFloch montre comment obtenir une telle famille de chemins ϕ à partir d'une analyse onde progressive : une solution choc du système (A.3), caractérisée avec des notations classiques par le triplet ($\sigma, \mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1$), est définie comme la limite lorsque $\epsilon \to 0$ d'une solution **onde progressive** du système (A.2), c'est-à-dire une solution régulière vérifiant :

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

$$\lim_{\xi \to -\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_0, \quad \lim_{\xi \to +\infty} \overline{\mathbf{u}}(\xi) = \mathbf{u}_1.$$
 (A.4)

C'est précisément cette définition que nous adopterons. Nous renvoyons par exemple le lecteur à Colombeau et Leroux [25] pour une autre théorie sur les produits non conservatifs.

Il est important de noter que contrairement au cadre conservatif, la définition du produit non conservatif $\mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}$ dépend de la forme du tenseur de dissipation du système (A.2). Les solutions onde progressive, et plus précisément les états de sortie $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1(\sigma, \mathbf{u}_0)$, dépendent en effet du tenseur diffusif du système considéré. Cette propriété est une caractéristique des systèmes hyperboliques sous forme non conservative. Elle est illustrée par exemple dans Berthon [9] et Raviart et Sainsaulieu [78]. La principale difficulté dans l'approximation des solutions du système (A.3) consistera à respecter la forme du tenseur de dissipation. Dans le cas contraire, on capturera des solutions éloignées de la solution attendue (voir [9], [T1] et les figures A.1 et A.2 ci-dessous).

Du point de vue numérique maintenant, l'approximation des solutions d'un système hyperbolique non conservatif du type (A.3) reste un problème essentiellement ouvert. 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 théorème de Lax-Wendroff est inopérant. 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 (voir par exemple Hou et
LeFloch [54]).

Dans ce contexte, les études menées par F. Coquel et C. Berthon dans [9], [13] et [14] sont celles qui se rapprochent le plus de ce chapitre. Elles concernent l'approximation des solutions des équations de Navier-Stokes à deux pressions indépendantes (N = 2). F. Coquel et C. Berthon proposent 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. Cette étape est une discrétisation de relations supplémentaires importantes satisfaites par les solutions régulières de (A.2). Elles traduisent la dépendance vis à vis des rapports de viscosités $\{\mu_i/\mu_N\}_{i=1,...,N-1}$ de l'évolution des entropies du système, et peuvent être comprises comme des relations de saut généralisées. Les résultats numériques obtenus par une telle stratégie en attestent le bien-fondé (voir [9] pour plus de détails).

Les schémas numériques développés avec F. Coquel sont associés à des techniques de correction complètement **linéaires** et adaptées au cas $N \ge 2$. La recherche de nouvelles procédures a été motivée par l'extension de la problématique à plusieurs dimensions d'espace.

A.1 Résolution du problème de Riemann

Le premier travail effectué sur ce sujet avec F. Coquel a donné lieu à la rédaction de l'article [A14] et concerne la résolution du problème de Riemann associé à (A.3). Il s'agissait de prouver l'existence et l'unicité d'une solution de (A.3) pour la donnée initiale

$$\mathbf{u}(x,0) = \mathbf{u}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{u}_L & \text{si} \quad x < 0, \\ \mathbf{u}_R & \text{si} \quad x > 0, \end{cases}$$
(A.5)

où \mathbf{u}_L et \mathbf{u}_R sont deux états constants de l'espace des états.

D'après le lemme 2, une telle solution est composée d'au plus 4 états constants \mathbf{u}_L , \mathbf{u}_L^* , \mathbf{u}_R^* , \mathbf{u}_R séparés par trois ondes simples. Plus précisément, la vraie nonlinéarité des champs 1 et 3 nous indique que les ondes extrêmes sont des discontinuités de type choc ou des détentes, tandis que la dégénérescence linéaire des autres champs indique que l'onde intermédiaire est une discontinuité de contact. La situation est identique à celle d'une seule loi de pression. Nous avons donc adopté une analyse semblable consistant à définir des courbes de choc et de détentes pour les champs extrêmes, et à les projeter dans le plan (u, p). Ce plan est motivé par la continuité de u et $p = \sum_{i=1}^{N} p_i$ à la traversée d'une discontinuité de contact. Les propriétés de monotonie et de comportement asymptotique de ces projections permettent d'obtenir l'existence et l'unicité d'un point d'intersection. Il donne la vitesse u et la pression p de la discontinuité de contact de l'unique solution du problème de Riemann (A.3)-(A.5). Nous proposons de passer brièvement en revue ces étapes.

Ondes progressives et courbes de chocs. Rappelons tout d'abord qu'une onde de choc séparant deux états constants \mathbf{u}_0 et \mathbf{u}_1 et se propageant à la vitesse σ est admissible si et seulement si elle admet un profil de type *onde progressive*, *i.e.* une solution régulière du système (A.2) vérifiant (A.4). Une analyse préalable des solutions onde progressive a donc été nécessaire pour définir les courbes de chocs.

Nous avons montré l'existence et l'unicité (à une translation près) de telles solutions pour des lois de pression de gaz parfaits polytropiques et dans le cas de viscosités constantes. Pour les ondes progressives du premier champ vraiment nonlinéaire, nous avons plus précisément :

Théorème 11 Soient un état constant \mathbf{u}_0 dans Ω et une vitesse de propagation σ telle que la condition de compression de Lax suivante soit satisfaite :

$$\frac{u_0 - \sigma}{c(\mathbf{u}_0)} > 1. \tag{A.6}$$

Alors, il existe un unique état $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1(\mathbf{u}_0, \sigma)$ vérifiant la condition de compression de Lax

$$\frac{u_1 - \sigma}{c(\mathbf{u}_1)} < 1,\tag{A.7}$$

et une unique solution onde progressive (à une translation près) vérifiant (A.4) du système (A.2).

Un théorème similaire existe bien entendu pour les ondes progressives associées au dernier champ vraiment nonlinéaire.

Ce résultat a été obtenu une première fois par Berthon et Coquel [9] à l'aide de considérations géométriques abstraites. Les informations obtenues par cette analyse sur \mathbf{u}_1 (comme par exemple sa dépendance vis à vis des rapports des viscosités $\{\mu_i/\mu_N\}_{i=1,...,N-1}$) n'ont pas été suffisantes pour poursuivre jusqu'à l'étude du problème de Riemann.

Au contraire, l'approche proposée dans [A14] est basée sur l'obtention d'un système d'équations différentielles ordinaires linéaire à coefficients constants qui caractérise les solutions onde progressive. La solution de ce problème permet de prouver que l'état de sortie \mathbf{u}_1 peut être entièrement déterminé par la résolution d'une équation *scalaire* et *nonlinéaire* connue. Dès lors, σ et \mathbf{u}_0 étant fixés, l'obtention de \mathbf{u}_1 se fait par l'implémentation d'un algorithme de Newton et ne nécessite plus l'intégration d'un système différentiel. Enfin, une analyse de cette équation nonlinéaire permet d'obtenir la caractérisation suivante de la courbe de 1 choc.

Proposition 1 Soit \mathbf{u}_L dans Ω . La projection dans le plan (u, p) de la courbe de 1 choc $S_1(\mathbf{u}_L)$ issue de \mathbf{u}_L est donnée par une fonction régulière $p \mapsto u_1(p)$ strictement décroissante de $[p_L, +\infty)$ sur $(-\infty, u_L]$.

Pour la courbe de 3 choc, nous obtenons de même :

Proposition 2 Soit \mathbf{u}_R dans Ω . La projection dans le plan (u, p) de la courbe de 3 choc $S_3(\mathbf{u}_R)$ issue de \mathbf{u}_R est donnée par une fonction régulière $p \mapsto u_1(p)$ strictement croissante de $[p_R, +\infty)$ sur $[u_R, +\infty)$.

Nous renvoyons le lecteur à [A14] pour plus de détails sur l'obtention de ces propriétés.

Courbes de détentes. L'étude des ondes de détente du modèle (A.3) est basée sur des arguments classiques des systèmes hyperboliques (voir [46] par exemple) et ne pose pas de difficulté particulière. L'obtention d'un ensemble complet d'invariants de Riemann (qui sont des extensions des invariants de Riemann connus du cas N = 1) permet de caractériser les courbes de 1 et 3 détentes.

Proposition 3 Soit \mathbf{u}_L dans Ω . La projection dans le plan (u, p) de la courbe de 1 détente $\mathcal{R}_1(\mathbf{u}_L)$ issue de \mathbf{u}_L est donnée par une fonction régulière $p \mapsto u_1(p)$ strictement décroissante de $(0, p_L]$ sur $[u_L, u_{max}(\mathbf{u}_L))$.

Proposition 4 Soit \mathbf{u}_R dans Ω . La projection dans le plan (u, p) de la courbe de 3 détente $\mathcal{R}_3(\mathbf{u}_R)$ issue de \mathbf{u}_R est donnée par une fonction régulière $p \mapsto u_1(p)$ strictement croissante de $(0, p_R]$ sur $(u_{\min}(\mathbf{u}_R), u_R]$.

Nous renvoyons le lecteur à [A14] pour plus de détails et pour une définition des quantités $u_{max}(\mathbf{u}_L)$ et $u_{min}(\mathbf{u}_R)$.

Existence et unicité d'une solution. En conséquence des propriétés énoncées de monotonie et de comportement asymptotique, les courbes de 1 ondes $C_1(\mathbf{u}_L) = S_1(\mathbf{u}_L) \cup \mathcal{R}_1(\mathbf{u}_L)$ et 3 ondes $C_3(\mathbf{u}_R) = S_3(\mathbf{u}_R) \cup \mathcal{R}_3(\mathbf{u}_R)$ s'intersectent une et une seule fois sous la condition $u_{min}(\mathbf{u}_R) < u_{max}(\mathbf{u}_L)$. Cette condition est analogue au cas particulier N = 1 et traduit la non apparition du vide. Nous avons ainsi démontré :

Théorème 12 Le problème de Riemann (A.3)-(A.5) admet une unique solution loin du vide, i.e. sous la condition

$$u_{min}(\mathbf{u}_R) < u_{max}(\mathbf{u}_L).$$

A.2 Schéma numérique par projection nonlinéaire

L'objectif de cette section est de présenter brièvement un premier algorithme d'approximation des solutions du système (A.2). Il s'agit d'une extension au cas $N \ge 2$ du schéma par projection *nonlinéaire* développé par F. Coquel et C. Berthon dans [9], [13] et [14]. Nous renvoyons le lecteur à [A24] pour plus de détails sur cette section.

La méthode proposée peut être assimilée à une stratégie de type prédicteur-correcteur. L'étape de prédiction propose de résoudre numériquement une formulation équivalente du système (A.2). Après avoir mis en évidence et justifié les erreurs générées par des méthodes classiques appliquées à ce système, une étape de correction par *projection nonlinéaire* est proposée. L'objectif consiste à forcer au niveau discret des relations de proportionnalité existant au niveau continu entre les entropies du système. Elles s'écrivent

$$\mu_N T_i \{\partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u\} = \mu_i T_N \{\partial_t \rho S_N + \partial_x \rho S_N u\}, \quad i = 1, \dots, N-1,$$
(A.8)

où les entropies S_i et les températures T_i sont définies par le second principe de la thermodynamique

$$-T_i(\tau, \epsilon_i)dS_i = d\epsilon_i + p_i(\tau, \epsilon_i)d\tau, \ \tau = 1/\rho.$$

La validité de ces relations au niveau discret est cruciale puisqu'elles traduisent de manière exacte la dépendance vis à vis des rapports des viscosités des solutions du système (A.2).

Etape de prédiction. Cette étape est basée sur la formulation équivalente suivante du système (A.2) :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0, & x \in I\!\!R, \quad t > 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + \sum_{i=1}^N p_i) = \partial_x ((\sum_{i=1}^N \mu_i) \partial_x u), \\ \partial_t \rho E + \partial_x (\rho E + \sum_{i=1}^N p_i) u = \partial_x ((\sum_{i=1}^N \mu_i) u \partial_x u), \\ \partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u = -\frac{\mu_i}{T_i} (\partial_x u)^2, \quad i = 1, ..., N - 1, \end{cases}$$
(A.9)

que nous écrirons sous la forme condensée

$$\partial_t \mathbf{v} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{v}) = \mathcal{R}(\mathbf{v}, \partial_x(\mathcal{B}(\mathbf{v})\partial_x \mathbf{v})) \tag{A.10}$$

(la définition du tenseur \mathcal{B} s'obtient par la relation $(\partial_x u)^2 = (\partial_x (u \partial_x u) - u \partial_{xx} u))$. Ce système peut être complété par la validité de l'égalité d'entropie

$$\partial_t \rho S_N(\mathbf{v}) + \partial_x \rho S_N(\mathbf{v})u = -\frac{\mu_N}{T_N} (\partial_x u)^2, \qquad (A.11)$$

de sorte que les relations de proportionnalité (A.8) s'obtiennent directement en combinant cette équation avec les N - 1 dernières du système (A.9).

L'intérêt d'une telle formulation est d'une part de mettre en évidence une loi de conservation supplémentaire sur l'énergie totale $\rho E = (\rho u)^2/2\rho + \sum_{i=1}^N \rho \epsilon_i$, et d'autre part d'obtenir un opérateur convectif sous forme conservative. Il est alors naturel de proposer une stratégie de *splitting d'opérateurs* pour traiter numériquement le système (A.10).

Ainsi, en introduisant les notations classiques Δt et Δx pour les pas de temps et d'espace, $\lambda = \Delta t/\Delta x, x_{j+1/2} = (j+1/2)\Delta x, j \in \mathbb{Z}$ et $t^n = n\Delta t, n \in \mathbb{N}$, la solution approchée $\mathbf{v}_{\lambda}(x, t^n) = \mathbf{v}_j^n$, $x \in C_j^n = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$ à l'instant t^n évolue en temps selon les deux pas suivants.

Premier pas $(t^n \to t^{n+1=})$ Cette étape consiste à résoudre l'opérateur du premier ordre

$$\partial_t \mathbf{v} + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{v}) = 0, \tag{A.12}$$

avec $\mathbf{v}_{\lambda}(x, t^n)$ comme donnée initiale, et complété par l'inégalité d'entropie

$$\partial_t \rho S_N(\mathbf{v}) + \partial_x \rho S_N(\mathbf{v}) u \le 0. \tag{A.13}$$

Pour définir $\mathbf{v}_{j}^{n+1=}$, nous proposons d'utiliser la méthode de Godunov sous la condition CFL habituelle

$$\lambda \max_{\mathbf{v}}(|\lambda_i(\mathbf{v})|, i = 1, 2, 3) \le \frac{1}{2}.$$
(A.14)

En notant $(x,t) \mapsto \mathbf{v}(x/t, \mathbf{v}_L, \mathbf{v}_R)$ la solution du problème de Riemann associée à (A.12)-(A.13) et aux deux états initiaux \mathbf{v}_L et \mathbf{v}_R , nous obtenons le théorème suivant.

Théorème 13 Sous la condition CFL (A.14), la méthode de Godunov appliquée à (A.12)-(A.13) conduit à

$$\mathbf{v}_{j}^{n+1} = \mathbf{v}_{j}^{n} - \lambda \Delta \mathbf{f}_{j+1/2}^{n}, \quad \Delta \mathbf{f}_{j+1/2}^{n} = \mathbf{f}_{j+1/2}^{n} - \mathbf{f}_{j-1/2}^{n}, \quad j \in \mathbb{Z},$$
(A.15)

avec $\mathbf{f}_{j+1/2}^n = \mathbf{f}(\mathbf{v}(0^+; \mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n))$ pour tout $j \in \mathbb{Z}$. De plus, l'inégalité d'entropie

$$(\rho S_N)_j^{n+1=} := \rho S_N(\mathbf{v}_j^{n+1=}) \le (\rho S_N)_j^n - \lambda \Delta \{\rho S_N u\}_{j+1/2}^n,$$
(A.16)

est vérifiée avec { $\rho S_N u$ }ⁿ_{j+1/2} = { $\rho S_N u$ }($\mathbf{v}(0^+; \mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n)$).

Rappelons que (A.16) est une conséquence de (A.13) et de l'inégalité de Jensen associée à l'opération de moyenne dans la méthode de Godunov. *Cette inégalité est stricte en général.*

Deuxième pas $(t^{n+1=} \rightarrow t^{n+1-})$ Ce deuxième pas propose de prendre en compte la partie diffusive du système (A.10) en résolvant le système suivant,

$$\partial_t \mathbf{v} = \mathcal{R}(\mathbf{v}, \partial_x(\mathcal{B}(\mathbf{v})\partial_x \mathbf{v})), \tag{A.17}$$

avec $\mathbf{v}_{\lambda}(x, t^{n+1=})$ comme donnée initiale. Les solutions régulières de ce système vérifient automatiquement l'équation supplémentaire

$$\partial_t \rho S_N(\mathbf{v}) = -\frac{\mu_N}{T_N} (\partial_x u)^2. \tag{A.18}$$

Il existe dans la littérature plusieurs techniques d'approximation (aux différences finies) permettant d'obtenir une mise à jour \mathbf{v}_j^{n+1-} de l'inconnue consistante avec les équations (A.17) et (A.18). Généralement implicites pour éviter des restrictions CFL trop importantes, elles sont de la forme

$$\begin{cases} \rho_{j}^{n+1-} = \rho_{j}^{n+1=}, \\ (\rho u)_{j}^{n+1-} = (\rho u)_{j}^{n+1=} + \Delta t \overline{\partial_{x}(\mu \partial_{x} u)_{j}}^{n+1-}, \\ (\rho E)_{j}^{n+1-} = (\rho E)_{j}^{n+1=} + \Delta t \overline{\partial_{x}(\mu u \partial_{x} u)_{j}}^{n+1-}, \\ (\rho S_{i})_{j}^{n+1-} = (\rho S_{i})_{j}^{n+1=} - \Delta t \frac{\overline{\mu_{i}}}{T_{i}} (\overline{\partial_{x} u})_{j}^{2}^{n+1-}, \quad i = 1, ..., N-1, \end{cases}$$
(A.19)

tandis que la propriété de consistance avec l'équation (A.18) s'écrit

. . .

$$(\rho S_N)_j^{n+1-} := \{\rho S_N\}(\mathbf{v}_j^{n+1-}) = (\rho S_N)_j^{n+1-} - \Delta t \frac{\overline{\mu_N}}{\overline{T_N}} (\partial_x u)_j^{2}.$$
 (A.20)

Les formules aux différences finies (A.19)-(A.20) ne jouent pas un rôle important dans la suite, c'est pourquoi nous ne les discuterons pas dans le détail. Nous renvoyons par exemple le lecteur à [9], [A24], et soulignons que bien qu'implicites, ces mises à jour conduisent à des formules explicites pour les inconnues $(\rho E)_j^{n+1-}$ et $(\rho S_i)_j^{n+1-}$.

Pour résumer cette étape de prédiction, la mise en commun des formules (A.15)-(A.16) d'une part, et (A.19)-(A.20) d'autre part, conduit à

$$\begin{aligned}
\rho_{j}^{n+1-} &= \rho_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho u\}_{j+1/2}^{n} \\
(\rho u)_{j}^{n+1-} &= (\rho u)_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho u^{2} + \sum_{i=1}^{N} p_{i}\}_{j+1/2}^{n} + \Delta t \overline{\partial_{x}(\mu \partial_{x} u)}_{j}^{n+1-} \\
(\rho E)_{j}^{n+1-} &= (\rho E)_{j}^{n} - \lambda \Delta \{(\rho u^{2} + \sum_{i=1}^{N} p_{i})u\}_{j+1/2}^{n} + \Delta t \overline{\partial_{x}(\mu u \partial_{x} u)}_{j}^{n+1-} \\
(\rho S_{i})_{j}^{n+1-} &= (\rho S_{i})_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho S_{i}u\}_{j+1/2}^{n} - \Delta t \frac{\mu_{i}}{T_{i}}(\partial_{x} u)^{2}_{j}^{n+1-}, \quad i = 1, ..., N-1,
\end{aligned}$$
(A.21)

$$(\rho S_N)_j^{n+1-} \le (\rho S_N)_j^n - \lambda \Delta \{\rho S_N u\}_{j+1/2}^n - \Delta t \frac{\overline{\mu_N}}{T_N} (\partial_x u)_j^2^{n+1-}.$$
 (A.22)

Les solutions obtenues par ce schéma sont très éloignées des solutions exactes comme l'illustrent les figures A.1 et A.2 ci-dessous. Cet échec provient du non respect des relations de proportionnalité (A.8). En effet, l'inégalité d'entropie (A.22) étant stricte en général, la combinaison avec les N-1 dernières équations de (A.21) conduit à

$$\mu_{i}\overline{T_{N_{j}}}^{n+1-} \{ (\rho S_{N})_{j}^{n+1-} - (\rho S_{N})_{j}^{n} - \lambda \Delta \{ \rho S_{N}u \}_{j+1/2}^{n} \}$$

$$\neq$$

$$\mu_{N}\overline{T_{i_{j}}}^{n+1-} \{ (\rho S_{i})_{j}^{n+1-} - (\rho S_{i})_{j}^{n} - \lambda \Delta \{ \rho S_{i}u \}_{j+1/2}^{n} \},$$

pour i = 1, ..., N-1 (au moins sous l'hypothèse de viscosités constantes et pourvu que $\frac{\overline{\mu_i}}{\overline{T_i}(\partial_x u)^2}_j^{n+1-} = \frac{\mu_i}{\overline{T_i}_j^{n+1-}} \overline{(\partial_x u)^2}_j^{n+1-}$ pour tout i = 1, ..., N). Cette petite discussion motive l'introduction d'une étape de correction (le troisième pas de l'algo-

Cette petite discussion motive l'introduction d'une étape de correction (le troisième pas de l'algorithme). Nous proposons pour cela une extension au cas $N \ge 2$ de la procédure présentée dans [14].

Etape de correction. Troisième pas $(t^{n+1-} \rightarrow t^{n+1})$ Au cours de cette étape, nous gardons inchangées les variables conservatives :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n+1-}, \quad (\rho u)_j^{n+1} = (\rho u)_j^{n+1-}, \quad (\rho E)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1-},$$

et redéfinissons les N-1 entropies $\{(\rho S_i)_j^{n+1}\}_{i=1,...,N-1}$ comme les solutions du système nonlinéaire suivant :

$$\mu_{i}\overline{T_{N_{j}}}^{n+1-}(\{\rho S_{N}\}(\mathbf{u}_{j}^{n+1}) - (\rho S_{N})_{j}^{n} + \lambda\Delta\{\rho S_{N}u\}_{j+1/2}^{n}) = i = 1, ..., N-1. \quad (A.23)$$

$$\mu_{N}\overline{T_{ij}}^{n+1-}((\rho S_{i})_{j}^{n+1} - (\rho S_{i})_{j}^{n} + \lambda\Delta\{\rho S_{i}u\}_{j+1/2}^{n}),$$

Ici et dans un souci de clarté, les viscosités μ_i sont supposées constantes. L'extension au cas de viscosités variables ne soulève pas de difficulté majeure.

D'un point de vue *théorique*, la pertinence de cette étape de correction est obtenue en établissant l'existence et l'unicité d'une solution du système (A.23), ainsi que des inégalités d'entropie discrètes et des principes du maximum.

Théorème 14 Le système algébrique (A.23) admet une unique solution $\{(\rho S_i)_j^{n+1}\}_{i=1,...,N-1}$. Elle vérifie les inégalités d'entropie suivantes

$$(\rho S_i)_j^{n+1} \le (\rho S_i)_j^n - \lambda \Delta \{\rho S_i u\}_{j+1/2}^n, \quad i = 1, ..., N - 1,$$

$$(\rho S_N)_j^{n+1} := \{\rho S_N\} (\mathbf{v}_j^{n+1}) \le (\rho S_N)_j^n - \lambda \Delta \{\rho S_N u\}_{j+1/2}^n,$$

(A.24)

ainsi que les principes du maximum

$$(S_i)_j^{n+1} \le \max((S_i)_{j-1}^n, (S_i)_j^n, (S_i)_{j+1}^n), \quad i = 1, ..., N, \quad j \in \mathbb{Z}.$$
(A.25)

D'un point de vue *numérique*, la validité de notre approche est illustrée sur les figures A.1 et A.2. Elles comparent, pour deux données initiales de type Riemann, les solutions exactes et numériques obtenues avec ou sans étape de correction. Le modèle considéré correspond au choix N = 3. Nous renvoyons le lecteur à [A24] pour plus de détails sur ces simulations.







FIG. A.2 – Test 2 - Pressions p_2 (gauche) et p_3 (droite)

A.3 Schémas numériques par projection linéaire

Cette section présente deux algorithmes nouveaux pour approcher les solutions du système (A.2). Les références associées sont [A11] et [A13].

La motivation de ce travail est simple. Le schéma par projection *nonlinéaire* peut s'avérer coûteux dans la pratique puisqu'il nécessite à chaque pas de temps (et sur chaque maille de calcul) la résolution d'un problème algébrique *nonlinéaire* de taille N - 1 (le système (A.23)). Notre objectif consiste à proposer de nouvelles techniques de correction qui soient à la fois :

- moins coûteuses, *i.e.* qui conduisent à des formules de mise à jour explicites,
- et tout aussi robustes, *i.e.* qui vérifient des propriétés de stabilité identiques à celles obtenues dans le théorème 14.

Outre le gain en temps calcul, l'existence de ces stratégies permettra d'envisager un traitement implicite en temps des schémas proposés et le calcul de solutions stationnaires 2D par une technique de marche en temps.

Les nouvelles méthodes restent basées sur une stratégie de type prédicteur-correcteur. Les premier $(t^n \to t^{n+1-})$ et troisième $(t^{n+1-} \to t^{n+1})$ pas seront modifiés de manière significative, tandis que le deuxième pas $(t^{n+1-} \to t^{n+1-})$ n'apparaîtra plus dans la description qui va suivre. L'influence des contributions visqueuses sur les solutions du système (A.2) sera uniquement prise en compte par le biais d'un ensemble de relations de saut généralisées. Débutons par une brève description de ces deux étapes.

Etape de prédiction $(t^n \to t^{n+1=} = t^{n+1-})$ Le traitement de l'opérateur convectif passera désormais par la résolution du système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0, & x \in I\!\!R, \quad t > 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + \sum_{i=1}^N p_i) = 0, \\ \partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u = 0, & i = 1, ..., N, \end{cases}$$
(A.26)

complété par l'inégalité d'énergie

$$\partial_t \rho E + \partial_x (\rho E + \sum_{i=1}^N p_i) u \le 0.$$
 (A.27)

La sélection des solutions faibles se fera donc par l'énergie totale (l'entropie ρS_N est convectée). Sous des hypothèses classiques sur les lois de fermeture thermodynamiques, l'énergie totale $(\rho, \rho u, \{\rho S_i\}_{i=1,...,N}) \mapsto \rho E(\rho, \rho u, \{\rho S_i\}_{i=1,...,N})$ est strictement convexe et peut jouer le rôle d'une entropie de Lax. Le choix du système (A.26)-(A.27) a été motivé par l'obtention des propriétés de stabilité souhaitées (théorème 15 ci-dessous).

Etape de correction $(t^{n+1-} \to t^{n+1})$ Dans ce deuxième pas, nous proposerons d'imposer numériquement la notion de proportionnalité (A.8). Celle-ci sera exprimée avec les énergies internes pour la première méthode, et avec les entropies spécifiques pour la deuxième méthode. La deuxième méthode supposera l'utilisation de lois de gaz parfaits polytropiques $\rho \epsilon_i = p_i/(\gamma_i - 1)$ avec des coefficients adiabatiques γ_i constants. Il s'agira de respecter les relations

$$\mu_N\{\partial_t\rho\epsilon_i + \partial_x\rho\epsilon_i u + p_i\partial_x u\} = \mu_i\{\partial_t\rho\epsilon_N + \partial_x\rho\epsilon_N u + p_N\partial_x u\}, \quad i = 1, ..., N - 1,$$
(A.28)

pour la première méthode, et

$$\mu_N \frac{\rho^{\gamma_i - 1}}{\gamma_i - 1} \{ \partial_t \rho s_i + \partial_x \rho s_i u \} = \mu_i \frac{\rho^{\gamma_N - 1}}{\gamma_N - 1} \{ \partial_t \rho s_N + \partial_x \rho s_N u \}, \quad i = 1, \dots, N - 1,$$
(A.29)

avec $s_i = p_i / \rho^{\gamma_i}$, pour la deuxième. L'utilisation de ces nouvelles formulations permettra d'obtenir des mises à jour explicites à l'issue de l'étape de correction.

Nous décrivons maintenant plus en détails les deux méthodes proposées. Pour cela, nous introduisons les notations condensées

$$\partial_t \mathbf{w} + \partial_x \mathbf{g}(\mathbf{w}) = 0 \tag{A.30}$$

pour le système (A.26), et $(x,t) \mapsto \mathbf{w}(x/t; \mathbf{w}_L, \mathbf{w}_R)$ pour la solution du problème de Riemann correspondant. A l'instant t^n , on suppose connue la solution approchée $\mathbf{w}_{\lambda}(x, t^n) = \mathbf{w}_j^n, x \in \mathcal{C}_j^n$.

Première méthode. Etape de prédiction $(t^n \to t^{n+1=} = t^{n+1-})$ Cette étape consiste à résoudre (A.30)-(A.27) avec $\mathbf{w}_{\lambda}(x, t^n)$ comme donnée initiale. Pour définir $\mathbf{w}_j^{n+1=} = \mathbf{w}_j^{n+1-}$, nous proposons de modifier la méthode de Godunov habituelle en projetant, sous la condition CFL habituelle (A.14), les variables conservatives ρ , ρu et les énergies internes $\{\rho \epsilon_i\}$, i = 1, ..., N. Nous obtenons les formules

$$\begin{cases} \rho_{j}^{n+1-} = \rho_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho u\}_{j+1/2}^{n}, \\ (\rho u)_{j}^{n+1-} = (\rho u)_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho u^{2} + \sum_{i=1}^{n} p_{i}\}_{j+1/2}^{n}, \\ (\rho \epsilon_{i})_{j}^{n+1-} = (\rho \epsilon_{i})_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho \epsilon_{i} u\}_{j+1/2}^{n} - \lambda < p_{i} \partial_{x} u >_{j}^{n}, \quad i = 1, ..., N. \end{cases}$$
(A.31)

avec bien entendu $\Delta X_{j+1/2}^n = X_{j+1/2}^n - X_{j-1/2}^n$ et $X_{j+1/2}^n = X(\mathbf{w}(0^+; \mathbf{w}_j^n, \mathbf{w}_{j+1}^n))$ pour tout $j \in \mathbb{Z}$. Concernant les contributions nonconservatives $\langle p_i \partial_x u \rangle_j^n$, nous avons avec des notations claires¹

$$\langle p_i \partial_x u \rangle_j^n = -\sum_{chocs \in \mathcal{C}_j^n} \rho^- (u^- - \sigma)(\epsilon_i^+ - \epsilon_i^-).$$

Il est important de noter qu'à l'issue de ce premier pas, l'énergie totale ρE n'est pas conservée puisqu'elle n'est pas projetée mais définie comme une fonction de ρ_j^{n+1-} , $(\rho u)_j^{n+1-}$ et $(\rho \epsilon_i)_j^{n+1-}$, i = 1, ..., N:

$$(\rho E)_j^{n+1-} = \frac{((\rho u)_j^{n+1-})^2}{2\rho_j^{n+1-}} + \sum_{i=1}^N (\rho \epsilon_i)_j^{n+1-} \neq (\rho E)_j^n - \lambda \Delta \{\rho E u + \sum_{i=1}^N p_i u\}_{j+1/2}^n.$$

Les formules (A.31) ne peuvent donc pas conduire à une méthode numérique pertinente, et nécessitent d'être corrigées.

Etape de correction $(t^{n+1-} \to t^{n+1})$ L'objectif de cette étape est d'imposer le respect des relations (A.28) et de restaurer la conservation de l'énergie totale. Pour cela, nous posons pour tout $j \in \mathbb{Z}$

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n+1-}, \quad (\rho u)_j^{n+1} = (\rho u)_j^{n+1-},$$

et redéfinissons les N énergies internes $(\rho \epsilon_i)_j^{n+1}$ comme les solutions du système linéaire suivant :

$$\begin{cases} \mu_N \{ (\rho \epsilon_i)_j^{n+1} - (\rho \epsilon_i)_j^{n+1-} \} = \mu_i \{ (\rho \epsilon_N)_j^{n+1} - (\rho \epsilon_N)_j^{n+1-} \}, \ 1 \le i \le N-1, \\ \sum_{i=1}^N (\rho \epsilon_i)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{((\rho u)_j^{n+1})^2}{2\rho_j^{n+1}}, \end{cases}$$
(A.32)

où l'énergie totale $(\rho E)_i^{n+1}$ est définie de manière conservative par la formule attendue

$$(\rho E)_{j}^{n+1} = (\rho E)_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho E u + \sum_{i=1}^{N} p_{i} u\}_{j+1/2}^{n}.$$
(A.33)

Il est clair que (A.32) est une version discrète des relations (A.28) compatible avec la conservation de l'énergie totale. Un calcul simple montre alors que le système linéaire (A.32) admet une unique solution donnée explicitement par :

$$(\rho\epsilon_i)_j^{n+1} = (\rho\epsilon_i)_j^{n+1-} + \frac{\mu_i}{\sum_{l=1}^N \mu_l} ((\rho E)_j^{n+1} - \frac{((\rho u)_j^{n+1})^2}{2\rho_j^{n+1}} - \sum_{l=1}^N (\rho\epsilon_l)_j^{n+1-}), \quad i = 1, \dots, N.$$
(A.34)

¹La somme se fait sur l'ensemble des chocs présents dans la cellule C_j^n . La vitesse de propagation d'un tel choc est notée σ , et les états gauche et droit sont repérés par les indices – et +

Bien entendu, l'élément clé dans l'obtention de ces formules est la linéarité de l'énergie totale ρE par rapport aux énergies internes $\rho \epsilon_i$. S'agissant maintenant des propriétés de stabilité de ce nouvel algorithme, nous avons démontré le résultat suivant.

Théorème 15 Sous la condition (A.14), le schéma numérique (A.31)-(A.32)-(A.33) préserve la positivité des énergies internes, c'est-à-dire $(\rho\epsilon_i)_j^{n+1} \ge 0$, vérifie les inégalités d'entropie

$$(\rho S_i)_j^{n+1} := \{\rho S_i\}(\rho_j^{n+1}, (\rho \epsilon_i)_j^{n+1}) \le (\rho S_i)_j^n - \lambda \Delta \{\rho S_i u\}_{j+1/2}^n,$$
(A.35)

et les principes du maximum

$$(S_i)_j^{n+1} \le \max((S_i)_{j-1}^n, (S_i)_j^n, (S_i)_{j+1}^n),$$

pour tout i = 1, ..., N et tout $j \in \mathbb{Z}$.

Deuxième méthode. Etape de prédiction $(t^n \to t^{n+1} = t^{n+1})$ De même que précédemment, nous résolvons dans cette étape le problème (A.30)-(A.27) avec $\mathbf{w}_{\lambda}(x,t^n)$ comme donnée initiale (on notera $\overline{\mathbf{w}}(x,t)$ la solution correspondante), et proposons de modifier la méthode de Godunov habituelle. Les variables projetées seront ρ , ρu et les entropies spécifiques $s_i = p_i / \rho^{\gamma_i}$, i = 1, ..., N. Plus précisément, nous utiliserons l'opérateur de projection classique pour ρ et ρu :

$$\rho_j^{n+1-} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \rho(\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx,$$

$$(\rho u)_j^{n+1-} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \rho u(\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx,$$
(A.36)

tandis que les entropies spécifiques sont projetées avec les formules inhabituelles suivantes :

$$(s_i)_j^{n+1-} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{p_i}{\rho^{\gamma_i} j^{n+1-}} (\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, ..., N,$$
(A.37)
$$\overline{\rho^{\gamma_i} j^{n+1-}} = \frac{1}{\rho^{\gamma_i} j^{n+1-2}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \rho^{\gamma_i} (\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx.$$

avec

$$\overline{\rho^{\gamma_i}}_{j}^{n+1-} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \rho^{\gamma_i}(\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx$$

Notons qu'en général

$$(s_i)_j^{n+1-} \neq \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s_i(\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{p_i}{\rho^{\gamma_i}}(\overline{\mathbf{w}}(x, t^{n+1-})) dx, \quad j \in \mathbb{Z}.$$

L'opération de moyenne (A.37) utilise la mesure de probabilité $\rho^{\gamma_i} dx / \overline{\rho^{\gamma_i}}_{j}^{n+1-}$ qui est en général différente de la mesure de Lebesgue (rappelons que $p_i = \rho^{\gamma_i} s_i$). Ceci s'est avéré nécessaire pour obtenir le théorème 16 ci-dessous (nous renvoyons le lecteur à [A13] pour plus de détails).

Lors de ce premier pas, la densité ρ et la quantité de mouvement ρu évoluent donc toujours selon les formules conservatives

$$\begin{cases} \rho_{j}^{n+1-} = \rho_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta \{\rho u\}_{j+1/2}^{n}, \\ (\rho u)_{j}^{n+1-} = (\rho u)_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta \{\rho u^{2} + p\}_{j+1/2}^{n}. \end{cases}$$
(A.38)

Au contraire, on montre que les formules (A.37) conduisent à

$$(s_i)_j^{n+1-} = (s_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_i^{j-1/2,+} \{ (s_i)_j^n - (s_i)_{j-1}^n \} - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_i^{j+1/2,-} \{ (s_i)_{j+1}^n - (s_i)_j^n \},$$
(A.39)

où les vitesses discrètes $v_i^{j+1/2*}$ sont consistantes avec la vitesse u de transport des entropies spécifiques. Rappelons que les solutions du problème (A.30)-(A.27) vérifient dans \mathcal{D}' les équations de transport

$$\partial_t s_i + u \partial_x s_i = 0, \quad i = 1, \dots, N. \tag{A.40}$$

Les formules (A.39) représentent une version discrète des équations (A.40).

Une fois encore, l'énergie totale ρE obtenue à l'issue de ce premier pas et définie comme une fonction de ρ_j^{n+1-} , $(\rho u)_j^{n+1-}$ et $(s_i)_j^{n+1-}$, i = 1, ..., N, n'a aucune raison d'être conservée :

$$(\rho E)_{j}^{n+1-} = \frac{((\rho u)_{j}^{n+1-})^{2}}{2\rho_{j}^{n+1-}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{(\rho_{j}^{n+1-})^{\gamma_{i}}(s_{i})_{j}^{n+1-}}{\gamma_{i}-1} \neq (\rho E)_{j}^{n} - \lambda \Delta (\rho E u + \sum_{i=1}^{N} p_{i} u)_{j+1/2}^{n}.$$

Ceci motive l'étape suivante.

Etape de correction $(t^{n+1-} \to t^{n+1})$ L'objectif de cette étape est d'imposer le respect des relations (A.29) et de restaurer la conservation de l'énergie totale. Nous posons donc pour tout $j \in \mathbb{Z}$

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n+1-}, \quad (\rho u)_j^{n+1} = (\rho u)_j^{n+1-},$$

et redéfinissons les N entropies spécifiques $(s_i)_j^{n+1}$ en accord avec la version discrète suivante des relations (A.29) :

$$\mu_N \frac{(\rho_j^{n+1})^{\gamma_i}}{\gamma_i - 1} \left\{ (s_i)_j^{n+1} - (s_i)_j^{n+1-} \right\} = \mu_i \frac{(\rho_j^{n+1})^{\gamma_N}}{\gamma_N - 1} \left\{ (s_N)_j^{n+1} - (s_N)_j^{n+1-} \right\}, \tag{A.41}$$

Ce système linéaire est complété par la relation de consistance

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{(\rho_j^{n+1})^{\gamma_i}}{\gamma_i - 1} (s_i)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{((\rho u)_j^{n+1})^2}{2\rho_j^{n+1}},$$
(A.42)

avec, pour assurer la conservation de l'énergie totale ρE :

$$(\rho E)_{j}^{n+1} := (\rho E)_{j}^{n} - \lambda \Delta \{\rho E u + \sum_{i=1}^{N} p_{i} u\}_{j+1/2}^{n}.$$
(A.43)

On montre alors facilement que l'unique solution de (A.41)-(A.42) est donnée par

$$(s_i)_j^{n+1} = (s_i)_j^{n+1-} + \frac{\mu_i(\gamma_i - 1)}{(\rho_j^{n+1})^{\gamma_i} \sum_{l=1}^N \mu_l} ((\rho E)_j^{n+1} - \frac{((\rho u)_j^{n+1})^2}{2\rho_j^{n+1}} - \sum_{l=1}^N \frac{(\rho_j^{n+1})^{\gamma_l}}{\gamma_l - 1} (s_l)_j^{n+1-}),$$
(A.44)

pour tout i = 1, ..., N. L'étape de correction est donc une fois de plus explicite. Ici, l'élément clé est la linéarité de l'énergie totale ρE par rapport aux entropies s_i une fois la densité ρ fixée (par l'étape de prédiction).

Le théorème suivant résume les propriétés vérifiées par ce nouvel algorithme.

Théorème 16 Sous la condition (A.14), le schéma numérique (A.36)-(A.37)-(A.41)-(A.42)-(A.43) préserve la positivité des entropies spécifiques, c'est-à-dire $(s_i)_j^{n+1} \ge 0$, vérifie les inégalités d'entropie

$$(s_i)_j^{n+1} - (s_i)_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} v_i^{j-1/2,+} \{ (s_i)_j^n - (s_i)_{j-1}^n \} + \frac{\Delta t}{\Delta x} v_i^{j+1/2,-} \{ (s_i)_{j+1}^n - (s_i)_j^n \} \ge 0, \quad (A.45)$$

et les principes du maximum

$$(s_i)_j^{n+1} \ge \min((s_i)_{j-1}^n, (s_i)_j^n, (s_i)_{j+1}^n),$$

pour tout i = 1, ..., N et tout $j \in \mathbb{Z}$.

Les inégalités (A.45) sont des versions discrètes des inégalités d'entropie suivantes :

$$\partial_t s_i + u \partial_x s_i = \mu_i \frac{\gamma_i - 1}{\rho^{\gamma_i}} (\partial_x u)^2 \ge 0, \quad i = 1, ..., N.$$

Remarque 3 Pour les deux méthodes qui viennent d'être décrites, on note que certaines quantités, telles les contributions nonconservatives $\langle p_i \partial_x u \rangle_j^n$ ou les vitesses discrètes $v_i^{j-1/2,+}$ définies dans [A13], peuvent être difficiles et coûteuses à évaluer si l'on utilise un solveur exact pour résoudre le problème de Riemann associé à (A.30). L'utilisation d'un solveur de Riemann approché construit par exemple sur une méthode de relaxation (voir par exemple [A11] ou le chapitre 2 du présent document) peut donc s'avérer judicieuse.

A.4 Algorithme implicite en temps

L'objectif de cette section est de proposer une implicitation en temps linéarisée des algorithmes présentés dans les paragraphes précédents. Elle reprend des travaux initiés dans [T1] et actuellement en cours de rédaction avec F. Coquel et C. Marmignon. En invoquant l'invariance par rotation des équations considérées, nous serons alors en mesure d'approcher par une technique de marche en temps les solutions stationnaires de plusieurs écoulements bidimensionnels. Les stratégies d'implicitation seront guidées par l'obtention de propriétés de consistance (convergence vers un état stationnaire solution du problème), de stabilité (positivité des grandeurs concernées) et d'efficacité (coût d'évaluation « optimal »).

Une nouvelle formulation des relations de saut généralisées. Les algorithmes proposés reposent sur différentes formulations des relations de saut généralisées, à savoir (A.8), (A.28), et (A.29). Dans le contexte de schémas explicites en temps, toutes conduisent à des solutions virtuellement identiques, mais le bénéfice des deux dernières est l'absence d'inversion d'une équation nonlinéaire au cours de l'étape de correction. Dans le contexte de schémas implicites, nous allons remettre en cause ces formulations afin de concilier les contraintes exprimées ci-dessus. La raison principale concerne la propriété de stabilité. La positivité des entropies et des énergies internes repose dans les algorithmes explicites sur une inégalité d'entropie (ou d'énergie) à l'issue de l'étape de prédiction. L'obtention d'une telle inégalité étant illusoire à l'issue d'une implicitation de l'étape de prédiction, cette propriété de positivité est compromise avec l'utilisation des formulations (A.8), (A.28), et (A.29). Soulignons également que la nature vraiment non conservative de la formulation en énergies internes (A.28) ne faciliterait en aucun cas l'obtention de la propriété de consistance. Nous proposons donc une nouvelle écriture des relations de saut généralisées. En notant $\{X_i\}_{i=1,...,N}$ les quantités définies par

$$X_i = \ln \frac{S_i}{S_N}, \quad i = 1, ..., N - 1,$$
 (A.46)

avec par convention $X_N = 0$, elle s'écrit

$$\partial_t \rho X_i + \partial_x \rho X_i u = \frac{C_i}{\mu} (\partial_t \rho \epsilon + \partial_x \rho \epsilon u + p \partial_x u), \quad i = 1, ..., N - 1,$$
(A.47)

où l'on a posé :

$$\rho \epsilon = \sum_{j=1}^{N} \rho \epsilon_j, \quad p = \sum_{j=1}^{N} p_j, \quad \mu = \sum_{j=1}^{N} \mu_j,$$
(A.48)

 \mathbf{et}

$$C_i = \frac{\mu_N}{T_N S_N} - \frac{\mu_i}{T_i S_i}, \quad i = 1, ..., N - 1$$

Une telle formulation possède plusieurs avantages. On note tout d'abord que les membres de gauche dans (A.47) ne font intervenir qu'une seule vitesse caractéristique (en l'occurrence u) ce qui facilitera l'implicitation des informations caractéristiques. Ensuite, la positivité des entropies spécifiques sera plus facilement assurée en manipulant le logarithme des rapports des (N - 1) premières entropies sur la dernière. Enfin, les membres de droite dans (A.47) seront explicitement connus à l'issue de l'étape de prédiction. Rappelons en effet que la densité ρ , l'impulsion ρu et

l'énergie totale ρE restent inchangées au cours de l'étape de correction, il en est donc de même pour l'énergie interne totale $\rho \epsilon$ définie par

$$\rho \epsilon = \rho E - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} = \sum_{i=1}^{N} \rho \epsilon_i (1/\rho, S_i).$$
(A.49)

Description de l'algorithme implicite. Nous décrivons brièvement ci-dessous les formulations implicites proposées pour les étapes de prédiction et de correction. Nous donnons également les principales propriétés de positivité satisfaites au cours de ces deux pas. La validité de notre approche sera ensuite illustrée par des expériences numériques.

Implicitation de l'étape de prédiction $(t^n \to t^{n+1-})$ De manière semblable à ce qui a été proposé pour le schéma numérique par projection nonlinéaire, et afin d'assurer la conservation de l'énergie totale, cette étape est basée sur la résolution du système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0, & x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + \sum_{i=1}^N p_i) = 0, \\ \partial_t \rho E + \partial_x (\rho E + \sum_{i=1}^N p_i) u = 0, \\ \partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u = 0, \quad i = 1, \dots, N-1 \end{cases}$$

complété par l'inégalité d'entropie

$$\partial_t \rho S_N(\mathbf{v}) + \partial_x \rho S_N(\mathbf{v}) u \le 0$$

avec $\mathbf{v} = (\rho, \rho u, \rho E, \{\rho S_i\}_{i=1,\dots,N-1})$. Pour ce faire, nous proposons d'utiliser une méthode de relaxation implicite en temps semblable à celle du chapitre 2 (section 2.3) dédiée au cas N = 1. Le modèle de relaxation considéré ici s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho \, u) = 0, \\ \partial_t (\rho \, u) + \partial_x (\rho \, u^2 + \pi) = 0, \\ \partial_t (\rho \, \Sigma) + \partial_x (\rho \, \Sigma \, u + \pi u) = 0, \\ \partial_t (\rho \, \pi) + \partial_x (\rho \, \pi \, u + a^2 u) = \lambda \, \rho \, (p - \pi), \\ \partial_t \rho S_i + \partial_x \rho S_i u = 0, \quad i = 1, ..., N - 1. \end{cases}$$
(A.50)

Motivés par la mise en place d'une technique d'implicitation robuste et peu coûteuse, nous proposons de traiter ce système en tirant profit du découplage naturel des entropies dans le système (A.50). Par découplage, nous entendons qu'une fois le choix de la vitesse *a* effectué à chaque pas de temps, l'évolution des variables ρ , ρu , $\rho \Sigma$ et $\rho \pi$ est totalement indépendante de celle des S_i . Ce découplage est obtenu par construction et résulte de la procédure de relaxation sur la pression totale. Il apparaît donc naturel de vouloir impliciter en temps de manière découplée le bloc transport des entropies, que nous écrirons sous la forme non conservative :

$$\partial_t S_i + u \partial_x S_i = 0, \quad i = 1, ..., N - 1,$$
 (A.51)

et le bloc hydrodynamique :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + \Pi) = 0, \\ \partial_t \rho \Sigma + \partial_x (\rho \Sigma + \Pi) u = 0, \\ \partial_t (\rho \pi) + \partial_x (\rho \pi u + a^2 u) = \lambda \rho (p - \pi). \end{cases}$$
(A.52)

Le choix de la formulation non conservative (A.51) permettra l'obtention d'un principe du maximum pour chacune des entropies S_i .

Concernant le bloc (A.51) et dans le contexte de mises à jour explicites en temps, il est classique d'utiliser les formules décentrées suivantes :

$$(S_i)_j^{n+1-} = (S_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \times$$

$$(\{u^*\}_{j-1/2}^{n,+} \{(S_i)_j^n - (S_i)_{j-1}^n\} + \{u^*\}_{j+1/2}^{n,-} \{(S_i)_{j+1}^n - (S_i)_j^n\}),$$
(A.53)

où nous avons utilisé les notations habituelles $X^+ = \max(X, 0), X^- = \min(X, 0), \forall X \in \mathbb{R}$. Les vitesses moyennes $\{u^*\}_{j+1/2}^n$ sont ici définies en accord avec le théorème 3 du chapitre 2 (formule (2.30)), c'est-à-dire

$$\{u^*\}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2a_{j+1/2}}(\pi_{j+1}^n - \pi_j^n).$$

Nous proposons alors une implicitation linéarisée de (A.53) en figeant à l'instant t^n les vitesses moyennes $\{u^*\}_{j+1/2}$:

$$(S_i)_j^{n+1-} = (S_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \times$$

$$(\{u^*\}_{j-1/2,+}^n \{ (S_i)_j^{n+1-} - (S_i)_{j-1}^{n+1-} \} + \{u^*\}_{j+1/2,-}^n \{ (S_i)_{j+1}^{n+1-} - (S_i)_j^{n+1-} \}).$$
(A.54)

L'évaluation des quantités $\{(S_i)_j^{n+1-}\}_{j\in\mathbb{Z}}$ consiste en la résolution de (N-1) systèmes linéaires (un par entropie) dont la matrice globale A possède une structure tridiagonale à coefficients scalaires. Plus précisément, une ligne courante j de la matrice A est constituée des éléments a_j, b_j et c_j vérifiant

$$a_{j} = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \{u^{*}\}_{j=1/2,+}^{n},$$

$$b_{j} = 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\{u^{*}\}_{j=1/2,+}^{n} - \{u^{*}\}_{j+1/2,-}^{n}),$$

$$c_{j} = \frac{\Delta t}{\Delta x} \{u^{*}\}_{j=1/2,-}^{n}.$$

(A.55)

La matrice A, identique pour chaque entropie S_i , est une M-matrice² à diagonale strictement dominante. Sous des conditions aux limites *adhoc* le système linéaire correspondant est donc inversible pour tout pas de temps. Ceci assure l'existence et l'unicité des $(S_i)_j^{n+1}$. Une analyse plus fine des propriétés de cette matrice permet d'établir la stabilité de la méthode en exhibant les principes du maximum suivants :

Théorème 17 La mise à jour implicite (A.54) des inconnues $\{(S_i)_j^{n+1-}\}_{j\in \mathbb{Z}}$ pour tout i = 1, ..., N-1 admet une unique solution vérifiant les principes du maximum

$$\min_{k \in Z} (S_i)_k^n \le (S_i)_j^{n+1-} \le \max_{k \in Z} (S_i)_k^n,$$

(A.56)
 $i = 1, ..., N-1, \quad j \in \mathbb{Z}.$

Concernant le bloc hydrodynamique (A.52), nous suggérons d'utiliser la méthode de relaxation implicite en temps équilibre décrite dans la section 2.3 du chapitre 2. Le modèle (A.52) est en effet identique au système (2.35), à ceci près que la pression p intervenant dans le terme source de relaxation est associée à une somme de pressions partielles p_i . Le terme Q dépend donc désormais de U (en reprenant les notations de la section 2.1) mais aussi des (N-1) premières entropies spécifiques S_i . Nous écrirons donc $Q = Q(\mathbf{U}, \{S_i\}_{i=1,...,N-1})$, où pour alléger les notations $Q = Q(\mathbf{U}, S_i)$. Cette différence n'entraîne qu'une très légère modification de l'algorithme, intervenant dans la formule (2.37) du premier pas d'évolution en temps. Afin de tenir compte de la dépendance de Q vis à vis des S_i , la linéarisation \overline{Q} s'écrit désormais

$$\overline{\mathcal{Q}}(\mathbf{U}_{j}^{n+1-},(S_{i})_{j}^{n+1-}) =$$

$$\mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n},(S_{i})_{j}^{n}) + \nabla_{\mathbf{U}}\mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n},(S_{i})_{j}^{n})\delta(\mathbf{U}_{j}^{n}) + \sum_{i=1}^{N-1} \partial_{S_{i}}\mathcal{Q}(\mathbf{U}_{j}^{n},(S_{i})_{j}^{n})\delta((S_{i})_{j}^{n}), \qquad (A.57)$$

avec $\delta((S_i)_j^n) = (S_i)_j^{n+1-} - (S_i)_j^n$. Notons que cette quantité est connue après l'implicitation du bloc des entropies proposée ci-dessus. Enfin, le deuxième pas de relaxation ne subit aucune modification puisqu'il consiste toujours à forcer la condition d'équilibre exacte $p = \pi$.

 $^{^2 {\}rm Une}~M\text{-}{\rm matrice}$ est une matrice dont les termes diagonaux sont strictement positifs, et donc les termes extra-diagonaux sont négatifs ou nuls

Implicitation de l'étape de correction $(t^{n+1-} \rightarrow t^{n+1})$ A l'issue du pas précédent, nous disposons des valeurs définitivement réactualisées de ρ , ρu , ρE :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n+1-}, \quad (\rho u)_j^{n+1} = (\rho u)_j^{n+1-}, \quad (\rho E)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1-}$$

(les variables conservatives ne changent pas lors de l'étape de correction). Nous pouvons donc définir à l'instant t^{n+1} l'énergie interne totale en posant

$$(\rho\epsilon)_j^{n+1} = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{((\rho u)_j^{n+1})^2}{2\rho_i^{n+1}}.$$
(A.58)

A l'issue du premier pas, nous pouvons également obtenir une réactualisation partielle de l'énergie interne totale selon la formule

$$(\rho\epsilon)_j^{n+1-} = \sum_{i=1}^N \rho\epsilon_i (\rho_j^{n+1-}, (S_i)_j^{n+1-}).$$
(A.59)

Au sens des différences finies, la quantité $(\rho \epsilon)_j^{n+1-}$ est associée à une mise à jour consistante de l'énergie interne totale selon l'équation satisfaite lors du premier pas, c'est-à-dire

$$\partial_t \rho \epsilon + \partial_x \rho \epsilon u + p \partial_x u = 0.$$

Nous suggérons alors d'impliciter en temps la discrétisation des relations (A.47) en posant

$$(\rho X_i)_j^{n+1} - (\rho X_i)_j^n + \lambda \Delta(\{\rho u\}_{j+1/2}^{n,+}(X_i)_j^{n+1} + \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-}(X_i)_{j+1}^{n+1}) = \frac{(C_i)_j^n}{u}((\rho \epsilon)_j^{n+1} - (\rho \epsilon)_j^{n+1-}), \quad i = 1, ..., N-1.$$
(A.60)

Nous avons donc choisi une implicitation linéarisée en temps immédiate des formules des flux de Larrouturou, c'est-à-dire

$$\{\rho X_i u\}_{j+1/2} = \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,+} \times (X_i)_j^{n+1} + \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-} \times (X_i)_{j+1}^{n+1}.$$
(A.61)

Les flux numériques $\{\rho u\}_{j+1/2}^n$ sont associés à la méthode de relaxation utilisée dans le pas précédent.

La mise en œuvre correspondante pour le calcul des inconnues $\{(X_i)_j^{n+1}\}_{j\in\mathbb{Z}}$ consiste, pour chaque i = 1, ..., N-1, en la résolution d'un système linéaire dont la matrice possède une structure tridiagonale à coefficients scalaires. D'après (A.60), une ligne courante j de cette matrice est constituée des éléments a_j, b_j et c_j vérifiant :

$$a_{j} = -\lambda \{\rho u\}_{j-1/2}^{n,+},$$

$$b_{j} = \rho_{j}^{n+1} + \lambda (\{\rho u\}_{j-1/2}^{n,+} - \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-}),$$

$$c_{j} = \lambda \{\rho u\}_{j+1/2}^{n,-}.$$

Cette matrice est une *M*-matrice à diagonale strictement dominante. Elle est donc inversible sous des conditions aux limites *adhoc*, ce qui garantit l'existence et l'unicité des quantités $(X_i)_j^{n+1}$ ainsi définies. Disposant localement des (N-1) quantités $(X_i)_j^{n+1}$, on définit alors les (N-1) premières entropies $(S_i)_j^{n+1}$, i = 1, ..., N-1 en fonction de la dernière $(S_N)_j^{n+1}$ en posant naturellement d'après (A.46)

$$(S_i)_j^{n+1} = (S_N)_j^{n+1} \exp((X_i)_j^{n+1})).$$

On note que la positivité des entropies $(S_i)_j^{n+1}$ est conditionnée par celle de l'entropie $(S_N)_j^{n+1}$. De manière consistante avec (A.58), cette dernière entropie est solution de l'équation

$$\sum_{i=1}^{N} \rho_j^{n+1} \epsilon_i (1/\rho_j^{n+1}, (S_N)_j^{n+1} \exp((X_i)_j^{n+1})) = (\rho E)_j^{n+1} - \frac{(\rho u)_j^{n+1}^2}{2\rho_j^{n+1}}.$$
 (A.62)

La solution de ce problème algébrique existe et est bien strictement positive dès que la densité et l'énergie interne totale le sont à l'instant t^{n+1-} . En d'autres termes dès que

$$\rho_j^{n+1-} > 0, \quad (\rho\epsilon)_j^{n+1-} = (\rho E)_j^{n+1-} - \frac{(\rho u)_j^{n+1-2}}{2\rho_j^{n+1-}} > 0.$$

Cette condition indispensable à la poursuite des calculs est tout à fait naturelle. Nous avons également démontré que sous l'hypothèse de N lois de pression polytropiques, la solution du problème algébrique (A.62) est explicitement connue.

Ceci achève la description de l'algorithme implicite.

Pour conclure ce paragraphe, il est important de souligner que la positivité des entropies spécifiques est garantie. Concernant l'évaluation du coût calcul, nous remarquons tout d'abord qu'une fois la première itération accomplie, il n'est plus utile dans la pratique de procéder à la résolution du bloc transport des entropies dans la phase de prédiction. En effet, en tirant profit du découplage entre l'étape de prédiction et l'étape de correction, il est possible d'exploiter la connaissance des entropies corrigées au terme de l'itération précédente pour évaluer, lors du premier pas de l'itération courante, la correction des résidus explicites $\delta((S_i)_j^n)$ (voir formule (A.57)) ainsi que l'énergie interne totale prédite (voir formule (A.59)). La pratique a montré que cette simplification conduit à un algorithme stable présentant le bénéfice de n'avoir à résoudre à chaque itération que N systèmes linéaires tridiagonaux scalaires (contre 2N - 1 sinon) et d'un système linéaire tridiagonal par blocs de taille 3×3 (liée à l'implicitation du bloc hydrodynamique). Le coût de l'algorithme définitif est en ce sens « optimal ».

Expérience numérique. Nous proposons maintenant de valider numériquement l'algorithme implicite proposé sur un calcul bidimensionnel de solution stationnaire autour d'un cylindre. L'écoulement considéré est fortement supersonique à l'infini amont. Nous utilisons un maillage (représenté sur la figure A.3) structuré avec 32 points de discrétisation sur la paroi du cylindre et 41 points de discrétisation sur l'axe Ox (direction de la ligne d'arrêt). L'ordre 2 d'approximation en espace est obtenu par une approche MUSCL construite sur les variables primitives. Les conditions aux limites sont tout à fait attendues, à savoir : condition de glissement pour le vecteur vitesse sur la paroi du cylindre, condition supersonique pour la sortie, condition de symétrie sur la ligne d'arrêt. Pour ce test, nous considérons N = 2 pressions partielles p_1 et p_2 de gaz parfaits polytropiques associées respectivement aux coefficients $\gamma_1 = 1.3$ et $\gamma_2 = 1.2$. Les viscosités μ_1 et μ_2 sont choisies constantes et égales à 1, tandis que le champ arrivant sur le cylindre est caractérisé par les valeurs suivantes données en unités internationales (u et v sont les deux composantes du vecteur vitesse) : $\rho = 7.032e - 4$, u = 4318, v = 0, $p_1 = 36$, $p_2 = 70$.

Le nombre de Mach associé est environ égal à 10, il s'agit donc d'un cas test difficile.

Les iso-valeurs du champ de densité et les distributions des pressions sur la ligne d'arrêt sont présentées sur la figure A.4 pour la solution stationnaire obtenue.



FIG. A.3 – Maillage 32×41



FIG. A.4 – Densité (iso-valeurs) et pressions sur la ligne d'arrêt