# Thèse

## présentée à l'Université Paris 6

pour obtenir

# l'Habilitation à Diriger des Recherches en Mathématiques

par

# François DUBOIS

# SUR L'APPROXIMATION NUMERIQUE DE QUELQUES PROBLEMES EN MECANIQUE DES FLUIDES

Soutenue le 16 décembre 1992 devant le jury composé de

MM. Jacques-Louis LIONS Président

Alain-Yves LEROUX Rapporteur

Olivier PIRONNEAU Rapporteur

Denis SERRE Rapporteur

Bertrand MERCIER Examinateur

Jean-Claude NEDELEC Examinateur

Pierre-Arnaud RAVIART Examinateur

#### REMERCIEMENTS

Je suis tout particulièrement sensible à l'honneur que me fait le Professeur Jacques-Louis Lions de présider le jury de mon habilitation à diriger des recherches en mathématiques. Il représente pour moi une personnalité phare des mathématiques appliquées les plus modernes et il a également pris ces dernières années une part active dans le développement des programmes spatiaux. Je suis donc heureux de le remercier ici à ce double titre.

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été effectués à l'Ecole Polytechnique et à l'Aerospatiale. Ils sont avant tout dus à la confiance qui m'a été accordée par mes patrons successifs, Jean-Claude Nédélec et Bertrand Mercier. Je remercie tout particulièrement Jean Claude Nédélec de m'avoir proposé de travailler sur le problème des conditions aux limites pour les problèmes hyperboliques non linéaires au cours de ma thèse, me laissant un problème intéressant qu'il aurait pu aborder lui-même beaucoup plus vite. Il m'a également proposé de participer à l'enseignement d'analyse numérique à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, ce qui m'a donné une ouverture à la fois scientifique et humaine. De Bertrand Mercier, qui m'a recruté à l'Aerospatiale et avec lequel j'ai partagé quatre années d'expérience de la recherche en milieu industriel, j'ai particulièrement apprécié le dynamisme, les critiques constructives qu'il a toujours prodiguées à la lecture des versions préliminaires de mes travaux et l'aptitude à s'intéresser à des thèmes nouveaux.

L'enthousiasme pour l'Analyse Numérique m'a été en grande partie communiqué par Pierre-Arnaud Raviart qui a toujours porté attention aux idées que j'ai pu lui soumettre. J'admire également le professeur réputé qui, à l'Ecole Polytechnique comme au DEA d'Analyse Numérique de l'Université Paris 6 m'a confié des charges d'enseignement et m'a permis à mon tour un contact privilégié avec des étudiants très motivés.

Les Professeurs Alain-Yves Leroux, Olivier Pironneau et Denis Serre font partie des experts reconnus en mécanique des fluides numérique. Ils ont eu la tâche ingrate de rapporter sur ce mémoire. Je les remercie pour les efforts qu'ils ont pu avoir à faire pour apporter une lecture approfondie de mes travaux.

Ce travail doit également à ceux qui en ont permis la réalisation matérielle par un financement régulier, et je remercie ici la Direction du Personnel du Ministère de l'Equipement et les pilotes de la Recherche Auto-Financée d'Aerospatiale Espace &

Défense d'avoir donné des responsabilités à des hommes éclairés, convaincus qu'une approche scientifique systématique finit par déboucher sur une technologie solide.

Je dois beaucoup à la confiance en l'approche scientifique qui m'a été transmise par Laurence Halpern à une période où l'approche semi-empirique m'apparaissait, à tort, comme la plus raisonnable. Elle a eu la gentillesse au printemps dernier de faire une première lecture "informelle" de ce mémoire et par là m'a permis d'en améliorer plusieurs points. Qu'elle trouve ici le témoignage de mon amitié.

Bien entendu, les échanges variés que j'ai pu avoir tant à l'X qu'aux Mureaux ont beaucoup compté pour moi. Je suis heureux de citer Alain Bamberger, Pierre Degond, Jean-Marc Dupuy, Philippe Le Floch, Sylvie Mas-Gallic, Geneviève Raugel, François-Xavier Roux, Jean-Paul Vila, Rémy Baraille, Eric Chaput, Jean-Jacques Chattot, François Coron, Jean-Pierre Dumont, Didier Lemaire, Guillaume Mehlman, Olivier Michaux, Gilles Moulès, Jean-Bernard Renard et Antonio Rivas. Ils m'ont chacun beaucoup appris et m'ont à de nombreuses reprises permis de rectifier de trop nombreuses erreurs dans mes propres réflexions.

Des collaborations avec d'autres institutions de recherche m'ont permis d'apprécier des visions scientifiques parfois très différentes des miennes. En particulier, Jacques Audounet, Yann Brenier, Sébastien Candel, Carlos Conca, Frédéric Coquel, Thierry Gallouet, Vivette Girault, Edwige Godlewski, Bernard Larrouturou, Alain Lerat, Pierre Mazet, Jean-Louis Montagné, Stanley Osher, Michèle Schatzman m'ont offert des échanges fructueux parfois contradictoires mais toujours enrichissants, tant d'un point de vue scientifique qu'humain.

Ce travail n'aurait pas été possible sans la collaboration discrète et efficace de nombreux stagiaires à l'Aerospatiale. Ainsi, Florence Arnoux, François-Xavier Fraisse, Frédéric Vergé, Isabelle Terrasse, Jacques Mercier, Philippe Laborie, Antonio de Barros, Frédéric Vitart, Jean-Louis Vaudescal, Francis Allouche, Anne Houron, Sylvie Pavsic, Franck Bertagnolio, Philippe Naturel ont, par la pertinence de leurs travaux, contribué au développement (ou à la mise au rebut!) de quelques idées. Je regrette que ces collaborations se soient si vite terminées.

Enfin, depuis la fin de ces travaux, j'ai eu la chance de faire la connaissance du Professeur André Rousset. Sa haute compétence scientifique et ses responsabilités importantes au sein du groupe de direction de l'Aerospatiale ne lui ont pas fait perdre simplicité, modestie et gentillesse. Je le remercie de m'avoir accepté comme un de ses interlocuteurs.

#### **RESUME**

Cete thèse regroupe un ensemble de travaux, publications et rapports internes, issus d'une expérience de huit années de mécanique des fluides numérique au Centre de Mathématiques Appliquées de l'Ecole Polytechnique et au Département Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique de la Division Systèmes Stratégiques et Spatiaux d'Aerospatiale. L'étude s'articule autour de quatre thèmes principaux : la modélisation des fluides parfaits, l'analyse mathématique des équations de la mécanique des fluides, les aspects fondamentaux de l'analyse des schémas numériques et la mise en œuvre industrielle de diverses méthodes.

Le modèle mathématique du fluide parfait compressible est étudié de façon détaillée du point physique et mathématique. On montre sans hypothèse de régularité sur la loi d'état du fluide que la convexité de l'entropie de Lax est équivalente à la concavité de l'entropie thermostatique et à la positivité de la température. Ce résultat est ensuite étendu à un mélange de deux gaz réels sans interaction mutuelle.

L'étude des conditions aux limites pour le problème de Stokes de la dynamique des fluides incompressibles à deux ou trois dimensions d'espace est abordé d'un nouveau point de vue. Une formulation variationnelle comportant la vitesse, le tourbillon et la pression est proposée avec pour seule hypothèse de régularité l'appartenance du champ de vitesse à l'espace H(div), du tourbillon à l'espace H(rot) et de la pression à l'espace L<sup>2</sup>. On montre que les conditions aux limites en (vitesse normale, pression) et (vitesse tangentielle, tourbillon tangentiel) conduisent à deux partitions de la frontière. Le problème est alors bien posé si toutes les composantes du champ de vitesse sont données sur un morceau analytique de la frontière.

Les études théoriques des schémas numériques portent sur divers aspects de la méthode des volumes finis pour les fluides compressibles. Le problème de Riemann est le thème de quatre travaux indépendants portant sur une formulation non linéaire des conditions aux limites pour les équations d'Euler de la dynamique des gaz, l'adaptation du flux d'Osher pour prendre en compte les effets de gaz réel à l'équilibre chimique, une correction d'entropie non paramétrée du schéma de Roe [en collaboration avec Guillaume Mehlman] et une version à pas fractionnaires du schéma de Godounov en hydrodynamique [en collaboration avec Rémy Baraille, Ghislaine Bourdain et Alain-Yves Leroux]. L'étude de la méthode MUSCL de Van Leer pour l'extension au second ordre

de précision des volumes finis est abordée de façon très générale et la notion d'interpolation non linéaire conservant la convexité est proposée. Cette notion permet d'affaiblir les conditions classiques de décroissance de la variation totale et un nouveau limiteur de pente dit de Lagrange est testé pour l'équation d'advection et l'équation de Burgers avec un terme source afin d'étudier expérimentalement la convergence vers l'état stationnaire d'un problème modèle pour l'aérodynamique. L'extension aux équations de Navier Stokes compressibles des méthodes de volumes finis en maillage non structuré est proposée à deux et trois dimensions d'espace. Une méthodologie générale fondée sur le caractère linéaire et local de la dérivation y est développée.

Le calcul scientifique en aérodynamique s'est développé intensivement ces dernières années à l'Aerospatiale sous l'impulsion du programme Hermès. Trois contributions aux ateliers scientifiques hypersoniques d'Antibes de 1990 et 1991 [en collaboration avec Olivier Michaux pour les deux premières et avec Guillaume Mehlman, Frédéric Thivet et Sébastien Candel pour la troisième] montrent l'état de l'art pour la résolution numérique des équations d'Euler à trois dimensions d'espace en maillage non structuré en incluant les effets de gaz réel, pour la résolution numérique des équations de Navier Stokes autour de rampes hypersoniques et pour l'introduction de modèles physiques complexes de déséquilibre thermodynamique et chimique dans les calculs d'écoulements hypersoniques dans les tuyères à haute enthalpie. Enfin, l'étude collective [en collaboration avec Eric Chaput, Didier Lemaire, Gilles Moulès et Gilles Vaudescal] des approximations parabolisée et de couche mince des équations de Navier Stokes a permis à Aerospatiale de développer un code économique et précis pour le calcul des efforts aérodynamiques dans la haute atmosphère incluant l'essentiel des effets visqueux.

# PLAN DE LA THESE

PARTIE 1	PRESENTATION GENERALE DES TRAVAUX
	Introduction
1.1	Modélisation
1.2	Analyse mathématique
1.3	Analyse numérique fondamentale
1.4	Calcul scientifique
1.5	Annexe
1.6	Conclusion
1.7	Références bibliographiques
PARTIE 2	MODELISATION
2.1	Concavité de l'entropie thermostatique et convexité de l'entropie mathématique au sens de Lax.
2.2	Concavité de l'entropie thermodynamique et convexité de l'entropie mathématique de deux gaz quelconques sans interaction mutuelle.
PARTIE 3	ANALYSE MATHEMATIQUE
	Une formulation tourbillon-vitesse-pression pour le problème de Stokes.
PARTIE 4	ANALYSE NUMERIQUE FONDAMENTALE
4.1	Conditions aux limites fortement non linéaires pour les équations d'Euler.
4.2	Evaluation du flux d'Osher pour l'air à l'équilibre chimique.
4.3	A Non-Parameterized Entropy Correction for Roe's Approximate Riemann Solver (en collaboration avec Guillaume Mehlman).
4.4	Nonlinear Interpolation and Total Variation Diminishing Schemes.
4.5	Etude expérimentale de l'influence de quelques paramètres numériques sur la convergence vers l'état stationnaire d'un problème modèle pour
16	l'aérodynamique.
4.6	Calcul des flux visqueux dans un code de résolution des équations de Navier Stokes par une méthode de volumes finis non-structurés.

4.7 Interpolation de Lagrange et volumes finis.Une technique nouvelle pour calculer le gradient d'une fonction sur les faces d'un maillage non structuré.

#### PARTIE 5 CALCUL SCIENTIFIQUE

- 5.1 Solution of the Euler Equations Around a Double Ellipsoïdal Shape Using Unstructured Meshes and Including Real Gas Effects (en collaboration avec Olivier Michaux).
- Numerical Solution of the Navier Stokes Equations for Hypersonic Ramps with the NS3GR Solver (en collaboration avec Olivier Michaux).
- 5.3 FLU3PNS: A Three-Dimensional Thin Layer and Parabolized Navier-Stokes Solver Using the MUSCL Upwind Scheme (en collaboration avec Eric Chaput, Didier Lemaire, Gilles Moulès et Jean-Louis Vaudescal).

#### PARTIE 6 ANNEXES

- 6.1 Computation of Hypersonic Flows with a Fully Coupled Implicit Solver and an Extension of the CVDV Model for Thermochemical Relaxation (en collaboration avec Guillaume Mehlman, Frédéric Thivet et Sébastien Candel).
- 6.2 Une version à pas fractionnaires du schéma de Godunov en hydrodynamique (en collaboration avec Rémy Baraille, Ghislaine Bourdin et Alain-Yves Le Roux).

PARTIE 7 LISTE DE TRAVAUX SCIENTIFIQUES

#### 1° PARTIE PRESENTATION GENERALE DES TRAVAUX

Cette partie présente et résume l'essentiel des résultats obtenus dans les travaux présentés ensuite aux parties 2 à 6 de ce mémoire.

#### Introduction

Les équations de la dynamique des fluides sont très classiques et ont été écrites sous une forme moderne dès le 18ième siècle. Elles expriment d'une part les lois de conservation fondamentales de la physique et d'autre part la prise en compte d'effets à échelle macroscopique grâce à un modèle mécanique approprié. Une difficulté essentielle pour l'analyse mathématique de ces équations tient à leur type non linéaire. En effet, la représentation d'Euler de la mécanique des milieux continus suppose la recherche de champs inconnus en fonction du couple (espace, temps) et l'analogue en milieu continu de l'accélération en mécanique du point s'exprime naturellement à l'aide de termes quadratiques de la vitesse et de son gradient.

Une fois le modèle mécanique fixé, le mathématicien appliqué l'étudie pour luimême afin de démontrer que certaines propriétés "physiquement évidentes" telles que l'existence et l'unicité d'une solution ont effectivement lieu, pour l'équation aux dérivées partielles qui modélise le système mécanique, jointes à des conditions limites appropriées. Or la perte de linéarité des équations rend ce dernier problème extrêmement difficile à résoudre à tel point qu'aucun théorème général d'existence (et d'unicité) pour les équations d'évolution de Navier Stokes permettant de décrire des situations proches des applications n'est à ce jour démontré.

Ce caractère fondamentalement ouvert du problème se retrouve lorsqu'on aborde la discrétisation des problèmes fluides en vue de leur résolution numérique approchée sur ordinateur. L'analyse de schémas numériques et de leur convergence lorsque le maillage est de plus en plus raffiné est indispensable pour sélectionner les schémas ayant de bonnes qualités mathématiques et choisir les diverses méthodes numériques de résolution approchée en trouvant l'optimum entre la précision des résultats, le coût calcul, l'importance du stockage en mémoire et la difficulté d'implémentation sur ordinateur. Toutefois, la construction de schémas numériques pour la résolution effective (et imparfaite!) de problèmes industriels est le plus souvent semi-empirique et résulte in fine de l'intuition des ingénieurs. La validation de ces idées, dans l'attente d'analyses rigoureuses futures, repose sur des validations de nature expérimentale par comparaison des résultats numériques avec des solutions analytiques, d'autres résultats numériques de même nature, ou de véritables expériences.

Dans cette thèse, nous abordons successivement les quatre thèmes précédents qui constituent la mécanique des fluides numérique : la modélisation, l'analyse mathématique, les aspects fondamentaux de la discrétisation numérique et les aspects plus appliqués du calcul scientifique. En annexe, nous avons regroupé deux travaux menés en collaboration avec entre autres deux jeunes chercheurs en Mathématiques Appliquées, Guillaume Mehlman et Rémy Baraille.

#### 1.1 Modélisation

La dynamique des gaz suppose un modèle qui prend en compte la nature compressible de ce type de fluide. Aussi le modèle le plus simple ne tient pas compte de la dissipation par effets visqueux. On écrit donc les lois de conservation de la physique sous forme d'un système hyperbolique non linéaire

(1.1) 
$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(U) = 0.$$

La modélisation proprement dite est complètement contenue dans le choix de la fonction flux  $U \to f(U)$ . Pour la dynamique d'un monogaz, on a :

(1.2) 
$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \text{avec} \quad \epsilon = \rho E = \rho \frac{u^2}{2} + \rho e$$

où  $\rho$  est la densité, u la vitesse, e l'énergie interne par unité de masse et E l'énergie totale. Le flux f (U) permet alors d'introduire la pression p :

(1.3) 
$$f(U) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u E + p u \end{pmatrix}.$$

Dans le cas du gaz parfait polytropique, on a simplement

(1.4) 
$$p = (\gamma - 1) \rho e$$
,

où  $\gamma$  est le rapport (constant) des chaleurs spécifiques. Si l'on cherche une entropie au sens de Lax (Friedrichs-Lax [1971]) pour le système (1.1)(1.4), on sait que l'entropie classique

(1.5) 
$$\eta (U) = -\rho \log \frac{p}{\rho^{\gamma}}$$

répond au problème et Harten [1983] a précisé la forme générale des entropies au sens de Lax pour le système (1.1)(1.4) du gaz parfait polytropique. Dans le cas d'un gaz quelconque, nous avons très vite (1983) cherché le lien entre la convexité supposée par Friedrichs et Lax [1971] et la propriété de convexité classique des potentiels thermodynamiques (voir par exemple Landau-Lifchitz [1967]). Les deux propriétés sont en fait équivalentes comme nous l'avons indiqué en groupe de travail à Paris 6 [1983] et rédigé dans la Thèse (Dubois [1988-a]). De façon précise, nous avons montré dans Dubois [1990] [Chapitre 2.1 de ce mémoire] que sans aucune hypothèse de régularité, la convexité de l'entropie de Lax

(1.6) 
$$\eta (U) = -\rho s (e, \frac{1}{\rho})$$

où l'entropie spécifique s est fonction du couple (énergie interne, volume spécifique) est équivalente à la concavité de l'entropie

$$(1.7) (e, \tau) \rightarrow s(e, \tau)$$

et à la positivité de la température, c'est à dire la croissance au sens large de la fonction partielle

(1.8) 
$$e \rightarrow s(e, \tau)$$
,  $\tau$  fixé.

Des travaux indépendants menés par Croisille [1990] ont permis de prouver la propriété précédente (sous l'hypothèse que  $s (\bullet, \bullet)$  est deux fois dérivable) par un raisonnement uniquement fondé sur le Hessien  $d^2\eta$  (U).

Notons ici qu'il existe une méthode très simple pour calculer les variables entropiques, c'est à dire les dérivées partielles de  $\eta$  par rapport à U, méthode fondée uniquement sur la thermodynamique. Partant des variables extensives de masse [M], volume [V], énergie interne  $[E_i]$  et entropie [S], la relation classique de la thermostatique

(1.9) 
$$d\mathbf{E}_{i} = T dS - p dV + \mu dM$$

met en évidence les dérivées partielles de l'entropie

$$(1.10) S = \Sigma (M, V, \mathbf{E}_i)$$

grâce à la température [T], la pression [p] et le potentiel chimique  $[\mu]$ . Signalons que l'extensivité de la fonction  $\Sigma$  ( $\bullet$ ,  $\bullet$ ,  $\bullet$ ) s'exprime simplement par le fait que  $\Sigma$  est homogène de degré 1. Si nous supposons le fluide animé d'une vitesse u (donc d'une impulsion Q=M u), l'énergie  $\mathbf{E}_i$  de la relation (1.9) est l'énergie interne, reliée à l'énergie totale volumique  $\mathbf{E}$  grâce à la relation

(1.11) 
$$d\mathbf{E} = d\mathbf{E}_i + d\left(\frac{Q^2}{2M}\right).$$

On déduit alors simplement de (1.9)(1.11):

(1.12) 
$$dS = -\frac{1}{T} \left( \mu - \frac{u^2}{2} \right) dM - \frac{u}{T} dQ + \frac{1}{T} dE + \frac{p}{T} dV .$$

La relation (1.12) est remarquable. D'une part, quand on remplace les variables extensives par des variables spécifiques de masse  $\left[ \rho = \frac{M}{V} \right]$ , impulsion  $\left[ q = \frac{Q}{V} \right]$  et énergie  $\left[ \epsilon = \frac{E}{V} \right]$  on déduit immédiatement de l'identité d'Euler pour les fonctions homogènes de degré un que les variables entropiques, définies dans Godunov [1961] par la relation

$$(1.13) d\eta (U) = \varphi dU$$

prennent la forme

(1.14) 
$$\varphi(U) = \left(\frac{1}{T}(\mu - \frac{u^2}{2}), \frac{u}{T}, -\frac{1}{T}\right)$$

et que la duale  $\psi_0$  au sens de Moreau de l'entropie de Lax  $\eta$  vaut simplement

$$(1.15) \qquad \qquad \psi_0 = \frac{p}{T} \ .$$

La relation (1.14) est présente dans le livre de Godunov [1979] mais le lien avec le potentiel chimique n'y est pas explicitement fait. Cette relation a été indépendamment proposée entre autres par Chalot et al [1990].

Ayant su traiter de façon satisfaisante le cas du gaz polytropique et du gaz réel quelconque, il est naturel d'essayer de comprendre en termes physiques simples les modèles multiespèces monophasiques qui permettent de prendre en compte des effets de cinétique chimique. Ainsi nous avons étudié (Dubois [1988-b]) le cas d'un mélange de deux espèces. La loi de conservation (1.1) est remplacée par

(1.16) 
$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} F(W) = \lambda G(W)$$

où W est le vecteur des variables conservées

(1.17) 
$$W = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}$$

et F(W) le flux conservatif

(1.18) 
$$F(U) = \begin{pmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uE + pu \end{pmatrix}$$

où l'on a posé

$$(1.19) \rho = \rho_1 + \rho_2.$$

Le terme G (W) représente l'échange entre les espèces 1 et 2 par réaction chimique et  $\lambda$  un paramètre sans dimension. Lorsque la réaction est infiniment lente  $(\lambda \to 0)$ , l'écoulement est figé et le système (1.16) est une loi de conservation classique dont il s'agit de comprendre la thermodynamique sous-jacente. Si la réaction chimique est infiniment rapide  $(\lambda \to \infty)$  l'équilibre chimique est réalisé et impose une relation algébrique supplémentaire entre  $\rho_1$  et  $\rho_2$ . On peut éliminer ces deux champs et les remplacer par une seule équation pour la densité (1.19), ce qui conduit au système (1.1) du gaz réel "quelconque" étudié plus haut. L'étude du modèle hyperbolique associé au système figé  $(\lambda \equiv 0)$  impose de définir la pression en fonction des variables

conservatives W. Dans tous les travaux dont nous avons eu connaissance à l'époque (Fernandez-Larrouturou [1988], Abgrall [1988] par exemple), on suppose que chaque espèce est un gaz parfait

(1.20) 
$$\exists T / \forall i \in \{1, 2\}, p_i = \rho_i \frac{R}{M_i} T$$

et la pression partielle  $p_i$  est reliée simplement à la constante universelle R des gaz parfaits, la masse molaire  $\mathcal{M}_i$  et la température T. De plus, on fait l'hypothèse que la loi de Dalton

$$(1.21) p = p_1 + p_2$$

est réalisée. Ces hypothèses nous ont semblé peu satisfaisantes du point de vue de la modélisation puisque les raisonnements précédemment proposés sont fondés sur la double hypothèse de la loi des gaz parfaits et la loi de Dalton. Nous avons cherché (c.f. Dubois [1989-a] et Chapitre 2.2) à raisonner à partir de l'entropie.

Nous nous donnons donc l'entropie  $s_i\left(e_i,\frac{1}{\rho_i}\right)$  de la ième espèce, ainsi que ses dérivées partielles :

(1.22) 
$$ds_i = \frac{1}{T_i} de_i + \frac{p_i}{T_i} d\left(\frac{1}{\rho_i}\right).$$

L'hypothèse de fluide monophasique impose aux deux espèces d'avoir la même vitesse u, donc l'énergie interne  $e = E - \frac{1}{2} u^2$  du mélange est une pondération des énergies internes  $e_i$  (à priori inconnues) de chaque constituant

(1.23) 
$$e = \frac{\rho_1}{\rho} e_1 + \frac{\rho_2}{\rho} e_2$$

mais ces énergies internes (partielles) sont soumises à la contrainte que constitue la relation (1.23). Il est naturel, compte tenu du second principe de la thermodynamique, de définir l'entropie spécifique du mélange  $\sigma$  (e,  $\rho_1$ ,  $\rho_2$ ) par maximisation de la somme pondérée des entropies partielles sous la contrainte (1.23) sur les énergies internes partielles :

$$(1.24) \ \sigma\left(e, \rho_1, \rho_2\right) = \sup\left\{\frac{\rho_1}{\rho} s_1\left(e_1, \frac{1}{\rho_1}\right) + \frac{\rho_2}{\rho} s_2\left(e_2, \frac{1}{\rho_2}\right)\right\} \ , \text{avec} \ (1.23) \ .$$

La thermostatique ainsi définie pour le mélange permet de répartir l'énergie interne e entre les énergies internes partielles e<sub>1</sub> et e<sub>2</sub> de la relation (1.23) puisqu'on déduit simplement des conditions d'optimalité associées au problème (1.23)(1.24) l'égalité des températures partielles

(1.25) 
$$\frac{1}{T_1} \left( e_1, \frac{1}{\rho_1} \right) = \frac{1}{T_2} \left( e_2, \frac{1}{\rho_2} \right) .$$

De plus, si l'on exprime  $\sigma$  en fonction du volume spécifique  $\tau = \frac{1}{\rho}$  et de l'une des concentrations, on tire de (1.24)

(1.26) 
$$d\sigma = \frac{1}{T}de + \frac{1}{T}(p_1 + p_2) d\tau - \frac{1}{T}(\mu_1 - \mu_2) dC_1$$

ce qui démontre tout naturellement la loi de Dalton (1.21). Nous remarquons encore une fois qu'une analyse détaillée du modèle thermostatique du fluide étudié définit complètement le problème hyperbolique ainsi que l'entropie mathématique au sens de Lax. L'approche précédente a été étendue par G. Mehlman [1991] au cas de la dynamique des gaz en déséquilibre chimique et thermique.

#### 1.2. Analyse mathématique

L'analyse mathématique des équations aux dérivées partielle est le préalable indispensable pour construire de bonnes méthodes numériques. Nous nous sommes plus particulièrement intéressé à la prise en compte de conditions aux limites pour deux problèmes très différents : conditions fortement non linéaires pour les systèmes hyperboliques à une dimension d'espace, conditions très générales pour le problème de Stokes posé dans un domaine borné de topologie quelconque à deux ou trois dimensions d'espace.

La première étude a été menée en collaboration avec Philippe Le Floch (Dubois-Le Floch [1987], [1988], [1989]). Elle n'est pas reproduite dans la suite de ce mémoire car essentiellement développée dans la Thèse [1988-a]. Il s'agit de donner un sens faible à une condition limite de Dirichlet en x = 0 pour le système de lois de conservation posé dans le demi-espace  $\{x > 0\}$ :

(2.1) 
$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(U) = 0 , \quad x > 0 , \quad t > 0.$$

Nous avons, en considérant une perturbation visqueuse de l'équation (2.1), généralisé le travail que Bardos-LeRoux et Nédélec [1979] avaient mené pour une équation hyperbolique scalaire et montré que de cette façon, on obtient non seulement l'inégalité d'entropie classique valable à l'intérieur du domaine (voir par exemple Lax [1973]) :

(2.2) 
$$\frac{\partial}{\partial t} \eta (U) + \frac{\partial}{\partial x} q (U) \le 0$$

où q(U) est le flux d'entropie associé à l'entropie de Lax  $\eta$  et au flux physique f(U), mais également une inégalité d'entropie à la limite. Celle ci fournit une relation entre la valeur imposée  $U_0$  et la valeur U limite en x=0 des valeurs intérieures que nous supposons exister :

$$(2.3) q(U) - q(U_0) - d\eta(U_0) \bullet (f(U) - f(U_0)) \le 0.$$

Nous avons fait le lien avec l'approche par caractéristiques dans le cas particulier d'un système linéaire et avons proposé une autre formulation avec résolution du problème de

Riemann. Dans cette seconde formulation, la valeur limite U des valeurs intérieures au domaine de calcul est admissible si elle peut être valeur stationnaire (x=0) d'un problème de Riemann dont la donnée de gauche (x<0) est  $U_0$ . Nous avons démontré que pour un système linéaire de lois de conservation ou une équation hyperbolique non linéaire d'inconnue scalaire associée a une fonction de flux non convexe, ces deux notions coïncident. L'approche des conditions limites à l'aide d'un problème de Riemann fournit donc une méthode pratique de calcul détaillée plus loin dans ce mémoire.

Signalons qu'une intense activité a eu lieu en France sur le problème des conditions aux limites pour les systèmes hyperboliques non linéaires de lois de conservation indépendamment de notre travail; sans vouloir être complet, nous citons ici Audounet [1984], Mazet-Bourdel [1986], Benabdallah [1986], Benabdallah-Serre [1987], Dubroca-Gallice [1988]. Notons également le lien entre notre travail et l'inégalité d'entropie discrète proposée par Osher [1984], réinterprétée et exploitée par Tadmor [1987], Merriam [1987] et Khalfallah-Lerat [1989] entre autres :

(2.4) 
$$\int_{U_{j}}^{U_{j+1}} d^{2}\eta (U) \bullet (dU, \Phi_{j+1/2} - f(U)) \leq 0 .$$

L'inégalité (2.4) relie le flux numérique  $\Phi_{j+1/2}$  à l'interface entre les mailles j et j+1 (contenant respectivement les champs  $U_j$  et  $U_{j+1}$ ) à l'entropie mathématique  $\eta$ . Cette inégalité d'entropie discrète est **suffisante** pour assurer qu'une semi-discrétisation en espace continue en temps satisfait une inégalité d'entropie qui entraı̂ne que la convergence du schéma numérique ne peut avoir lieu que vers une fonction satisfaisant la condition faible d'entropie (2.2). Si, dans l'inégalité (2.4) nous prenons  $U_j = U_0$ ,  $U_{j+1} = U$  et supposons le flux numérique d'interface  $\Phi_{j+1/2}$  simplement donné par la relation

(2.5) 
$$\Phi_{i+1/2} = f(U_{i+1}) = f(U)$$
,

ce qui correspond à un schéma décentré à droite, alors l'inégalité (2.4) se réduit simplement à l'inégalité (2.3) d'entropie à la limite. Une relation plus profonde entre ces deux concepts d'entropie mathématique nous échappe encore à ce jour (janvier 1992), et nous pensons que de futurs travaux dans cette direction ne peuvent que voir le jour.

Le lien entre entre l'analyse mathématique abstraite des équations aux dérivées partielles et leur approximation numérique est donc très fort, comme nous venons de le voir. Pour la mécanique des fluides incompressibles, c'est la méthode numérique MAC-grill C (Harlow-Welch [1965], Arakawa [1966]) qui nous a motivé pour mieux comprendre le problème de Stokes. En effet, de nombreux logiciels commercialisés par des sociétés spécialisées et largement utilisés dans l'industrie tels par exemple le code de calcul PHOENICS de l'équipe du Professeur Spalding à l'Imperial College (Spalding [1972]) ou FLOW3D du groupe de Hirt et Sicilian à Los Alamos (voir par exemple Harper-Hirt-Sicilian [1983]) sont fondés sur cette méthode et se limitent donc à des maillages à l'aide de quadrangles ou d'hexaèdres.

Pour étendre cette approche (historique ?!) aux triangles et plus généralement aux maillages non-structurés afin de lui donner plus de souplesse pour la discrétisation de géométries complexes ou bien effectuer des raffinements appropriés de maillages dans le futur, nous avons cherché (Dubois [1991-92] et Chapitre 3) à formuler proprement d'un point de vue mathématique le problème de Stokes (version linéarisée des équations de Navier-Stokes autour d'un état de vitesse nulle) dans les espaces de Sobolev appropriés à une analyse mathématique de la discrétisation MAC-Grille C . Ces espaces de Sobolev sont inhabituels (nous renvoyons par exemple à Girault-Raviart [1986] pour une présentation classique de l'étude mathématique des fluides incompressibles et de leur approximation numérique par la méthode des éléments finis) et conduisent si l'on n'y prend pas garde, à des crimes variationnels. Il s'agit de rechercher la vitesse (respectivement le tourbillon, la pression) dans l'espace de Sobolev H (div,  $\Omega$ ) (respectivement H (rot,  $\Omega$ ),  $L^2(\Omega)$ ) qui lui est naturellement associé quand on interprète la discrétisation MAC-grille C avec les degrés de liberté classiques de l'élément fini de Raviart-Thomas [1977] et Nédélec [1980] (respectivement de Nédélec [1980], constant sur chaque élément).

En effet, le flux de masse (ou composante normale de la vitesse pour un fluide incompressible) sur chaque interface entre deux éléments (arêtes dans  $\mathbb{R}^2$ , faces dans  $\mathbb{R}^3$ ) constitue d'une part la "grille entrelacée de vitesse" de la méthode MAC-grille C et d'autre part le degré de liberté de l'élément fini conforme dans H(div) et de plus bas degré ; le tourbillon ponctuel sur les sommets du maillage (à deux dimensions d'espace) ou sa circulation sur une arête du maillage (à trois dimensions d'espace) sont caractéristiques à la fois de la "grille entrelacée pour le tourbillon" de la méthode MAC-grille C et des degrés de liberté ad hoc selon la dimension spatiale, à savoir le classique élément fini  $P_1$  à deux dimensions (voir par exemple Ciarlet [1978]) ou l'élément

vectoriel conforme dans H(rot) de Nédélec [1980] dans le cas de trois dimensions d'espace ; la pression, située sur la "grille de base" de la méthode MAC-grille C au centre de chaque maille peut très naturellement être interprétée comme constante dans chaque élément fini.

La figure 2.1, bien classique illustre notre propos pour le cas bidimensionnel alors que la figure 2.2 montre l'extension de la méthode sur un maillage en triangles. Ces remarques nous ont donc conduit à une nouvelle formulation variationnelle.

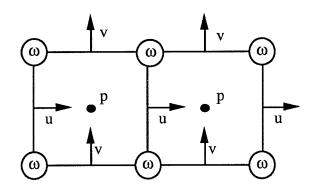


Figure 2.1. Degrés de liberté de la méthode MAC-grille C

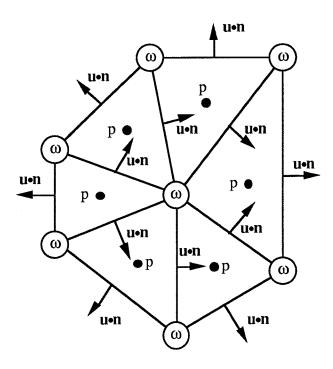


Figure 2.2. La méthode MAC-grille C en maillage triangulaire

Nous écrivons le problème de Stokes de la façon suivante, après diverses intégrations par parties explicitées au chapitre 3.

(2.6) 
$$\omega \in H(rot,\Omega), \ \mathbf{u} \in H(div,\Omega), \ \mathbf{p} \in L^2(\Omega)$$

(2.7) 
$$(\omega, \varphi) - (\mathbf{u}, \mathbf{rot} \varphi) = \langle \mathbf{n} \times \mathbf{u}, \varphi \rangle, \qquad \forall \varphi \in \mathbf{H}(\mathbf{rot}, \Omega)$$

(2.8) 
$$v (rot \omega, v) - (p, div v) = (f, v) - \langle p, v \cdot n \rangle, \forall v \in H(div, \Omega)$$

(2.9) 
$$(\operatorname{div} \mathbf{u}, q) = 0 , \qquad \forall q \in L^2(\Omega).$$

Cette formulation étend une formulation de la méthode MAC-grille C initialement proposée par Vivette Girault [1976].

Pour donner un sens plus précis au système (2.6)-(2.9) et en particulier obtenir une formulation variationnelle qui conduise à un problème bien posé, nous avons dû préciser le choix des conditions aux limites. Une condition limite essentielle sur le tourbillon, compte tenu du choix fait en (2.6) et de résultats classiques (voir Duvaut-Lions [1972]) porte nécessairement sur sa composante tangentielle :

(2.10) 
$$\omega \times \mathbf{n} = \theta_0 \quad \text{sur } \Gamma_{\theta}$$

sur une partie  $\Gamma_{\theta}$  de la frontière. De plus, pour donner un sens au second membre  $\theta_0$  de la relation (2.10), nous avons dû préciser l'espace des traces tangentielles sur une portion  $\Gamma_{\theta}$  de la frontière de l'espace de Sobolev des fonctions H (rot,  $\Omega$ ):

(2.11) 
$$\theta_0 \in (TH_{00}^{1/2}(\Gamma_\theta))', \operatorname{div}_{\Gamma}\theta_0 \in (H_{00}^{1/2}(\Gamma_\theta))',$$

retrouvant là par une autre méthode un résultat récent de Abboud-Starling [1991]. Pour donner un sens au membre de droite de (2.7) après relèvement de la condition de Dirichlet (2.10) pour le tourbillon, il est naturel d'introduire la condition de Neumann suivante sur le complémentaire  $\Gamma_t$  de  $\Gamma_\theta$  pour la composante tangentielle de la vitesse :

(2.12) 
$$\mathbf{n} \times \mathbf{u} = \sigma_0 \quad \text{sur } \Gamma_t , \quad \sigma_0 \in TH_{00}^{1/2}(\Gamma_t) .$$

On traite alors les conditions limites pour l'équation (2.8) avec les mêmes idées. On introduit donc une nouvelle partie  $\Gamma_m$  de la frontière (qui n'a a priori rien à voir avec la partition  $\Gamma_\theta$ ,  $\Gamma_t$  introduite ci-dessus!) et une condition de Dirichlet pour la composante normale du champ de vitesse:

(2.13) 
$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}_0 \quad \text{sur } \Gamma_{\mathbf{m}}$$

et il a été nécessaire, pour donner un sens à tous les termes présents dans la formulation variationnelle (2.7)-(2.9), de choisir une condition plus forte que celle qui est naturelle pour les traces des fonctions H (div,  $\Omega$ ) sur la partie  $\Gamma_m$  de la frontière. Nous avons pris

(2.14) 
$$g_0 \in H^{1/2}(\Gamma_m)$$
.

La condition de Neumann correspondante est donc posée sur la partie  $\Gamma_p$  de la frontière complémentaire de  $\Gamma_m$  et nous avons finalement les **deux** décompositions suivantes :

$$(2.15) \qquad \Gamma = \overline{\Gamma_{\theta}} \cup \overline{\Gamma_{t}} = \overline{\Gamma_{m}} \cup \overline{\Gamma_{p}}, \text{ avec } \Gamma_{\theta} \cap \Gamma_{t} = \Gamma_{m} \cap \Gamma_{p} = \emptyset.$$

La condition limite proprement dite s'écrit:

(2.16) 
$$p = \pi_0 \quad \text{sur } \Gamma_p , \quad \pi_0 \in H_{00}^{1/2}(\Gamma_p)$$

et l'on retrouve une condition limite de pression, introduite rigoureusement dans une formulation variationnelle du problème de Stokes par Bègue-Conca-Murat-Pironneau [1987] mais dans un cadre moins général.

Notons ici la forme intéressante que prennent les deux conditions de Fourier-Robin associées au couple (tourbillon, vitesse) d'une part et (vitesse, pression) d'autre part :

(2.17) 
$$\mathbf{n} \times \mathbf{u} + \alpha \mathbf{n} \times \omega \times \mathbf{n} = \sigma_0 \quad \text{sur } \Gamma_t$$

(2.18) 
$$p - \beta \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \pi_0 \quad \text{sur } \Gamma_p .$$

où les fonctions  $\alpha$  et  $\beta$  sont positives.

L'étude mathématique du problème de Stokes écrit sous la forme (2.6)-(2.9) avec les conditions aux limites (2.12)-(2.14) et (2.16) est alors fondé sur un résultat abstrait, détaillé dans Dubois [1991-92] qui introduit une "double condition inf-sup". L'une d'entre elles est particulièrement délicate à vérifier et, après réduction du problème, se ramène à l'unicité du problème de **Cauchy** pour l'équation de Laplace :

$$(2.19) \qquad -\Delta \, \phi \, = \, 0 \ , \quad \phi \, = \, 0 \ \ {\rm sur} \ \Gamma_0 \ , \ \frac{\partial \phi}{\partial n} \, = \, 0 \ \ {\rm sur} \ \Gamma_0 \ \ .$$

Nous avons donc supposé que la décomposition (2.15) de la frontière  $\Gamma$  vérifie la condition suivante :

(2.20) 
$$\Gamma_m \cap \Gamma_t \text{ contient une partie analytique } \Gamma_0 \text{ de mesure non nulle } \; ,$$

qui nous apparait quelque peu restrictive (une hypothèse telle que : "  $\Gamma_m \cap \Gamma_t$  contient une partie  $\Gamma_0$  de mesure non nulle " nous semble plus naturelle).

Notons pour terminer que pour démontrer divers points techniques de notre étude (Dubois [1991-92]) nous avons dû généraliser la formulation proposée par Bendali-Dominguez-Gallic [1985] des théorèmes de représentation de champs de vecteurs en somme d'un gradient, d'un rotationnel plus une fonction spéciale (voir par exemple Friedrichs [1955]) pour un domaine tridimensionnel. Nous présentons ces deux théorèmes classiques sous une forme unique et surtout plus générale. Le résultat s'énonce ainsi :

Soit une partition

(2.21) 
$$\Gamma = \overline{\Gamma_1} \cup \overline{\Gamma_2}$$
, avec  $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$ 

de la frontière  $\Gamma = \partial \Omega$  du domaine  $\Omega$  borné de  $\mathbf{R}^2$  ou  $\mathbf{R}^3$  (non simplement connexe a priori,  $\Gamma$  non connexe a priori). Nous introduisons l'espace suivant de fonctions spéciales

(2.22) 
$$H_{\Gamma_1,\Gamma_2}(\Omega) = \{ \varphi \in H^1(\Omega), \text{ div } \varphi = 0, \text{ rot } \varphi = 0, \\ \varphi \times \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_1, \quad \varphi \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_2 \}$$

qui est de dimension finie (ce qui constitue la première partie du Théorème) et nous notons  $P_{\Gamma_1,\Gamma_2}$  le projecteur orthogonal dans  $L^2(\Omega)$  sur  $H_{\Gamma_1,\Gamma_2}(\Omega)$ . Alors étant donné un champ de vecteurs  $\mathbf u$  dans  $L^2(\Omega)$ , il existe un unique potentiel scalaire  $\phi$  et un unique potentiel vecteur  $\psi$  tel que le champ  $\mathbf u$  se représente sous forme de trois composantes orthogonales

(2.23) 
$$\mathbf{u} = \nabla \varphi + \mathbf{rot} \, \psi + P_{\Gamma_1, \Gamma_2} \, \mathbf{u}$$

avec  $\phi$  et  $\psi$  déterminés de façon unique par la relation (2.23) sous les contraintes suivantes :

(2.24) 
$$\phi \in H^1(\Omega)$$
,  $\phi = 0$  sur  $\Gamma_1$  si mes  $\Gamma_1 \neq 0$ ,  $(\phi, 1)_{0,\Omega} = 0$  si mes  $\Gamma_1 = 0$ 

$$(2.25) \ \psi \in \ \mathbf{H}^1(\Omega), \ \text{div} \ \psi = 0, \ \psi \bullet \mathbf{n} = 0 \ \text{ sur } \ \Gamma_1 \ , \ \psi \times \mathbf{n} = 0 \ \text{ sur } \ \Gamma_2 \ , \ P_{\Gamma_2,\Gamma_1} \ \psi = 0.$$

Pour les deux cas particuliers "triviaux"  $(\Gamma_1, \Gamma_2) = (\emptyset, \Gamma)$  et  $(\Gamma_1, \Gamma_2) = (\Gamma, \emptyset)$ , notre résultat se "réduit" à l'approche classique (Bendali-Dominguez-Gallic [1985]) où l'on ne mélange pas les diverses conditions aux limites pour les potentiels scalaire et vecteur.

### 1.3. Analyse numérique fondamentale

La discrétisation des problèmes de mécanique des fluides peut être envisagée avec diverses méthodes numériques qu'on choisit de la façon la plus appropriée en fonction de multiples critères tels que le coût, la complexité de programmation sur ordinateur, la flexibilité à pouvoir approcher des géométries complexes et l'adéquation de la formulation discrète aux formulations mathématiques.

Nous exposons rapidement un travail relativement ancien sur les éléments finis mixtes, détaillons une série de travaux pour l'approximation des systèmes hyperboliques non linéaires qui s'apparentent classiquement à la technique des différences finies et présentons enfin une nouvelle approche pour la discrétisation des équations de Navier Stokes par la méthode des volumes finis sur un maillage non structuré.

En mécanique des fluides incompressibles, l'emploi des éléments finis est maintenant classique (voir par exemple Girault-Raviart [1986]). Nous nous sommes intéressés dans Dubois [1990-c] aux éléments finis mixtes de J.C. Nédélec que nous avions mis en oeuvre pour approcher numériquement l'équation du potentiel transsonique écrite à l'aide d'un potentiel vecteur qui permet de représenter le flux de masse (Dubois-Dupuy [1986]). Nous avons étudié théoriquement la convergence de l'approximation utilisée dans le cas d'un problème linéaire modèle. Il s'agit d'approcher un champ de vecteurs  ${\bf u}$  à divergence nulle dans un domaine  ${\bf \Omega}$  de  ${\bf R}^3$ , à frontière régulière, simplement connexe mais de frontière  ${\bf \Gamma}$  a priori non-connexe. Nous avons donc

(3.1) 
$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \operatorname{dans} \Omega.$$

Ce champ (de vitesse) est par ailleurs défini par la valeur de son tourbillon  $\,\omega\,$  et son flux sur la frontière :

(3.2) 
$$\operatorname{rot} \mathbf{u} = \boldsymbol{\omega} \operatorname{dans} \Omega$$

(3.3) 
$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g} \quad \text{sur } \Gamma.$$

Nous cherchons le champ u sous la forme d'un potentiel vecteur

(3.4) 
$$\mathbf{u} = \mathbf{rot} \, \mathbf{v} \quad \text{dans } \Omega$$

ce qui impose une condition sur le flux (voir par exemple Foias-Temam [1978]) :

(3.5) 
$$\int_{\Gamma_{i}} g \, d\gamma = 0 \quad \text{pour toute composante connexe } \Gamma_{j} \, de \, \Gamma.$$

Une condition de jauge

(3.6) 
$$\operatorname{div} \psi = 0 \quad \operatorname{dans} \Omega$$

est en général introduite (jauge de Coulomb) ainsi que diverses conditions sur les valeurs limites du vecteur  $\psi$  (détaillées par exemple au théorème 5 de la 3° partie) pour assurer l'unicité du potentiel vecteur.

Nous cherchons à approcher le vecteur  $\psi$  par l'élément fini conforme H(rot) de Nédélec [1980] et de plus bas degré : dans chaque élément K du maillage,  $\psi$  est une rotation infinitésimale

$$(3.7) \qquad \psi(\mathbf{x}) = \alpha + \beta \mathbf{x} \mathbf{x}, \ \mathbf{x} \in \mathbf{K}$$

et la conformité H(rot) c'est à dire la continuité de la trace tangentielle à l'interface entre deux éléments est assurée grâce à l'emploi de degrés de liberté associés aux arêtes du maillage :

(3.8) 
$$(\sigma_a, \psi) = \int_a \psi \, ds$$
, a arête du maillage.

Il est alors impossible de donner un sens non banal à la condition de jauge (3.6) et nous avons analysé une condition de jauge développée au Centre de Mathématiques Appliquées de l'Ecole Polytechnique (voir par exemple Roux [1984]) et plus pratique d'emploi que celle initialement proposée par J.C. Nédélec [1982]. La condition de jauge discrète consiste à enlever des degrés de liberté formant un arbre dans l'ensemble du graphe formé par les arêtes du maillage. L'analyse numérique de l'erreur d'approximation rot  $\psi_h$  – rot  $\psi$  en fonction des erreurs  $\omega_h - \omega$  et  $g_h - g$  est délicate car un grand arbitraire est laissé à l'utilisateur pour le choix pratique de la jauge, donc du potentiel  $\psi_h$ .

En effet, nous n'avons pas prouvé la stabilité de la norme  $L^2$  du potentiel vecteur  $\psi_h$  mais sous des hypothèses classiques de régularité du maillage, nous avons montré à l'aide d'une formulation mixte, la convergence de rot  $\psi_h$  vers rot  $\psi$  en norme  $L^2$ , avec une erreur d'ordre un en h, c'est à dire du même ordre que l'erreur d'approximation. De plus, il a fallu prendre en compte la courbure des éléments à la frontière afin d'avoir cohérence entre l'approximation du problème surfacique

(3.9) 
$$\operatorname{div}_{\Gamma} \psi \times \mathbf{n} = g \quad \operatorname{sur} \Gamma$$

et les éléments finis à l'intérieur du domaine. Nous avons développé une variante de l'élément tétraédrique de J.C. Nédélec qui permet une approximation exacte de la frontière courbe fondée sur le théorème de la projection orthogonale dans un voisinage tubulaire de la surface frontière (voir par exemple De Rham [1960]). Signalons que l'élément fini que nous avons utilisé pour les problèmes fluides est devenu populaire essentiellement pour les équations de Maxwell (voir par exemple les travaux récents de Abboud [1991] et Levillain [1991]).

Si les problèmes elliptiques sont susceptibles d'approximation grâce à des éléments finis puisque la formulation variationnelle des équations conduit à un problème mathématiquement bien posé, il n'en est pas de même pour les lois de conservation non linéaires de type hyperbolique, pour lesquelles l'emploi de formulations variationnelles est encore balbutiant (voir par exemple Hughes-Mallet [1986], Johnson-Szepessy [1987]). Les méthodes les plus simples et rustiques sont donc à la base des principaux codes de calcul actuels.

Nous nous sommes intéressés dans le cadre d'un cours CEA-EDF-INRIA à l'automne 1988 (Dubois [1989-e] et Chapitre 4.1) à l'approximation des conditions aux limites pour les équations d'Euler de la dynamique des gaz et avons comparé l'approche traditionnelle aux différences finies et la méthode des volumes finis. De façon plus précise, une méthode aux différences finies robuste, c'est à dire capable de capturer des ondes fortement non linéaires, suppose en pratique l'emploi d'un schéma conservatif (Lax-Wendroff [1960]), ce qui l'identifie alors complètement à une méthode de volumes finis. Les deux notions se distinguent lorsqu'on précise le schéma numérique à la **frontière** du domaine étudié, que nous choisissons par exemple égal à l'intervalle [0, 1]. Un maillage uniforme

$$(3.10) 0 = x_0 < x_1 < ... x_N = 1 x_j = jh$$

étant donné, la méthode des différences finies suppose que l'on a placé ses degrés de liberté "aux points de grille"  $x_j$  et l'on cherche la valeur inconnue  $u_j$  approchant la valeur inconnue du champ u au point  $x_j$ :

(3.11) 
$$u_i \approx u(x_i)$$
 (approache "cell vertex")

alors que les volumes finis utilisent des degrés de liberté qui sont ceux des éléments finis de degré zéro dans chaque élément  $]x_j, x_{j+1}[$  du maillage, c'est à dire la moyenne  $u_{j+1/2}$  de l'inconnue dans la maille :

(3.12) 
$$u_{j+1/2} \approx \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{j+1}} u(x) dx$$
 (approache "cell center").

Si l'on utilise une discrétisation de type (3.11), on ne peut plus construire simplement de schéma conservatif pour l'inconnue  $u_i$  à la frontière x = 0 de l'intervalle, et un "schéma de bord" doit être utilisé. Ce choix est toujours délicat et l'étude de la stabilité linéaire constitue en soi une théorie compliquée (Gustafsson-Kreiss-Sündström [1972]). Dans le cas de l'approximation numérique des équations de la dynamique des gaz, les ingénieurs font de leur mieux et linéarisent le problème (voir par exemple les relations de compatibilité de Veuillot-Viviand [1978] proposées à l'ONERA). Mais lorsque des ondes fortement non linéaires tapent la frontière, on atteint les limites de cette approche (la méthode numérique conduit à des résultats physiquement aberrants) comme le montre par exemple l'expérience de l'Aerospatiale (non publiée !) avec le code de calcul FLU3C de Borrel-Montagné-Diet-Guillen-Lordon [1989]. Avec la méthode des volumes finis, on peut écrire la loi de conservation sur tous les degrés de liberté (3.12) du maillage, et le problème numérique à la limite se présente sous la forme d'un flux inconnu. Cette écriture de la condition limite numérique est très naturelle avec le schéma de Godunov (voir par exemple Godunov-Zabrodine-Ivanov-Kraiko-Prokopov [1979]) mais n'a pas, à notre connaissance, été analysée aussi finement d'un point de vue mathématique que la technique des différences finies.

Nous avons proposé (Dubois [1987]) une approche des conditions aux limites numériques grâce à un problème de Riemann partiel (inspirée de travaux plus théoriques menés en collaboration avec Philippe Le Floch) qui permet de calculer le flux limite en présence de fortes non linéarités, même lorsque les conditions aux limites sont

incompatibles avec l'écoulement présent dans la dernière maille du domaine d'étude. Cette analyse en termes d'ondes non linéaires donne beaucoup de robustesse aux codes de calcul (voir encore par exemple l'expérience de l'Aerospatiale avec le même code de calcul FLU3C, toujours non publiée) et permet par exemple d'initialiser un calcul supersonique par un état de vitesse nulle sans avoir à changer de schéma limite en cours du calcul (voir les détails au chapitre 4.1).

Les ondes fortement non linéaires d'un problème de Riemann offrent, on l'a vu, une grande souplesse dans la prise en compte des conditions aux limites. Il convient de les calculer avec la plus grande précision possible dans le cas où le gaz étudié n'est plus un gaz parfait polytropique (relations (1.4) et (1.5)) mais un gaz réel à l'équilibre chimique et en particulier l'air de l'atmosphère terrestre pour les applications de rentrée dans l'atmosphère traitées à l'Aerospatiale. Nous nous sommes intéressé (Dubois [1989-b] et Chapitre 4.2) au calcul du flux numérique approché proposé par Osher [1981] dans le cas où les effets chimiques sont pris en compte à l'aide d'une table numérique (diagramme de Mollier) du type

$$(3.13) \qquad (\rho, e) \rightarrow p \ (\rho, e) \ ; \quad (\rho, e) \rightarrow c(\ \rho, e) \ ; \quad (\rho, e) \rightarrow s \ (\rho, e) \ .$$

Le point crucial dans le calcul du flux d'Osher est le calcul du point d'intersection des ondes de détente, c'est à dire de la 1-onde issue de l'état de gauche  $\,U_g\,$  avec la 3-onde issue de l'état de droite  $\,U_d\,$ , avant la reconstruction du flux avec sommation algébrique des divers effets (Dubois [1987]). Notons que le flux de Godunov exige aussi le calcul des intersections de type 1-détente / 3-choc , 1-choc / 3-choc , 1-choc / 3-détente , qui ne sont pas à prendre en compte avec le flux d'Osher.

Nous avons montré (Chapitre 4.2) qu'en introduisant une "fonction de détente" notée w et définie par

(3.14) 
$$w(\rho, s) = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{c(\rho', s)}{\rho'} d\rho'$$

qu'il est ensuite nécessaire de paramétrer avec le couple (pression, entropie) au lieu du couple (densité, entropie) comme à la relation (3.14), il suffit de résoudre l'équation scalaire d'inconnue p\* suivante

(3.15) 
$$w(p^*, s_g) + w(p^*, s_d) = u_g - u_d + w(U_g) + w(U_d)$$

pour calculer la pression des deux états intermédiaires constituant la solution multivaluée du problème de Riemann de données  $\,U_g$  et  $\,U_d$ .

Nous avons calculé numériquement cette fonction de détente w à partir des tables de Hilsenrath-Klein [1965] et de Srinivason-Tannehill-Weilmuenster [1987] et proposé un algorithme de résolution de l'équation (3.15) fondé sur le choix d'une discrétisation bilinéaire de la fonction w (p, s). Nous avons comparé notre approche avec une approximation simplifiée du flux d'Osher proposée quelques mois plus tôt par Abgrall-Montagné [1989] et avons testé la variabilité de la méthode lors du changement de diagramme de Mollier (Dubois [1989-c]). Ceci a bien entendu permis de valider le programme test développé à cette occasion et montrer la pertinence de notre approche, d'ailleurs confirmée par un travail indépendant et très voisin proposé quelques mois plus tard par des américains (Sureh-Liou [1990]).

La conclusion pratique de notre travail sur l'approximation numérique du flux d'Osher pour un gaz réel à l'équilibre chimique est toutefois un peu décevante. Notre algorithme, bien que très rigoureux, s'avère plus sensible aux défauts des tables thermodynamiques (pertes de convexite des potentiels par exemple) que l'approximation de Abgrall et Montagné et de ce fait ce dernier algorithme a été mis en œuvre dans la version opérationnelle du code de calcul CEL3GR développé au sein du département Mathématiques Appliquées d'Aerospatiale Les Mureaux (voir la cinquième partie de ce mémoire).

Un autre "solveur approché" du problème de Riemann très populaire a été proposé par Roe [1981]. Pour l'approximation de gaz réactifs, Guillaume Mehlman a développé en 1990 (Mehlman [1990]) une généralisation du travail de Roe fondée sur une interprétation du problème de Riemann en termes d'ondes de choc seulement, ce qui constitue l'approche duale de la précédente avec le solveur d'Osher. Pourtant, un défaut classique de l'approche de Roe est la violation possible de la condition d'entropie. Le travail de Guillaume Mehlman nous a motivés pour chercher ensemble (Dubois-Mehlman [1991], [1991-92], [1992] et Chapitre 4.3) une correction **non paramétrée** pour remédier à ce problème, afin de supprimer un paramètre bien gênant des corrections classiques (Harten-Hyman [1983], Harten [1983]). De plus, nous avons demandé à cette correction d'être une **fonction continue** des arguments à gauche et à droite du

problème de Riemann, propriété non satisfaite par la correction non paramétrée proposée par Roe lui même en 1985.

L'idée de notre correction peut s'exprimer très simplement dans le cas d'une loi de conservation scalaire

(3.16) 
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0.$$

La méthode de Roe ne dissipe pas l'entropie suffisamment si un point sonique est présent à l'interface entre les mailles numéros j et j+1, c'est à dire si

$$(3.17) f'(u_j) < 0 < f'(u_{j+1}) .$$

Nous décidons, au lieu de résoudre un problème de Riemann pour une approximation linéaire de la fonction de flux, tel qu'il est classique avec la méthode de Roe, de résoudre exactement un problème de Riemann pour une approximation non linéaire de la fonction de flux, qui satisfasse des conditions de continuité de la fonction flux et sa dérivée de part et d'autre de la discontinuité. La fonction de flux modifiée g vérifie donc par hypothèse :

(3.18) 
$$\begin{cases} g(u_j) = f(u_j) \\ g(u_{j+1}) = f(u_{j+1}) \end{cases}$$

(3.19) 
$$\begin{cases} g'(u_j) = f'(u_j) \\ g'(u_{j+1}) = f'(u_{j+1}) \end{cases} .$$

Elle reste affine hors de l'intervalle  $[u_j, u_{j+1}]$  et est polynomiale de degré 3 dans cet intervalle grâce à une interpolation classique de Hermite.

Le problème de Riemann associé aux données  $u_j$  à gauche,  $u_{j+1}$  à droite et au flux **non convexe** g admet une solution entropique unique (Oleinik [1957], Ballou [1970], Leroux [1979]) que nous avons explicitée et qui permet de définir la correction entropique que nous proposons pour la méthode de Roe.

Dans le cas où le flux f est une fonction convexe, bien que le flux de Roe corrigé par nos soins ne définisse pas un E-schéma (notion proposée par Osher [1984]), la condition d'entropie est satisfaite par les solutions limites du schéma défini par la méthode des lignes (semi-discrétisation en espace seulement) grâce aux résultats

classiques de Di Perna [1983] et à une inégalité d'entropie analogue à l'inégalité (2.4) dans le cas particulier de l'entropie quadratique. Cette dernière propriété, détaillée au chapitre 4.3, se ramène à une propriété des cubiques qui peut s'exprimer très simplement d'un point de vue géométrique mais qui ne nous était pas connue.

Dans le cas d'un système hyperbolique de lois de conservation ne contenant que des champs vraiment non linéaires, nous avons établi une inégalité d'entropie (2.4) dans le cas où les données sont assez proches. La technique utilisée est pour l'essentiel due à Osher [1984]; nous l'avons adoptée pour un flux de Roe quelconque. Le résultat obtenu, dont la preuve est très technique, montre finalement que la méthode de Roe munie de notre correction d'entropie a des propriétés analogues à celles du flux d'Osher [1981], établies par Osher-Solomon [1982].

Si la solution approchée du problème de Riemann constitue l'étape essentielle pour construire un schéma à l'ordre un de précision, le passage à une méthode plus précise d'ordre deux est indispensable pour assurer un caractère opérationnel aux prévisions numériques fournies par les codes de calcul aérodynamiques qui utilisent un schéma décentré. Nous avons choisi de concentrer notre effort sur la méthode MUSCL (Multidimensional Upstreamcentered Scheme for Conservation Laws) de Van Leer [1979], très utilisée à l'Aerospatiale (voir par exemple la partie 5 de ce mémoire).

Nous avons dans un premier temps étudié (Dubois [1990-b] et Chapitre 4.4) l'approximation d'une loi de conservation scalaire à une dimension d'espace (3.16) par un schéma de type MUSCL de Van Leer : le flux  $f_{j+1/2}$  d'interface est calculé à l'aide de la relation

(3.20) 
$$f_{j+1/2} = \Phi(u_{j+1/2}, u_{j+1/2})$$

où  $\Phi$  (•, •) est le flux du premier ordre qui permet d'approcher la solution d'un problème de Riemann et  $u_{j+1/2}^{\pm}$  les valeurs à gauche et à droite extrapolées de part et d'autre de l'interface j+1/2.

L'approche classique de Van Leer suppose que les valeurs  $u_{j+1/2}$  et  $u_{j+1/2}$  sont issues d'une interpolation affine du champ u dans la jième cellule centrée en  $x_i$ :

(3.21) 
$$u_h(x) = u_i + s_i(x - x_i)$$
,

la pente  $s_j$  étant calculée par différence finie centrée et ensuite "limitée". Dès l'automne 1988 (Dubois [1988-b]), nous avons proposé de remplacer cette vision traditionnelle par une approche plus générale : on suppose que  $u_{j+1/2}$  est une fonction **non linéaire** des trois valeurs du champ u dans la maille numéro j et les deux mailles voisines, c'est à dire

(3.22) 
$$u_{j+1/2} = L(u_{j-1}, u_j, u_{j+1})$$

avec une hypothèse analogue pour  $u_{j+1/2}$ . Nous montrons alors simplement que l'homogénéité, l'invariance par translation et l'invariance dans la symétrie gauche-droite réduisent la fonction  $L(\bullet, \bullet, \bullet)$  à un simple limiteur de pente. Nous avons alors

(3.23) 
$$u_{j+1/2} = u_j + \frac{1}{2} \varphi(r_j) (u_{j+1} - u_j)$$

$$(3.24) u_{j+1/2}^+ = u_{j+1} - \frac{1}{2} \phi \left(\frac{1}{r_j}\right) (u_{j+1} - u_j)$$

(3.25) 
$$r_{j} = \frac{u_{j} - u_{j-1}}{u_{j+1} - u_{j}} .$$

La fonction  $r \to \varphi(r)$  décrit donc complètement l'interpolation non linéaire. Ce limiteur est identiquement nul pour le schéma du premier ordre, et vaut identiquement 1 pour le schéma instable. L'enjeu des schémas modernes est de transformer des schémas linéairement instables en schémas stables pour des normes ad hoc. Le choix de la norme BV conduit aux schémas très populaires dits à variation totale décroissante (voir par exemple Harten [1983] et Sweby [1984]).

Nous avons proposé d'adjoindre à la condition de monotonie (Van Leer [1973]) une propriété de conservation de la convexité. On peut l'énoncer ainsi :

si la suite des valeurs  $u_{j-1}$ ,  $u_j$ ,  $u_{j+1}$  est la restriction ponctuelle d'une fonction convexe, alors il en est de même pour la suite contenant également les valeurs interpolées dans la maille numéro j: la suite  $u_{j-1}$ ,  $u_{j-1/2}$ ,  $u_j$ ,  $u_{j+1/2}$ ,  $u_{j+1}$  est nécessairement la restriction d'une fonction convexe.

On suppose bien entendu que l'on a une propriété analogue si la suite  $u_{j-1}$ ,  $u_j$ ,  $u_{j+1}$  est concave au lieu d'être convexe. On établit alors des conditions sur le limiteur pour assurer monotonie et convexité de l'interpolation non linéaire :

(3.26) 
$$\max (0, r) \le \varphi(r) \le 1$$
  $r \le 1$ 

(3.27) 
$$1 \le \varphi(r) \le \min(r, 2)$$
  $r \ge 1$ 

$$(3.28) \varphi(r) \le r \varphi\left(\frac{1}{r}\right) r \ge 1.$$

Le cas d'égalité dans la relation (3.28) autorise une interpolation affine du type (3.21) à l'intérieur de la maille j, mais dans le cas contraire, cette interpolation interne ne peut pas être affine et n'est même pas précisée dans notre approche.

Nous avons ensuite étudié la méthode des lignes qui, rappelons le, consiste à discrétiser le problème (3.16) en espace seulement à l'aide du flux numérique défini à la relation (3.20). Lorsque d'une part la donnée  $\{u_j, j \in \mathbf{Z}\}$  appartient à  $L^{\infty}(\mathbf{Z}) \cap BV(\mathbf{Z})$ , que d'autre part le flux du premier ordre  $\Phi$  correspond à un flux monotone  $(\Phi_u(u, v) \ge 0, \Phi_v(u, v) \le 0)$  et qu'enfin le limiteur  $\phi$  satisfait les conditions de type TVD suivantes en plus des conditions (3.26) à (3.28)

(3.29) 
$$\varphi(r) \le (\alpha - 2) r \qquad r \le 0$$

$$(3.30) \varphi(r) \le \alpha r > 0$$

où  $\alpha$  est un paramètre réel compris entre 0 et 2, nous avons montré (Chapitre 4.4, Théorème 3.1) que la méthode des lignes est bien posée dans  $L^{\infty}(\mathbf{Z}) \cap BV(\mathbf{Z})$  pour les temps longs, avec stabilité dans cet espace :

(3.32) 
$$\| \mathbf{u}(t) \|_{BV(\mathbf{Z})} \le \| \mathbf{u}_0 \|_{BV(\mathbf{Z})}$$
.

Ce résultat étend les travaux de Sanders [1983] et Osher [1985]. La difficulté essentielle tient à ce qu'on n'a **pas** supposé que la suite  $\{u_j, j \in \mathbf{Z}\}$  appartient à  $L^1(\mathbf{Z})$ , ni qu'elle vérifie une hypothèse de périodicité comme dans les travaux antérieurs. Un résultat très

voisin a été proposé indépendamment du notre par Lions-Souganidis [1990]. Les conditions (3.26), (3.27), (3.29) et (3.30) dans le cas particulier  $\alpha = 2$  étaient connues depuis Sweby [1984].

Nous avons également étudié l'ordre du schéma au sens des différences finies (voir la relation 4.3 du chapitre 4.4) et constaté que, à la condition classique de dérivabilité en  $\, r=1 \,$ , on peut obtenir l'ordre deux de précision d'un tel schéma TVD sous la condition supplémentaire

$$(3.33) \qquad \varphi(1) + \varphi(3) = 2$$

Cette propriété de maintien de l'ordre deux à un extremum était considérée a priori comme exclue dans la communauté des hyperboliciens. Dans le cas où l'on discrétise en temps la méthode des lignes par un schéma de Heun à deux pas, on peut maintenir à la fois l'ordre deux (même aux extrema non soniques) et la propriété de décroissance de la variation totale sous une condition de Courant et une condition supplémentaire (propriété 5.3, chapitre 4.4) qui généralise la relation (3.30). Nous avons ensuite cherché si un limiteur satisfaisant à toutes ces conditions existe réellement, ce qui nous a conduit à en construire un, appelé "limiteur de Lagrange", défini par les relations

(3.34) 
$$\varphi(r) = \begin{cases} 0 & r \le -3 \\ \frac{1}{4}(r+3) & -3 \le r \le -1 \\ -\frac{r}{2} & -1 \le r \le 0 \\ \frac{5}{2} & 0 \le r \le \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4}(r+3) & \frac{1}{3} \le r \le 3 \\ \frac{3}{2} & r \ge 3 \end{cases}$$

et représenté à la figure 3.1. La dénomination tient au fait que pour r entre -3 et -1 d'une part, entre 1/3 et 3 d'autre part, l'interpolation obtenue correspond tout simplement à l'interpolation de Lagrange par une parabole. Cette idée avait été initialement proposée par Leonard [1979]. Nous avons testé la validité de nos calculs algébriques par des tests numériques pour l'advection linéaire d'un profil régulier, et avons constaté que le limiteur de Lagrange permet des résultats aussi bons que le schéma UNO2 de Harten et Osher [1987], qui utilise sept points au lieu de cinq.

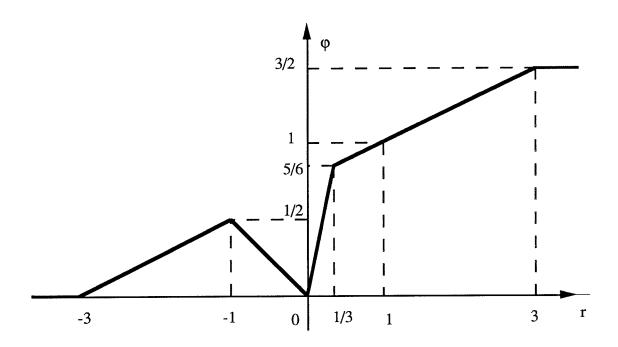


Figure 3.1. Limiteur de Lagrange

Nous avons dans un autre travail (Dubois [1991-b], Chapitre 4.5) comparé le nouveau limiteur de Lagrange avec d'autres plus classiques pour un problème modèle d'advection stationnaire représenté par l'équation de Burgers avec un terme source, ce qui permet par exemple de représenter les principaux effets non linéaires qui se développent dans une tuyère divergente. Cette étude a consisté à mettre en évidence des variations de la vitesse de convergence vers l'état stationnaire par certaines variations de paramètres numériques. Contrairement à une expérience acquise à l'Aerospatiale pour des codes de calcul plus complexes où le changement de limiteur de pente non linéaire peut inhiber ou améliorer la convergence en temps vers l'état stationnaire, ces variations n'ont pas débouché sur des conclusions analogues : le changement de limiteur de pente n'a que peu d'influence sur la vitesse de convergence vers l'état stationnaire. Le problème de convergence en temps de certains codes de calcul opérationnels reste donc encore, à ce jour (février 1992), largement ouvert.

Ayant étudié plusieurs points délicats de l'approximation des systèmes hyperboliques de lois de conservation et en particulier des équations d'Euler de la dynamique des gaz, nous avons envisagé le passage aux équations de Navier-Stokes. Il s'agit du modèle bien classique où les phénomènes de dissipation sont modélisés par un terme de viscosité classique du second ordre et les transferts de chaleur par la loi de

Fourier. Ce changement de modèle le plus significatif porte sur les conditions aux limites en paroi ; à une condition de non-pénétration proposée par les équations d'Euler, le modèle de Navier-Stokes du fluide visqueux propose des conditions d'adhérence, entraînant la présence d'une couche limite entre la paroi et la zone du fluide où les effets visqueux peuvent être négligés.

Nous avons étudié (Dubois [1989-d] et Chapitre 4.6) le problème de l'approximation des équations de Navier-Stokes par la méthode des volumes finis non-structurés. Il s'agit de l'extension naturelle des techniques opérationnelles que nous avons développées pour les équations d'Euler (voir les chapitres 5.1 et 5.2). Pour l'approximation de termes du second ordre, nous avons commencé notre étude par l'approximation de l'équation de Laplace par des volumes finis. Un cas test classique de Kershaw [1981] nous a dans un premier temps convaincu de l'importance d'avoir un schéma qui laisse invariant les fonctions affines, idée déjà connue dans le contexte des volumes finis, entre autres par Rivas [1982]. Avec la collaboration de Florence Arnoux, nous avons étudié divers schémas de volumes finis pour le laplacien. Dans ce cas, il suffit d'approcher la dérivée normale à l'interface entre deux volumes de contrôle par une combinaison bien choisie des valeurs voisines. Des tests sur le problème de Kershaw (Chapitre 4.6) ont montré la puissance de cette idée très simple.

Dans le cas des équations de Navier-Stokes, la forme algébrique particulière du flux diffusif permet de ramener son calcul par une méthode de volumes finis à l'évaluation du gradient d'un champ scalaire à l'interface entre deux mailles. Les idées initiales développées au Chapitre 4.6, fondées sur la méthode des différences finies dans des directions particulières du maillage ont été progressivement abandonnées au bénéfice d'une approche générale que nous décrivons dans les paragraphes qui suivent.

Pour calculer le gradient d'une fonction sur un maillage non structuré avec la méthode des volumes finis, nous proposons (Dubois [1992] et Chapitre 4.7) une méthode très générale. L'idée de base est très simple : connaissant une valeur moyenne (ou une valeur ponctuelle au centre des mailles) d'un champ scalaire discret u , nous évaluons le gradient de u à l'interface f entre deux mailles à l'aide d'une combinaison linéaire du type

qui tient compte à la fois du caractère **local** et **linéaire** de la dérivation. Il convient alors de choisir au mieux le voisinage V(f) de la face f qui contient les divers degrés de liberté voisins  $\sigma$  et le jeu de coefficients  $\alpha(f,\sigma)$  de la combinaison (3.35). Le choix du voisinage V(f) est fixé (voir les détails Chapitre 4.7) de sorte que son cardinal ne dépende pas du choix de la face f, malgré l'hypothèse d'un maillage de type nonstructuré.

Les coefficients  $\alpha(f, \sigma)$  sont déterminés en utilisant une idée contenue dans l'analyse mathématique de la méthode des éléments finis (e. g. Ciarlet [1978]). La relation (3.35) est supposée **exacte** pour une famille LS(f) de fonctions tests u(x) de sorte que la représentation (3.35) soit elle même identiquement vérifiée pour ces fonctions test particulières. Cela conduit à résoudre un système linéaire d'inconnues  $\alpha(f, \sigma)$  qui est inversible en pratique.

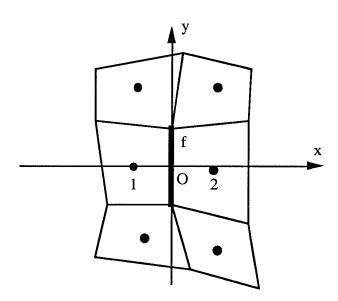


Figure 3.2. Voisinage d'une interface pour le calcul du gradient (cas d'un maillage en quadrangles structurés)

Dans le cas d'un maillage cartésien à deux dimensions d'espace par exemple, les interfaces f séparent les degrés de liberté placés aux centres des cellules d'indices (i, j) et sont paramétrées par (i+1/2, j) ou (i, j+1/2). Si nous étudions une face f de la première famille pour fixer les idées, le voisinage V(f) est formé des six degrés de liberté présentés figure 3.2. Il peut être défini de nombreuses façons. En maillage structuré, l'interface a pour "numéro" naturel (i+1/2, j) et l'on a donc :

(3.36) 
$$V(i+1/2, j) = \{ u kl, k = i \text{ ou } i+1, l = j-1, j \text{ ou } j+1 \}.$$

L'espace LS(f) des fonctions de base privilégie la direction de l'interface. Nous l'avons choisi dans ce cas sous la forme d'un produit tensoriel, ce qui est naturel compte tenu du choix du maillage:

(3.37) 
$$LS(f) = P_1(x) \otimes P_2(y)$$

où  $P_1(x)$  (respectivement  $P_2(y)$ ) est l'espace des polynomes en x (respectivement en y) de degré inférieur ou égal à un (respectivement à deux). Aux six degrés de liberté V(f) correspondent globalement six fonctions de base de l'espace LS(f) qui définissent une famille de fonctions test. Nous avons bien entendu :

(3.38) Base de l'espace 
$$LS(f)(f) = \{1, x, y, xy, y^2, xy^2\}$$

et le système linéaire d'inconnues  $\alpha(f, \sigma)$  obtenu en supposant la représentation (3.35) exacte pour les fonctions u(x, y) introduites à la relation (3.38) définit complètement les coefficients  $\alpha(f, \sigma)$ . Dans ce cas précis, nous avons

(3.39) 
$$\nabla u_{i+1/2, j} = \frac{1}{\Delta x} (u_{i+1, j} - u_{i, j}) \mathbf{n}(f) + \frac{1}{4\Delta y} (u_{i, j+1} + u_{i+1, j+1} - u_{i, j-1} - u_{i+1, j-1}) \tau(f).$$

ce qui correspond exactement au schéma classique aux différences finies centrées.

Le chapitre 4.7 développe ces idées, en particulier dans le cas où des degrés de liberté sont à prendre en compte sur la frontière (valeur imposée du champ u à la frontière ou valeur imposée de sa dérivée normale). Nous y détaillons également le cas tridimensionnel où nous supposons que des hexaèdres, des tétraèdres ou des prismes sont présents dans le maillage, hypothèse très générale qui nous a conduit à proposer un algorithme de "mariage des sous-espaces" et à l'adapter à divers cas particuliers d'un point de vue à la fois géométrique et topologique.

Cette partie du mémoire relative à l'analyse numérique fondamentale des schémas numériques pour l'approximation numérique des équations d'Euler et de Navier Stokes nous a permis d'étudier les conditions aux limite pour les fluides parfaits, les solutions

approchées pour l'approximation du problème de Riemann, les limiteurs de pente qui caractérisent l'approximation MUSCL et l'approximation des flux visqueux en maillages non-stucturés. Pour chacune de ces questions, il est remarquable de constater que, malgré tous les efforts déployés depuis plus de trente ans, des progrès encore importants d'un point de vue mathématique sont encore à accomplir dans l'avenir.