# Résolution numérique du problème de Riemann

Dans ce premier document, nous étudions la résolution exacte et approchée du problème de Riemann pour la dynamique des gaz. Il s'agit d'un problème posé à une dimension d'espace qui correspond à une condition initiale formée de deux états constants séparés par une discontinuité. Physiquement, cette description mathématique modélise le dispositif expérimental connu sous le nom de "tube à choc". Numériquement, la résolution efficace du problème de Riemann est à la base des schémas décentrés modernes et constitue en quelque sorte "l'équation du second degré" de l'hyperbolicien. Nous adoptons le plan suivant : cas du gaz parfait polytropique dans une première partie, extension aux modèles réactifs dans une seconde partie avant de présenter dans une troisième partie quelques approximations classiques : schéma de Roe et d'Osher, décomposition de flux de van Leer.

# 1) Rappels succincts de dynamique des gaz.

• On étudie un gaz parfait soumis à un mouvement de vitesse variable dans l'espace et dans le temps. Les inconnues du problème sont donc les grandeurs thermodynamiques du gaz (densité  $\rho$ , énergie interne e, température T, pression p). On suppose dans ce qui suit que le gaz étudié est un gaz parfait polytropique, c'est à dire a des chaleurs spécifiques  $C_v$  (à volume constant) et

Chapitre 1 du cours à l'Institut pour la Promotion des Sciences de l'Ingénieur [CDV92], septembre 1992. Traduction en "T<sub>E</sub>X" juillet 2003. Edition février 2011 ; 32 pages.

 $C_p$  (à pression constante) qui ne dépendent pas des variables thermodynamiques de température et de pression ; on note  $\gamma\,$  leur rapport :

(1.1) 
$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} (= \text{ constante}),$$

et on suppose de plus que que le gaz obéit à la loi d'état des gaz parfaits qui peut s'écrire sous la forme suivante :

(1.2) 
$$p = (\gamma - 1) \rho e$$
.

De plus, l'énergie interne et la température sont reliées entre elles par la loi de Joule-Thomson

(1.3) 
$$e = C_v T$$
.

• Le mouvement est décrit dans l'approche proposée par Euler au XVIII° siècle avec un champ de vitesse inconnuuqui est une fonction de l'espace x et du temps t :

(1.4) 
$$u = u(x, t).$$

Dans la suite de ce chapitre, sous supposerons pour simplifie que l'espace x n'a qu'une dimension ( $x \in \mathbb{R}$ ). Nous avons donc quatre fonctions inconnues (densité, vitesse, pression, énergie interne) reliées entre elles par la loi d'état (1.2). Il convient de trouver trois équations pour fermer le problème.

• La physique nous indique que la masse, l'impulsion et l'énergie totale sont des grandeurs conservées dans la nature, au moins dans le cadre de la physique classique de Galilée, cadre qui nous sert de référence ici, avec par exemple l'ouvrage de Landau-Lifchitz [LL54]. Quand on écrit la conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie dans un volume infinitésimal dx advecté d'une célérité u(x, t) exactement égale à la vitesse moyenne des molécules du gaz, on trouve [LL54] les lois de conservation sous la forme d'opérateurs de divergence :

(1.5) 
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) = 0$$

(1.6) 
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = 0$$

(1.7) 
$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho \, u^2 \, + \, \rho \, e \right) \, + \, \frac{\partial}{\partial x} \left( \left( \frac{1}{2} \rho \, u^2 \, + \, p \right) u \, + \, p \, u \right) \, = \, 0 \, .$$

• On introduit alors l'énergie totale E par unité de volume (dite aussi énergie totale spécifique)

$$(1.8) E = \frac{1}{2}u^2 + e$$

et le vecteur W des "variables conservatives" ou plus exactement conservées :

(1.9) 
$$W = \left(\rho, \rho u, \rho E\right)^{\mathsf{t}}.$$

Les lois de conservation (1.5) à (1.7) prennent alors la forme synthétique suivante

(1.10) 
$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}F(W) = 0$$

où le vecteur de flux  $W \longmapsto F(W)$  admet l'expression :

(1.11) 
$$F(W) = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho u E + p u)^{t}.$$

• Les système (1.10) forme un système hyperbolique non linéaire (on dit parfois "quasilinéaire") de lois de conservation. On ne sait quasiment rien dire de l'existence d'une solution  $(x, t) \mapsto W(x, t)$  lorsque le temps t n'est plus très petit, même si la consition initiale W(x, 0) est une fonction régulière de la variable d'espace x. Des ondes non linéaires présentes dans le système (1.10) créent des discontinuités, ce qui rend l'étude mathématique générale du système (1.10) très délicate.

• Le second principe de la thermodynamique peut être introduit explicitement pour un gaz parfait polytropique en mouvement. L'entropie spécifique s est une fonction des variables d'état thermodynamique p et  $\rho$ :

(1.12) 
$$s = \frac{\rho_0^{\gamma}}{p_0} \frac{p}{\rho^{\gamma}}$$

et on peut voir (avec un calcul élémentaire de quelques lignes laissé au lecteur) que l'entropie mathématique suivante :

(1.13) 
$$\eta(W) = -\rho s$$

admet un flux d'entropie  $\xi(W)$  au sens de la théorie de Lax [Lax71] de la forme

(1.14) 
$$\xi(W) = -\rho \, u \, s \, .$$

Le second principe de croissance de l'entropie spécifique au cours du temps prend alors la forme "conservative" suivante :

(1.15) 
$$\frac{\partial}{\partial t}\eta(W) + \frac{\partial}{\partial x}\xi(W) \leq 0.$$

L'inégalité (1.15) est une égalité pour les solutions régulières  $W(\bullet, \bullet)$  de la loi de conservation (1.10). Elle est à prendre au sens des distributions pour une solution faible  $W(\bullet, \bullet)$  de (1.10).

• L'entropie (1.13) est une fonction strictement convexe des variables conservées si la température est positive (voir par exemple notre preuve dans [Du90b]). On peut introduire la dérivée (de Fréchet)

(1.16) 
$$\mathrm{d}\eta(W) = \phi \cdot \mathrm{d}W$$

qui définit les variables entropiques  $\phi$ . Le calcul des variables entropiques est élémentaire à partir de l'expression traditionnelle du second principe. Dans un volume V qui contient une masse M, une énergie interne  $\mathcal{E}$  et une entropie Squi est une fonction extensive (homogène de degré un) des variables précédentes, *i.e.* 

(1.17) 
$$S = \Sigma(M, V, \mathcal{E}),$$

la relation différentielle entre ces grandeurs s'exprime à l'aide de la relation classique :

(1.18) 
$$\mathrm{d}\mathcal{E} = T \,\mathrm{d}S - p \,\mathrm{d}V + \mu \,\mathrm{d}M.$$

Les grandeurs globales sont reliées simplement aux grandeurs correspondantes par unité de masse grâce à l'ensemble des relations suivantes :

(1.19) 
$$M = \rho V, \quad \mathcal{E} = e M, \quad S = s M.$$

L'entropie mathématique  $\eta(\bullet)$  s'exprime simplement en avec la fonction  $\Sigma(\bullet)$  :

(1.20) 
$$\eta(W) = -\Sigma(\rho, 1, \rho e).$$

Compte tenu des relations (1.8) et (1.18), on dérive facilement la relation (1.20) et il vient

(1.21) 
$$d\eta(W) = \frac{1}{T} \left( \mu - \frac{u^2}{2} \right) d\rho + \frac{u}{T} d(\rho u) - \frac{1}{T} d(\rho E).$$

# 2) Problème de Riemann pour le gaz parfait.

### 2.1) Ondes non linéaires autosemblables.

• On construit dans un premier temps diverses solutions particulières du problème de Riemann qui, rappelons le, consiste à chercher une solution entropique W(x, t) ( $x \in \mathbb{R}, t > 0$ ) du problème suivant :

(2.1) 
$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}F(W) = 0$$

(2.2) 
$$W(x, 0) = \begin{cases} W_g, & x < 0 \\ W_d, & x > 0. \end{cases}$$

Nous remarquons d'abord que la loi de conservation (2.1) est **invariante par** changement d'échelle d'espace-temps. En effet, sous l'action de la transformation  $(x, t) \mapsto T_{\lambda}(x, t) = (\lambda x, \lambda t)$  paramétrée par  $\lambda > 0$ , toute solution (faible)  $W(\bullet, \bullet)$  de (2.1) donne naissance à une nouvelle solution faible  $T_{\lambda} W(x, t) \equiv W(T_{\lambda}(x, t))$ . Comme la condition initiale est invariante par dilatation spatiale, c'est à dire

$$(2.3) W(\lambda \, x \, , \, 0) \; = \; W(x \, , \, 0) \; , \lambda \, > \, 0 \; , \quad x \in {\rm I\!R} \, , \; \, x \neq 0 \, ,$$

l'hypothèse d'unicité de la solution du problème (2.1)(2.2) entraı̂ne facilement que la solution  $W(\bullet, \bullet)$  doit être autosemblable, ce qu'on exprime par la relation

$$(2.4) \qquad W(\lambda x, \lambda t) = W(x, t), \qquad \lambda > 0.$$

La relation (2.4) exprime donc que la solution W(x, t) doit être recherchée de façon autosemblable, c'est à dire comme fonction de  $\frac{x}{t}$  seulement (voir à ce sujet Landau-Lifchitz [LL54] par exemple) :

(2.5) 
$$W(x, t) = U(\xi), \qquad \xi = \frac{x}{t}.$$

• On cherche dans un premier temps une solution régulière  $U(\xi)$ . On injecte la représentation (2.5) dans l'équation (2.1) et on en tire :

(2.6) 
$$dF(U(\xi)) \bullet \frac{dU}{d\xi} = \xi \frac{dU}{d\xi}.$$

On en déduit que ou bien  $\frac{dU}{d\xi}$  est nul, ce qui correspond au cas trivial d'un état constant, ou bien ce vecteur est non nul, et il est nécessairement égal à un vecteur propre R(W) de la matrice jacobienne dF(W), ce dernier vérifiant la relation classique :

(2.7) 
$$dF(W) \bullet R(W) = \lambda(W) R(W)$$

dans le cas particulier où  $W = U(\xi)$ . Par identification entre les relations (2.5) et (2.7), on en déduit que  $\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\xi}$  et R(U) sont proportionnels et on en tire également

(2.8) 
$$\lambda(U(\xi)) = \xi.$$

Nous venons de trouver les conditions qui permettent de construire une **onde détente**.

• On peut également supposer la fonction  $\xi \mapsto U(\xi)$  discontinue en  $\xi = \sigma$ . Si on note avec un crochet [] la discontinuité d'un champ arbitraire, on dispose alors des relations de Rankine et Hugoniot :

(2.9)  $\left[F(U)\right] = \sigma\left[U\right]$ 

qui reviennent à exprimer que la fonction discontinue  $U(\xi)$  est solution (en un sens faible, voir Lax [Lax73] par exemple) de l'équation (2.1). On construit de cette façon une **onde de choc**.

### 2.2) Ondes de détente.

• Nous avons vu au premier paragraphe que la construction d'une onde de détente est associée à une valeur propre du jacobien dF(W). Dans le cas des équations d'Euler d'un gaz parfait polytropique, ces valeurs propres se calculent facilement en utilisant une forme non conservative des équations :

(2.10) 
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

(2.11) 
$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

(2.12) 
$$\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} = 0$$

obtenue en faisant apparaître l'entropie spécifique s. Nous posons donc

(2.13) 
$$Z(W) = (\rho, u, s)^{t}$$
  
(2.14) 
$$B(Z) = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 \\ \frac{c^{2}}{\rho} & u & \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial s}(\rho, s) \\ 0 & 0 & u \end{pmatrix}$$

et les équations d'Euler écrites sous la forme  $(2.10)\mathchar`-(2.12)$  s'écrivent matriciellement sous la forme

(2.15) 
$$\frac{\partial Z}{\partial t} + B(Z) \cdot \frac{\partial Z}{\partial x} = 0.$$

La vitesse du son c utilisée à la relation (2.14) est définie par

(2.16) 
$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho, s)$$

et pour un gaz parfait à chaleurs spécifiques constantes de rapport  $\,\gamma\,$  on a :

(2.17) 
$$c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}.$$

• Il suffit de diagonaliser la matrice B(Z) pour diagonaliser la matrice dF(W), ce qui simplifie notablement les calculs dans la suite. En effet, on peut introduire la variable Z dans l'équation (2.1) :

(2.18) 
$$dW(Z) \bullet \frac{\partial Z}{\partial t} + dF(W) \bullet dW(Z) \bullet \frac{\partial Z}{\partial x} = 0$$

ce qui, par rapprochement avec la relation (2.15), montre que l'on a (2.19)  $B(Z) = (dW(Z))^{-1} \cdot dF(W) \cdot dW(Z)$ .

Cette relation de conjugaison montre que  $\widetilde{R}(Z) \equiv (dW(Z))^{-1} \bullet R(W)$  est vecteur propre de la matrice B(Z) pour la valeur propre  $\lambda(W)$  si R(W) est un vecteur propre de dF(W) qui vérifie la relation (2.7). La diagonalisation de la matrice B(Z) est alors immédiate. On trouve

$$(2.20) \qquad \lambda_1 = u - c \quad < \quad \lambda_2 = u \quad < \quad \lambda_3 = u + c$$

avec des vecteurs propres associés donnés par les relations

(2.21) 
$$\widetilde{R}_1(Z) = \begin{pmatrix} \rho \\ -c \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \widetilde{R}_2(Z) = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial s} \\ 0 \\ -c^2 \end{pmatrix}, \quad \widetilde{R}_3(Z) = \begin{pmatrix} \rho \\ c \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nous remarquons que la dérivée de  $\lambda_1$  (respectivement  $\lambda_3$ ) dans la direction  $\widetilde{R}_1$  (respectivement  $\widetilde{R}_3$ ) n'est jamais nulle

(2.22) 
$$d\lambda_1(W) \bullet \widetilde{R}_1(W) \neq 0$$
,  $d\lambda_3(W) \bullet \widetilde{R}_3(W) \neq 0$ ,  $\forall W$ 

alors que la situation est opposée pour la seconde valeur propre pour laquelle on a

(2.23) 
$$d\lambda_2(W) \bullet \widetilde{R}_2(W) = 0.$$

Pour cette raison, on dit que les valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_3$  définissent des champs **vraiment non linéaires** alors que la valeur propre  $\lambda_2 = u$  définit un champ **linéairement dégénéré**. Les ondes de détente sont toujours associées à des champs vraiment non linéaires et nous détaillons dans le paragraphe suivant l'étude des 1-ondes de détente et des 3-ondes de détente.

• Une 1-onde de détente 
$$\xi \longmapsto U(\xi)$$
 vérifie

(2.24) 
$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}\xi}(U(\xi))$$
 proportionnel à  $\widetilde{R}_1(Z)$ 

donc si on intègre le champ de vecteurs  $\widetilde{R}_1(Z)$  c'est à dire si on résout l'équation différentielle (2.24), on trouve une fonction  $Z(\xi)$  qui définit une 1-onde de détente, par exemple pour  $\xi$  compris entre deux valeurs limites  $\xi_0$  et  $\xi_1$ . Nous pouvons représenter la solution de l'équation (2.24) dans l'espace des états W; on a une courbe  $\xi \longmapsto U(\xi)$  vérifiant la relation (2.24) et la condition initiale (2.25)  $U(\xi_0) = W_0$ 

qui est définie par exemple jusqu'en  $\xi=\xi_1\,$  où l'on atteint l'état final $W_1\,$  (voir la figure 1)

$$(2.26) U(\xi_1) = W_1.$$

Dans l'espace-temps (x, t), nous sommes en présence de trois "régimes" pour les célérités  $\xi = \frac{x}{t}$ :

(2.27)	$U(\xi) = W_0$ pour	$\xi \leq \xi_0$	(état constant)
(2.28)	$U(\xi)$ variable pour	$\xi_0 \leq \xi \leq \xi_1$	(onde de détente)
(2.29)	$U(\xi) = W_1$ pour	$\xi \geq \xi_1$	(état constant)

comme représenté à la figure 2. Notons que la relation (2.8) impose une valeur bien particulière  $\xi_0$  pour la célérité :

$$(2.30) \qquad \xi_0 = u(W_0) - c(W_0)$$

ainsi qu'une valeur analogue pour  $\xi_1$ . On peut aussi montrer simplement (voir par exemple Smoller [Sm83]) que l'inégalité

$$(2.31) \quad \xi_0 \leq \xi_1$$

a nécessairement lieu si  $W_1$  est relié à  $W_0$  à travers une 1-onde ou une 3-onde de détente. Dans le cas d'une 3-onde de détente, les relations (2.27) à (2.29) et (2.31) sont encore valables, mais la relation (2.30) doit être remplacée par

$$(2.32) \qquad \xi_0 = u(W_0) + c(W_0)$$

et on a aussi une relation analogue pour  $\xi_1$ .



**Figure 1** Onde de détente  $\xi \mapsto U(\xi)$ associée à la valeur propre  $\lambda_1 = u - c$  dans l'espace des états W: la trajectoire est tangente en tout point au vecteur propre  $R_1(W)$ .



**Figure 2** Onde de détente  $\xi \mapsto U(\xi)$  associée à la valeur propre  $\lambda_1 = u - c$  représentée dans le plan d'espace-temps.

• Le calcul pratique de la courbe  $\xi \mapsto U(\xi)$  satisfaisant les relations (2.24) et (2.25) utilise la notion d'invariant de Riemann. Un 1-invariant de Riemann (respectivement un 3-invariant de Riemann) est une fonction  $\beta^1(W)$ (respectivement  $\beta^3(W)$ ) qui est toujours constante le long des 1-courbes de détente (respectivement des 3-courbes de détente) et qui vérifie par définition (2.33)  $d\beta^1(W) \bullet R_1(W) = 0 \quad \forall W$ 

(respectivement  $d\beta^3(W) \bullet R_3(W) = 0$  pour tout état W). Exprimée en termes des variables non conservatives Z, on vérifie facilement qu'on a la relation analogue

(2.34) 
$$\mathrm{d}\beta^1(Z) \bullet \widetilde{R}_1(W) = 0 \quad \forall Z$$

Compte tenu de la forme particulière (2.21) du vecteur  $\widetilde{R}_1(W)$ , les deux fonctions suivantes

(2.35) 
$$\beta_1^1(Z) = s$$
  
(2.36)  $\beta_2^1(Z) = u + \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{c(\rho, s)}{\rho} d\rho = u + \frac{2c}{\gamma - 1}$ 

(2.37) 
$$\beta_1^3(Z) = s$$

(2.38) 
$$\beta_2^3(Z) = u - \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{c(\rho, s)}{\rho} d\rho = u - \frac{2c}{\gamma - 1}$$

Les états W sur une 1-onde de détente issue de l'état  $W_0$  sont explicités en pratique en exprimant la relation (2.33), qui revient à dire que les deux fonctions (2.35) et (2.36) sont constantes sur la courbe de détente :

(2.39)  $s = s_0$ 

(2.40) 
$$u + \frac{2c}{\gamma - 1} = u_0 + \frac{2c_0}{\gamma - 1}$$

(2.41) 
$$\xi = u - c$$
,  $\xi \ge u_0 - c_0$ .

• Nous détaillons la forme algébrique des relations reliant un état W à un état initial  $W_0$  par une 1-onde de détente dans un gaz parfait polytropique. On vérifie d'abord simplement (voir les détails dans Courant-Friedrichs [CF48]) que dans une 1-onde de détente, la pression est décroissante et la vitesse croissante :

$$(2.43) s = \frac{p}{\rho^{\gamma}}$$

il vient, compte tenu des relations (2.17), (2.39) et (2.40)

(2.44) 
$$u - u_0 + \frac{\sqrt{1-\mu^4}}{\mu^2} \frac{p_0^{\frac{1}{2\gamma}}}{\sqrt{\rho_0}} \left( p^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - p_0^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \right) = 0$$
 (1-détente)

avec le paramètre sans dimension  $\mu$  défini par la relation

(2.45) 
$$\mu^2 = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}.$$

Le graphe dans le plan (u, p) de la courbe de 1-détente (équation (2.44) sous la condition (2.42)) est donné à la figure 3.



**Figure 3** Onde de 1-détente reliant l'état  $W_0$  à l'état W représentée dans le plan (vitesse, pression).

#### Résolution numérique du problème de Riemann

• Dans le cas d'une 3-onde de détente, nous nous intéressons (pour des raisons qui apparaîtront clairement plus loin) à un état W amont relié à un état  $W_0$  en aval, ce qui nous donne

(2.46) 
$$s = s_0$$
  
(2.47)  $u - \frac{2c}{\gamma - 1} = u_0 - \frac{2c_0}{\gamma - 1}$ 

(2.48) 
$$\xi = u + c$$
,  $\xi \le u_0 + c_0$ .

Il est également facile d'en déduire que la vitesse est croissante dans une 3-onde ainsi que la pression, c'est à dire :

(2.49)  $p \leq p_0$ ,  $u \leq u_0$ , W issu de  $W_0$  par une 3-détente. Un calcul analogue à celui mené pour une 1-onde de détente nous montre que

(2.50) 
$$u - u_0 - \frac{\sqrt{1-\mu^4}}{\mu^2} \frac{p_0^{\frac{1}{2\gamma}}}{\sqrt{\rho_0}} \left( p^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - p_0^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \right) = 0$$
 (3-détente).

Le rapprochement entre les relations (2.44) et (2.50) nous amène à poser

(2.51) 
$$\psi(p; \rho_0, p_0; \gamma) \equiv \frac{\sqrt{1-\mu^4}}{\mu^2} \frac{p_0^{\frac{1}{2\gamma}}}{\sqrt{\rho_0}} \left( p^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - p_0^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \right).$$

Le graphe dans le plan (u, p) de la courbe de 3-détente (équation (2.50) sous la condition (2.49)) est donné à la figure 4.



**Figure 4** Courbe dans le plan (vitesse, pression) des états W aboutissant à l'état  $W_0$  par l'intermédiaire d'une 3-onde de détente

## 2.3) Ondes de choc.

• Nous cherchons maintenant à définir de façon plus précise les relations qui relient deux états  $W_0$  et W vérifiant les relations de Rankine et Hugoniot (2.9) ainsi qu'une condition d'entropie. Nous remarquons d'abord que l'invariance galiléenne des équations de la dynamique des gaz permet de se placer dans le repère ayant la vitesse  $\sigma$  de la discontinuité, ce qui permet de réécrire les relations (2.9) sous la forme

$$(2.52) \qquad \left[\rho\left(u-\sigma\right)\right] = 0$$

(2.53) 
$$\left[ \rho (u - \sigma)^2 + p \right] = 0$$

(2.54) 
$$\left[\rho\left(u-\sigma\right)\left(\frac{(u-\sigma)^2}{2}+e\right)+p\left(u-\sigma\right)\right] = 0$$

comme on peut aussi le vérifier à l'aide d'un calcul élémentaire laissé au lecteur. Il est classique d'introduire le flux de masse m qui traverse le choc :

$$(2.55) \qquad m = \rho \left( u - \sigma \right)$$

et les conditions d'entropie (voir [LL54] ou [CF48]) nous indiquent qu'on a

- $(2.56) mtextbf{m} > 0 mtextbf{à} extbf{travers un 1-choc}$
- (2.57) m < 0 à travers un 3-choc.

La numérotation des ondes de choc s'explique par un argument de continuité : si les sauts des relations (2.52) à (2.54) sont faibles, on peut montrer (voir les détails dans Smoller [Sm83] ou Godlewski-Raviart [GR96] par exemple) que la vitesse  $\sigma$  de la discontinuité commune aux états  $W_0$  et W tend vers la valeur commune de u-c pour un 1-choc et de u+c pour un 3-choc. Le cas où le flux de masse m est nul sera étudié plus loin ; on parle alors de **discontinuité de contact**.

• Nous détaillons maintenant le calcul algébrique nécessaire pour exprimer que l'état aval W obtenu à travers une 1-onde de choc de célérité  $\sigma$  issue d'un état  $W_0$ . On remarque d'abord que la condition d'entropie fournit toute une série d'inégalités :

(2.59) 
$$h = e + \frac{p}{\rho}$$
  
(2.60)  $\tau = \frac{1}{\rho}$ .

Des relations (2.52) à (2.54) on tire, compte tenu de (2.55), (2.59) et (2.60):

 $(2.61) \qquad \left[ u \right] = m \left[ \tau \right]$ 

(2.62) 
$$m^2 [\tau] + [p] = 0$$

(2.63) 
$$[h] + \frac{m^2}{2} [\tau^2] = 0.$$

Nous particularisons dans la suite au cas du gaz parfait polytropique. En éliminant m des relations (2.62) et (2.63) et en exprimant l'enthalpie en fonction de la pression et du volume spécifique, c'est à dire

$$(2.64) h = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p \tau$$

nous pouvons après un calcul algébrique simple, exprimer le volume spécifique  $\tau$  en aval du choc en fonction des données amont, de la pression aval et du paramètre  $\mu$  introduit en (2.45). On obtient :

En reportant cette valeur dans la relation (2.62), nous pouvons exprimer le carré du flux massique à travers le choc :

(2.66) 
$$m^2 = \frac{p + \mu^2 p_0}{(1 - \mu^2) \tau_0}$$
,  $W$  issu de  $W_0$  par un 1-choc.

Pour une 1-onde de choc, la relation (2.56) jointe à (2.61) nous permet d'exprimer le saut de vitesse en fonction de la pression et de l'état amont :

(2.67) 
$$u - u_0 + \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{\rho_0 \left(p + \mu^2 p_0\right)}} \left(p - p_0\right) = 0$$

pour W issu de  $W_0$  par un 1-choc et nous pouvons, dans le plan (vitesse, pression), tracer (figure 5) la courbe caractérisée par l'équation (2.67) et les inégalités (2.58).



Figure 5 Courbe dans le plan (vitesse, pression) des états W issus de l'état  $W_0$  par une 1-onde de choc.

• Dans le cas d'une 3-onde de choc, les relations (2.62) à (2.66) restent valables, mais au lieu de nous intéresser à un état W issu de  $W_0$  par un 3-choc, nous nous intéressons aux états W qui permettent d'aboutir à  $W_0$  à travers une 3-onde de choc. Il convient donc d'échanger le rôle des lettres avec et sans l'indice zéro dans les relations précédentes. Avec ces dernières hypothèses concernant les notations, un calcul simple montre que la relation (2.66) reste encore valable, et nous avons

(2.68) 
$$m^2 = \frac{p + \mu^2 p_0}{(1 - \mu^2) \tau_0}$$
,  $W_0$  issu de  $W$  par un 3-choc.

La relation qui exprime le saut de vites se en fonction de l'état aval  $W_0$  et de la pression amont prend alors la forme :

(2.69) 
$$u - u_0 - \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{\rho_0 \left(p + \mu^2 p_0\right)}} \left(p - p_0\right) = 0$$

pour  $W_0$  issu de W par un 3-choc. Compte tenu des nouvelles notations, les conditions d'entropie s'écrivent

$$(2.70) \qquad \rho_0 < \rho , \qquad p_0 < p , \qquad u_0 + c_0 < \sigma < u + c , \qquad s_0 < s$$

si  $W_0$  est issu de W par un 3-choc. Nous pouvons représenter une 3-onde de choc dans le plan (vitesse, pression) à la figure 6. Par rapprochement entre les relations (2.67) et (2.69), il est naturel de poser

Résolution numérique du problème de Riemann

(2.71) 
$$\varphi(p; \rho_0, p_0; \gamma) \equiv \sqrt{\frac{1-\mu^2}{\rho_0 (p+\mu^2 p_0)}} (p-p_0)$$

où  $\mu$  et  $\gamma$  sont reliés par la relation (2.45).



**Figure 6** Courbe dans le plan (vitesse, pression) des états W aboutissant à l'état  $W_0$  par une 3-onde de choc.

### 2.4) Discontinuités de contact.

• Au cours de l'étude des ondes de détente, nous avons introduit la notion de champ linéairement dégénéré à la relation (2.23) et le second champ des équations d'Euler est effectivement linéairement dégénéré. Ceci signifie que la seconde valeur propre, c'est à dire la vitesse est un invariant de Riemann :

(2.72) 
$$\beta_1^2(Z) = u.$$

Compte tenu de l'expression (2.21) des vecteurs propres, il est facile de voir que la pression est un autre 2-invariant, indépendant du premier :

(2.73) 
$$\beta_2^2(Z) = p.$$

Nous pouvons chercher une onde autosemblable régulière  $\xi \mapsto U(\xi)$  solution de l'équation différentielle exprimant la proportionnalité entre  $\frac{dU}{d\xi}$  et  $R_2(U)$ , mais alors la condition nécessaire (2.8) impose à la variable  $\xi$  de ne pas varier ! En effet, en dérivant la relation (2.8) par rapport à  $\xi$ , nous trouvons  $d\lambda_2(U) \cdot \frac{dU}{d\xi} = 1$  alors que cette dernière quantité est identiquement nulle :

(2.74) 
$$d\lambda_2(U) \bullet \frac{dU}{d\xi} = 0 ,$$

compte tenu de la linéaire dégénéres cence du champ  $\lambda_2 \equiv u$ . Nous remarquons toutefois que si la fonction  $\xi \longmapsto U(\xi)$  est une courbe intégrale du champ  $R_2$ , c'est à dire

(2.75) 
$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\xi} = R_2(U)$$

alors on a entre les états  $W_0$  et W le calcul suivant :

$$F(W) - F(W_0) = \int_{\xi_0}^{\xi} dF(U(\eta)) \cdot \frac{dU}{d\eta} d\eta = \int_{\xi_0}^{\xi} dF(U(\eta)) \cdot R_2(U(\eta)) d\eta$$
$$= \int_{\xi_0}^{\xi} \lambda_2(U(\eta)) R_2(U(\eta)) d\eta$$
$$= \lambda_2 \int_{\xi_0}^{\xi} R_2(U(\eta)) d\eta = \lambda_2 (W - W_0).$$

La quatrième étape est une conséquence de la linéaire dégénéres cence qui exprime que la vitesse u est constante le long de la 2courbe définie en (2.75). Nous venons donc de montrer qu'on a une relation de Rankine-Hugoniot

$$(2.76) \qquad \left[ F(W) \right] = \lambda_2 \left[ W \right]$$

et dans l'espace des états les courbes de détentes définies par la relation différentielle (2.75) et les courbes de choc trouvées en (2.76) coïncident ! Le second champ, linéairement dégénéré, définit une courbe dans l'espace des états joignant l'état  $W_0$  à l'état W selon les relations

$$(2.77)$$
  $u = u_0$ 

$$(2.78)$$
  $p = p_0$ 

et dans l'espace-temps, ces deux états sont séparés par une discontinuité de célérité  $\sigma$  égale à  $\lambda_2$  compte tenu de la relation (2.76) :

(2.79) 
$$\sigma = u = u_0.$$

Une telle onde est appelée **discontinuité de contact** ou **ligne de glissement**. Nous avons

(2.80) 
$$U(\xi) = \begin{cases} W_0, & \xi < u_0 = \sigma \\ W, & \xi > u_0 = \sigma. \end{cases}$$

Une représentation dans l'espace-temps de cette relation est donnée figure 7 alors que dans le plan (vitesse, pression), les projections des états  $W_0$  et W coïncident, comme établi aux relations (2.77) et (2.78).





## 2.5) Résolution du problème de Riemann pour le gaz polytropique.

• Pour résoudre le problème (2.1) (2.2) entre les états  $W_g$  et  $W_d$ , la théorie générale de Lax (voir [Lax73]) s'applique pour la dynamique des gaz. L'idée est de rechercher deux états intermédiaires  $W_1$  et  $W_2$  de sorte que

(2.81)  $W_1$  est issu de l'état  $W_g$  par une 1-onde

(2.82)  $W_2$  est issu de l'état  $W_1$  par une 2-onde

(2.83)  $W_d$  est issu de l'état  $W_2$  par une 3-onde.

Nous nous restreignons dans une première approche à rechercher la pression et la vitesse commune aux états  $W_1$  et  $W_2$  compte tenu du fait que la 2-onde est une discontinuité de contact :

$$(2.84) u_1 = u_2 = u^*$$

 $(2.85) p_1 = p_2 = p^*.$ 

La relation (2.81) exprime que l'état  $W_1$  est issu de l'état  $W_g$  par une 1-onde de détente (relation (2.42)) ou une 1-onde de choc (inégalités (2.58)). Nous avons donc :

(2.86) 
$$\begin{cases} u_1 - u_g + \psi(p_1; \rho_g, p_g; \gamma) = 0, & p_1 < p_g \\ u_1 - u_g + \varphi(p_1; \rho_g, p_g; \gamma) = 0, & p_1 > p_g. \end{cases}$$

De même, nous remarquons également que la relation (2.83) exprime que l'état  $W_2$  aboutit grâce à une 3-onde à l'état  $W_d$ , connu. Nous pouvons utiliser une 3-onde de détente entre  $W_2$  et  $W_d$  (relation (2.49)) ou une 3-onde de choc (relation (2.70)). Il vient :

(2.87) 
$$\begin{cases} u_2 - u_d - \psi(p_2; \rho_d, p_d; \gamma) = 0, & p_2 < p_d \\ u_2 - u_d - \varphi(p_2; \rho_d, p_d; \gamma) = 0, & p_2 > p_d. \end{cases}$$

Il suffit d'écrire l'équation (2.84) qui relie les vitesses  $u_1$  et  $u_2$  (*i.e.*  $u_1 = u_2 = u^*$ ) sous la condition (2.85) relative aux pressions  $p_1$  et  $p_2$  ( $p_1 = p_2 = p^*$ ) pour poser complètement le problème (figure 8).



Figure 8 Résolution du problème de Riemann dans le plan (vitesse, pression).



**Figure 9** Algorithme de Newton pour la résolution du problème de Riemann dans le plan (vitesse, pression).

• La résolution numérique complète s'effectue par itérations successives (numérotées à l'aide de l'indice k) de type Newton comme illustré à la figure 9 :

partant d'une valeur de la pression  $p_k$ , on calcule facilement à l'aide des relations (2.86) et (2.87) les vitesses  $u_{1,k}$  et  $u_{3,k}$  associées à la 1-onde et à la 3-onde. Avec l'algorithme de Newton, il suffit de calculer l'intersection des tangentes aux deux points correspondants pour définir une nouvelle valeur  $p_{k+1}$  de la pression à l'itération k+1. L'initialisation de l'algorithme est obtenue classiquement en recherchant l'intersection des deux ondes de détente, c'est à dire en résolvant le système d'équations aux inconnues  $(u_{\Omega}, p_{\Omega})$  suivant :

(2.88) 
$$\begin{cases} u_O - u_g + \psi(p_O; \rho_g, p_g; \gamma) = 0\\ u_O - u_d + \psi(p_O; \rho_d, p_d; \gamma) = 0. \end{cases}$$

Ce système d'équations, bien que non linéaire, se résout exactement par un calcul algébrique explicite et la pression  $p_O$  est finalement donnée par la relation

(2.89) 
$$p_O^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} = \frac{\frac{(\gamma-1)}{2}(u_g - u_d) + c_g + c_d}{c_g \left(\frac{1}{p_g}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} + c_d \left(\frac{1}{p_d}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}}},$$

où les vitesses du son  $c_g$  et  $c_d$  sont calculées aux relations (2.17). Nous remarquons que la relation (2.89) définit effectivement une pression positive  $p_O$  si la relation suivante dite de "non apparition du vide" est réalisée :

(2.90) 
$$u_d - u_g \leq \frac{2}{\gamma - 1} (c_g + c_d).$$



Figure 10 Apparition du vide dans le plan (vitesse, pression)

• Dans le cas contraire où la relation (2.90) est en défaut, les deux courbes représentatives des ondes de détente ne se coupent pas dans le plan (vitesse, pression) et il y a apparition du vide (figures 10 et 11). La solution du problème

de Riemann, qui n'est plus mathématiquement bien définie au sens de Lax, comporte une zone de vide définie par les célérités  $\xi$  telles que

(2.91) 
$$u_g + \frac{2c_g}{\gamma - 1} \le \xi \le u_d - \frac{2c_d}{\gamma - 1}$$

pour lesquelles la pression est nulle ainsi que la densité alors que la vitesse n'est pas définie. Ce cas d'apparition du vide reste exceptionnel en pratique mais peut être entièrement résolu comme nous venons de le voir.

• Dans le cas où la relation (2.90) est réalisée, l'algorithme de Newton illustré à la figure 9 converge vers un couple  $(u^*, p^*)$  formé de la vitesse  $u^* \in \mathbb{R}$  et de la pression  $p^* > 0$  commune aux deux états intermédiaires  $W_1$  et  $W_2$ . Le calcul de la densité de ces deux états intermédiaires dépend de l'onde utilisée effectivement pour résoudre le problème de Riemann. Ainsi, si la pression  $p^*$  est inférieure à la pression  $p_g$ , la 1-onde est une onde de détente et l'entropie se conservant, on a :





(2.92) 
$$\rho_1 = \left(\frac{p^*}{p_g}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \rho_g , \qquad p^* < p_g$$

et dans le cas contraire, on utilise une 1-onde de choc et compte tenu de la relation (2.65), on a finalement :

(2.93) 
$$\rho_1 = \frac{p^* + \mu^2 p_g}{p_g + \mu^2 p^*} \rho_g , \qquad p^* > p_g .$$

On peut alors préciser la valeur  $\sigma_1$  de la célérité du 1-choc :

(2.94) 
$$\sigma_1 = u_g - \sqrt{\frac{p^* + \mu^2 p_g}{(1-\mu^2)\rho_g}}$$

Pour la 3-onde, on a une discussion analogue qui conduit finalement aux relations suivantes :

(2.95) 
$$\rho_3 = \left(\frac{p^*}{p_d}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \rho_d , \qquad p^* < p_d$$

(2.96) 
$$\rho_3 = \frac{p^* + \mu^2 p_d}{p_d + \mu^2 p^*} \rho_d , \qquad p^* > p_d$$

(2.97) 
$$\sigma_3 = u_d + \sqrt{\frac{p^* + \mu^2 p_d}{(1 - \mu^2) \rho_d}}$$

L'allure de la solution générale dans l'espace-temps d'un problème de Riemann pour la dynamique des gaz est illustrée à la figure 12.



Figure 12 Solution du problème de Riemann dans l'espace-temps.

• Il importe pour la suite de pouvoir préciser l'état (variable) dans une 1-onde de détente en fonction de la célérité  $\xi = \frac{x}{t}$ . Compte tenu de la relation (2.8), nous avons d'une part :

(2.98)  $u - c = \xi$ 

et compte tenu de la relation (2.40), il vient facilement, pour  $\, u_g - c_g \, < \, \xi \, < \, u_1 - c_1 \, :$ 

(2.99) 
$$u = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} u_g + \frac{2}{\gamma + 1} c_g + \frac{2}{\gamma + 1} \xi$$

(2.100) 
$$c = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} u_g + \frac{2}{\gamma + 1} c_g - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \xi$$

L'élimination de la pression entre les relations (2.17) et (2.39) permet d'en déduire la densité. De même pour une 3-onde de détente, la relation (2.8) permet d'expri-mer la 3-célérité en fonction de la donnée  $\xi$ :

$$(2.101) u + c = \xi$$

et l'invariant (2.47) permet de calculer la vitesse  $u\,$  et la vitesse du son  $c\,$  en fonction des données :

(2.102) 
$$u = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} u_d - \frac{2}{\gamma + 1} c_d + \frac{2}{\gamma + 1} \xi$$

(2.103) 
$$c = -\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} u_d + \frac{2}{\gamma + 1} c_d + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \xi$$

sous les conditions  $u_2 + c_2 < \xi < u_d + c_d$ .

# 3) Solution approchée pour les fluides réactifs.

• Dans le cas où le fluide étudié n'est plus un gaz parfait mais un gaz soumis à des réactions chimiques, le problème de Riemann se pose encore sous la forme (2.1) (2.2), mais les équations d'Euler de fluide parfait (sans viscosité) prennent une forme plus complexe. On peut avoir

$$(3.1) W = \left(\rho, \rho u, \rho v, E\right)^{t}$$

pour un gaz réel à l'équilibre chimique dans le cas de deux dimensions d'espace ou bien

(3.2) 
$$W = (\rho_1, \rho_2, \cdots, \rho_n, \rho u, \rho v, E)^{\mathsf{t}}$$

pour un mélange de n espèces en interaction chimique. Le premier cas est en un sens le plus délicat à traiter car nous avons à faire à une loi d'état de gaz réel qui peut être non triviale, alors que le second conduit à un système hyperbolique associé à la seconde modélisation qui se ramène en général à un mélange de gaz parfaits polytropiques vus à la première partie de ce chapitre. Nous commençons par ce second modèle pour terminer le paragraphe par le premier.

# 3.1) Mélange idéal de gaz parfaits polytropiques.

• Nous supposons que le fluide se compose de n espèces sans interactions chimiques (celles-ci sont reportées dans un second membre non différentiel). La loi de pression vérifie donc la loi de Dalton

(3.3) 
$$p = \sum_{j=1}^{n} p_{j}$$

et chaque pression partielle satisfait à une loi polytropique :

(3.4) 
$$p_j = (\gamma_j - 1) \rho_j e_j$$

où l'on a décomposé l'énergie totale volumique E en énergie cinétique, plus n énergies internes volumiques correspondant à chaque espèce chimique :

(3.5) 
$$E = \frac{1}{2}\rho u^2 + \sum_{j=1}^n \rho_j e_j = \frac{1}{2}\rho u^2 + \rho e.$$

On suppose de plus un équilibre thermodynamique local atteint, c'est à dire l'existence d'une unique température pour toutes les espèces et nous introduisons la chaleur spécifique à volume constant pour la j ième espèce  $c_{vj}$ . On a alors :

$$(3.6) e_j = c_{vj} T.$$

On peut voir simplement (c.f. Abgrall [Ab88] ou Mehlman [Me91]) que la pression est reliée simplement à l'énergie interne selon la relation

(3.7) 
$$p = (\gamma - 1) \rho e$$

avec un coefficient  $\gamma\,$  calculé par :

(3.8) 
$$\gamma = \frac{\sum_{j=1}^{n} \rho_j c_{vj} \gamma_j}{\sum_{j=1}^{n} \rho_j c_{vj}},$$

ce qui permet d'associer à chaque état W un "gamma équivalent" très voisin, en ce qui concerne les expressions algébriques, de celui rencontré pour un gaz parfait polytropique.

(3.9) 
$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} F(W) = 0.$$

Il admet deux ondes vraiment non linéaires (numérotées par analogie avec le paragraphe précédent 1 et 3), et une onde linéairement dégénérée (numéro 2) de multiplicité (n + 1). Nous avons

$$(3.10) \qquad \lambda_1 = u - c \; ; \; \lambda_2 = u \; ; \; \lambda_3 = u + c$$

avec une vitesse locale du son c<br/> qui est encore obtenue en utilisant la relation classique<br/>  $\left(2.17\right)$ 

$$(3.11) c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$$

mais où  $\gamma$  est cette fois calculé à l'aide de l'expression (3.8). Les invariants de Riemann pour ces trois champs sont de la forme

$$(3.12) 1-invariants de Riemann : \frac{\rho_1}{\rho}, \dots, \frac{\rho_n}{\rho}, \frac{p}{\rho^{\gamma}}, u + \frac{2c}{\gamma - 1}, v (3.13) 2-invariants de Riemann : u, p (3.14) 3-invariants de Riemann : \frac{\rho_1}{\rho}, \dots, \frac{\rho_n}{\rho}, \frac{p}{\rho^{\gamma}}, u - \frac{2c}{\gamma - 1}, v.$$

• Les concentrations  $\frac{\rho_i}{\rho}$  ainsi que la vitesse tangentielle sont constantes à travers les ondes vraiment non linéaires et compte tenu de la relation (3.8), il en est de même pour le rapport  $\gamma$ . Les ondes de détente restent donc calculées par une relation analogue à (2.44) ou (2.50) à ceci près que le coefficient  $\gamma$  est maintenant associé à l'état de référence  $W_0$ :

(3.15) 
$$u - u_0 + \psi(p; \rho_0, p_0; \gamma_0) = 0$$
, W issu de  $W_0$  par une 1-détente

$$(3.16) \qquad u - u_0 - \psi(p; \rho_0, p_0; \gamma_0) = 0, \quad W_0 \text{ issu de } W \text{ par une 3-détente}$$

où la fonction  $\psi(\bullet; \bullet, \bullet; \bullet)$  a été définie en (2.51). En ce qui concerne les ondes de choc, les relations de Rankine et Hugoniot relatives au système (3.9) montrent facilement qu'on a :

(3.17) 
$$\left[\frac{\rho_i}{\rho}\right] = 0, \quad i = 1, \cdots, n$$
  
(3.18)  $\left[v\right] = 0$ 

ce qui entraîne que le rapport  $\gamma$  défini en (3.8) reste constant à travers un 1-choc ou un 3-choc. On peut alors dérouler l'algèbre présentée dans la première partie (voir par exemple Fernandez-Larrouturou [FL89] ou Mehlman [Me91]) et dans le plan (vitesse, pression), les relations (2.67) et (2.69) se généralisent sous la forme

 $(3.19) u - u_0 + \varphi(p; \rho_0, p_0; \gamma_0) = 0, W \text{ issu de } W_0 \text{ par un 1-choc}$   $(3.20) u - u_0 - \varphi(p; \rho_0, p_0; \gamma_0) = 0, W_0 \text{ issu de } W \text{ par un 3-choc}$   $(3.10) U - U_0 - \varphi(p; \rho_0, p_0; \gamma_0) = 0, W_0 \text{ issu de } W \text{ par un 3-choc}$ 

où la fonction  $\varphi(\bullet; \bullet, \bullet; \bullet)$  est définie par les relations (2.71) et (2.45).

• La résolution du problème de Riemann n'offre alors pas de difficulté. Il s'agit, étant donnés deux états  $W_g$  et  $W_d$ , de résoudre le système d'équations relatives aux 2-invariants de Riemann  $(u^*, p^*)$  des deux états intermédiaires  $W_1$  et  $W_2$ . C'est une généralisation simple du système (2.86)(2.87) et nous avons :

(3.21) 
$$\begin{cases} u^* - u_g + \psi(p^*; \rho_g, p_g; \gamma_g) = 0, & p^* < p_g \\ u^* - u_g + \varphi(p^*; \rho_g, p_g; \gamma_g) = 0, & p^* > p_g. \\ u^* - u_d - \psi(p^*; \rho_d, p_d; \gamma_d) = 0, & p^* < p_d \\ u^* - u_d - \varphi(p^*; \rho_d, p_d; \gamma_d) = 0, & p^* > p_d. \end{cases}$$

L'algorithme présenté à la figure 9 s'applique sans modification. Une fois déterminés la vitesse  $u^*$  et la pression  $p^*$  des états intermédiaires, on détaille la 1-onde et la 3-onde par des généralisations simples des relations (2.92) à (2.103). La résolution exacte du problème de Riemann que nous venons de décrire pour la partie hyperbolique (c'est à dire le fluide figé) de la dynamique des gaz réactifs s'implémente alors sans difficulté.

### 3.2) Gaz réel à l'équilibre chimique.

• La résolution du problème de Riemann pour les équations d'Euler d'un gaz à l'équilibre chimique a été abordée par Colella-Glaz [CG85]. La différence essentielle par rapport au paragraphe précédent est qu'on remplace la loi de Dalton (3.3) par une donnée de la loi de pression à l'aide de tables de Mollier

(3.22) 
$$p = f(\rho, \rho e).$$

On introduit classiquement les dérivées  $\chi$  et  $\kappa$  de la loi de pression (3.22) :

(3.23) 
$$\chi = \frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho, \rho e)$$

(3.24) 
$$\kappa = \frac{\partial p}{\partial(\rho e)}(\rho, \rho e).$$

Pour un gaz parfait polytropique, on a simplement :

• De façon pratique, les tables thermodynamiques les plus classiques (Hilsenrath et Klein [HK65]) ne fournissent pas une relation fonctionnelle explicite de type (3.22) et il faut, pour calculer la pression, résoudre un problème relatif à la température. Un effort récent (Srinivasan-Tannehill-Weilmuenster [STW87]) a permis de tabuler sous forme de fonctions élémentaires la loi de pression (3.22) pour l'air de l'atmosphère terrestre. Mais si les fonctions suivantes ont bien été tabulées

(3.27) 
$$s = s(\rho, \rho e), \qquad \frac{h}{e} = \frac{h}{e}(\rho, \rho e), \qquad c = c(\rho, \rho e),$$

il n'en est pas de même pour les coefficients  $\chi$  et  $\kappa$  qui interviennent explicitement dans la jacobienne du flux par exemple (voir les détails dans Montagné-Yee-Vinokur [MYV87] par exemple). Le simple calcul des ondes non linéaires est très délicat ; Colella et Glaz ont proposé une méthode itérative pour manipuler les ondes de choc, et nous avons [Du89a] développé un algorithme de calcul des ondes de détente à partir du diagramme de Mollier de Srinivasan.

• En pratique, des formules très simples issues du gaz parfait polytropique semblent suffisantes et nous proposons d'appliquer sans modification l'adaptation qui est rigoureuse pour les mélanges de gaz parfaits. Les détentes sont donc calculées par les relations (3.15)(3.16) et les chocs par (3.19)(3.20). Mais il reste le problème de définir la valeur du "gamma équivalent" puisque la relation (3.8) n'a maintenant plus de sens. Nous proposons, en suivant une remarque de Mehlman [Me91] de choisir un coefficient  $\gamma$  local grâce à la relation

(3.28) 
$$\gamma = \frac{\rho c^2}{p}.$$

En effet, dans ce cas, la valeur limite du rapport des pentes est lié à la vitesse du son :

(3.29) 
$$\frac{p-p_0}{u-u_0}$$
 tend vers  $\begin{cases} -\rho_0 c_0 & \text{pour une 1-onde} \\ \rho_0 c_0 & \text{pour une 3-onde} \end{cases}$ 

et l'introduction d'une valeur calculée grâce à la relation (3.28) dans les formules (3.15), (3.16), (3.19) et (3.20) permet d'approcher correctement les tangentes aux différentes ondes (on le voit facilement pour les ondes de choc grâce aux relations (2.71) et (2.45)) donc de représenter correctement l'acoustique du gaz. Ceci termine notre étude relative au schéma de Godunov sur les gaz réels.

# 4) Quelques approximations classiques.

• Nous avons vu que la résolution exacte du problème de Riemann conduit à un algorithme itératif même pour le cas simple d'un gaz parfait polytropique, avec utilisation de fonctions exponentielles et de racines carrées, ce qui en fait un algorithme réputé cher. De très nombreuses tentatives ont été proposées pour résoudre de façon approchée le problème de Riemann. Nous nous concentrons d'abord sur le cas du gaz parfait polytropique puis dirons quelques mots du cas d'un gaz réel. L'idée la plus simple consiste à mettre en œuvre l'approximation acoustique (Godunov [GZIKP79]), ce qui revient dans l'algorithme de résolution à remplacer les 1 et 3-ondes par leurs tangentes au points  $W_g$  et  $W_d$  respectivement. Cette idée naturelle est efficace dans plus de quatre vingt dix pour cent des interfaces d'un maillage, mais pour les ondes fortement non linéaires, cette idée ne suffit pas et il faut pousser plus loin l'algorithme de Newton-Raphson. Cet argument nous semble *in fine* très efficace, mais n'est pas toujours le plus populaire, contrairement aux idées de Roe, Osher et van Leer que nous exposons maintenant.

# 4.1) Flux de Roe.

• Dans son article de 1981, P. Roe [Roe81] a proposé d'introduire une famille de matrices pour linéariser la décomposition de la discontinuité entre deux états  $W_g$  et  $W_d$ . Une matrice de Roe  $A(W_g, W_d)$  satisfait par définition aux trois propriétés suivantes :

(4.1) 
$$F(W_d) - F(W_g) = A(W_g, W_d) \bullet (W_d - W_g)$$

$$(4.2) \qquad A(W, W) = \mathrm{d}F(W)$$

(4.3)  $A(W_q, W_d)$  est diagonalisable sur IR.

Le problème général de la recherche d'une matrice de Roe est mal posé (sauf dans le cas scalaire !) et Harten, Lax et van Leer [HLV83] ont montré que si le système hyperbolique étudié admet une entropie mathématique (ce qui est toujours le cas pour les lois de conservation issues de modèles physiques classiques), on peut construire une matrice de Roe satisfaisant aux propriétés (4.1) à (4.3). Mais cette matrice n'a qu'un intérêt théorique car elle est incalculable en pratique !

• Le point clef dans l'étude de Roe est d'avoir montré qu'on peut calculer la matrice  $A(W_g, W_d)$  sous la forme

(4.4) 
$$A(W_g, W_d) = dF(\Psi(W_g, W_d))$$

où  $\Psi(\bullet, \bullet)$  est une moyenne non linéaire entre les états  $W_g$  et  $W_d$  qui est définie par les relations devenues classiques

(4.5) 
$$u^* = \frac{\sqrt{\rho_g} u_g + \sqrt{\rho_d} u_d}{\sqrt{\rho_g} + \sqrt{\rho_d}}$$

(4.6) 
$$v^* = \frac{\sqrt{\rho_g} v_g + \sqrt{\rho_d} v_d}{\sqrt{\rho_g} + \sqrt{\rho_d}}$$

(4.7) 
$$H^* = \frac{\sqrt{\rho_g} H_g + \sqrt{\rho_d} H_d}{\sqrt{\rho_g} + \sqrt{\rho_d}}$$

où H représente l'enthalpie totale

(4.8) 
$$H = \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{c^2}{\gamma - 1}.$$

Des relations (4.5) à (4.8) on déduit la vitesse du son  $c^*$  de l'état moyen  $\Psi(\bullet, \bullet)$ et l'on dispose alors d'assez de données pour évaluer la jacobienne (4.4). La simplicité des relations (4.5) à (4.8), jointe à la relation classique sur la viscosité numérique d'un schéma décentré, permet de calculer le flux  $\Phi(W_g, W_d)$  entre les deux états par la relation

(4.9) 
$$\Phi(W_g, W_d) = \frac{1}{2} \left[ F(W_g) + F(W_d) - |A(W_g, W_d)| \bullet (W_d - W_g) \right].$$

La valeur absolue de matrice au second membre de la relation (4.9) se manipule de façon explicite (voir par exemple Yee [Ye87]). Un défaut du schéma de Roe est sa non consistance possible avec la condition d'entropie : des chocs stationnaires non physiques peuvent être capturés par le schéma, ce qu'il faut éviter. Pour remédier à ce défaut, Harten [Ha83] a proposé d'utiliser dans l'expression de la valeur absolue lors du calcul de la matrice de Roe

(4.10) 
$$|A(W_g, W_d)| = \sum_j |\lambda_j| R_j L_j$$

 $(R_j \text{ est le } j\text{-ième vecteur propre à droite de la matrice de Roe } A(W_g, W_d)$  et  $L_j$  le j-ième vecteur propre à gauche une approximation parabolique  $Q(\lambda)$  de la fonction "valeur absolue" (figure 13) de façon à ajouter un peu de viscosité au schéma. On pose

(4.11) 
$$Q(\lambda) = \begin{cases} |\lambda|, & |\lambda| \ge \delta \\ \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 + \delta^2}{\delta}, & |\lambda| \le \delta. \end{cases}$$



Figure 13 Approximation de la fonction "valeur absolue" de Harten

• Le défaut de cette correction, efficace par ailleurs, est qu'elle introduit un paramètre  $\delta$  qu'il faut régler avec soin (voir par exemple Yee [Ye87]). Avec G. Mehlman [DM96], nous avons proposé une nouvelle correction **non paramétrée** pour la méthode de Roe, fondée sur une détection des points soniques où le schéma initial de Roe ne dissipe pas assez d'entropie. Nous décomposons le saut  $W_d-W_g\,$  sur la base des vecteurs propres  $\,R_j\,$  de la matrice de Roe $A(W_g\,,\,W_d)\,$  :

$$(4.12) \qquad W_d - W_g = \sum_k \alpha_k R_k$$

et cette décomposition nous permet de définir des états intermédiaires  $W_j$  en ne prenant que les premiers termes du second membre de (4.12):

$$(4.13) W_j - W_g = \sum_{k \le j} \alpha_k R_k$$

Nous évaluons la *j*-ième valeur propre  $\lambda_j$  entre les états  $W_{j-1}$  et  $W_j$ , c'est à dire pour la *j*-ième onde. Celle-ci est sonique si l'on a :

$$(4.14) \qquad \lambda_j \big( W_{j-1} \big) < 0 < \lambda_j \big( W_j \big) \,.$$

Dans ce cas, on remplace la fonction de flux non pas par une approximation linéaire comme le propose Roe, mais par une approximation **non linéaire** fondée sur une interpolation de Hermite de degré trois qui respecte la j-ième valeur propre. On peut alors résoudre **exactement** un problème de Riemann auxiliaire pour le flux approché, ce qui conduit à une correction d'entropie non paramétrée, non itérative et qui n'est de fait employée que très ponctuellement. Nous renvoyons à notre article [DM96] ou à la synthèse plus récente [Du2K] pour le détail des relations algébriques à mettre en œuvre pour cette correction.



Figure 14 Onde de détente multivaluée.

### 4.2) Flux d'Osher.

• Parallèlement aux travaux de Roe, S. Osher [Os81] a cherché à généraliser au cas vectoriel un travail mené avec B. Engquist [EO80] sur les schémas de décomposition de flux pour les lois de conservation scalaires :

(4.15) 
$$\Phi(W_g, W_d) = F^+(W_g) + F^-(W_d)$$

où l'on a décomposé la fonction de flux  $F(\bullet)$  sous la forme

(4.16) 
$$F(W) \equiv F^+(W) + F^-(W)$$

avec l'hypothèse

(4.17)  $\mathrm{d}F^+(W) \ge 0, \quad \mathrm{d}F^-(W) \le 0.$ 

De cette façon, S. Osher a abouti à une vision assez compliquée et abstraite d'un schéma qui peut (pour la variante "P" ayant une interprétation physique) s'interpréter grâce à l'acquis sur le problème de Riemann, ce que nous développons dans la suite. L'idée de base est d'utiliser les ondes de détente là où un choc est physiquement présent, c'est à dire si

(4.18) 
$$\xi_0 \equiv \lambda(W_0) > \lambda(W_1) \equiv \xi_1 + \xi_2 + \xi_1 + \xi_1 + \xi_1 + \xi_2 + \xi_1 + \xi_2 + \xi_2 + \xi_1 + \xi_2 + \xi_2 + \xi_2 + \xi_1 + \xi_2 + \xi_2$$

Dans ce cas, on ne peut pas construire comme aux relations (2.27) à (2.29) une solution physique  $W(\xi)$  dans l'espace-temps par juxtaposition d'un état constant  $W_0$ , d'une région d'onde de détente où  $W(\xi)$  varie, puis d'un nouvel état constant  $W_1$ . Mais on décide de la faire tout de même ! On utilise sans modification les relations (2.27) à (2.29) malgré l'hypothèse (4.18). Nous disposons donc de **trois** états  $W(\xi)$  lorsque  $\xi_1 \leq \xi \leq \xi_0$ , donc d'une onde de détente multivaluée illustrée à la figure 14. Le flux de cette "solution" est calculé par le flux de Engquist-Osher :

(4.19) 
$$F(\xi) = F(W_0) - F(W(\xi)) + F(W_1), \quad \xi_1 \le \xi \le \xi_0,$$

où l'état  $W(\xi)$  varie effectivement "en sens contraire" d'une détente traditionnelle, ce qui explique le signe "moins" qui lui est affecté à la relation (4.19). Il est donc possible depuis Osher [Os81] de n'utiliser que des ondes de détente pour résoudre de façon approchée le problème de Riemann. Nous avons développé dans [Du87] les relations qui généralisent la relation (4.19) au cas de la dynamique des gaz. Le point clef qui rend le flux d'Osher également populaire est son caractère non itératif. En effet, le calcul de l'intersection des ondes de détente, posé en (2.88) se résout exactement grâce à la relation (2.89) pour un gaz parfait polytropique.

### 4.3) Décomposition de flux de van Leer.

• Au lieu d'approcher la solution du problème de Riemann comme l'ont cherché Roe et Osher, B. van Leer [vL82] a essayé de trouver une décomposition du flux des équations d'Euler du type (4.15)(4.16). Et il y est effectivement parvenu ! Les formules sont très simples ; on introduit le nombre de Mach

$$(4.20) M = \frac{u}{c}$$

et l'on pose

(4.21)  $F^+(W) = F(W)$  si  $M \ge 1$ 

(4.22) 
$$F^{-}(W) = F(W)$$
 si  $M \le 1$ .

Nous détaillons la décomposition pour les trois composantes de  ${\cal F}^+$  dans le cas transsonique :

(4.23) 
$$F^+(W) = (F_m^+(W), F_x^+(W), F_e^+(W))$$

(4.24) 
$$F_m^+(W) = \rho c \left(\frac{M+1}{2}\right)^2$$

(4.25) 
$$F_x^+(W) = \rho c \left(\frac{M+1}{2}\right)^2 \frac{(\gamma-1)u+2c}{\gamma}$$

(4.26) 
$$F_e^+(W) = \rho c \left(\frac{M+1}{2}\right)^2 \frac{\left((\gamma-1)u+2c\right)^2}{2(\gamma^2-1)}$$

et le calcul de  $F^-$  s'en déduit immédiatement grâce à la relation (4.16). Le flux de van Leer permet effectivement de résoudre avec succès des problèmes de dynamique des gaz comportant des chocs forts et il a servi de brique de base à la version initiale du code FLU3C développé à l'ONERA et à l'Aerospatiale. Mais pour l'approximation de couches limites visqueuses ou de discontinuités de contact, une diffusion trop importante est introduite par le schéma, ce qui n'est pas le cas si on utilise les flux de Godunov, Roe ou Osher.

### 4.4) Généralisation aux gaz réels.

• Si on généralise les idées précédentes aux gaz réels qui sont mélanges de gaz parfaits ou à l'équilibre chimique, on se heurte à diverses difficultés. En ce qui concerne les flux de Roe tout d'abord, Montagné, Yee et Vinokur [MYV87] ont cherché à généraliser la relation (4.4) pour les gaz réels à l'équilibre chimique mais il est alors nécessaire d'être très précis avec les coefficients  $\chi$  et  $\kappa$  des relations (3.23) à (3.26). A notre avis, cette approche n'est pas entièrement satisfaisante compte tenu du manque d'information présente dans les diagrammes de Mollier. Pour les mélanges de gaz parfaits, Abgrall [Ab89] et Fernandez-Larroururou [FL89] ont proposé un algorithme qui peut entraîner des concentrations négatives ou bien supérieures à l'unité dans certains cas extrêmes. Enfin, G. Mehlman a proposé de s'abstraire de l'hypothèse (4.4) pour la construction d'une matrice de Roe pour les gaz réactifs et a adapté le solveur de Colella-Glaz. En pratique (voir les détails dans la thèse de Mehlman [Me91]), il suffit de remplacer les ondes de détente par des chocs (c'est la solution duale du choix de Osher !) et de résoudre le système d'équations

(4.27) 
$$\begin{cases} u_M - u_g + \varphi(p_M; \rho_g, p_g; \gamma_g) = 0\\ u_M - u_d - \varphi(p_M; \rho_d, p_d; \gamma_d) = 0. \end{cases}$$

Ce système a une solution unique sous une condition d'apparition du vide un peu plus restrictive que la condition (2.90) mais il est résolu par un algorithme de

Newton-Raphson très efficace en partant de la valeur p = 0! Le calcul détaillé du schéma de Roe peut alors être extraordinairement simplifié et de plus la positivité des fractions massiques est garantie théoriquement. Dès que l'on a à prendre en compte plus de quatre espèces, le caractère itératif de la résolution du système (4.27) n'est pas pénalisant devant le peu de calculs complémentaires que demande cette version du schéma.

• Pour les flux d'Osher, Stoufflet [St89] et Abgrall-Montagné [AM89] ont proposé un schéma simplifié consistant à résoudre l'intersection des courbes de détente approchées grâce au système

(4.28) 
$$\begin{cases} u_O - u_g + \psi(p_O; \rho_g, p_g; \gamma_g) = 0\\ u_O - u_d - \psi(p_O; \rho_d, p_d; \gamma_d) = 0. \end{cases}$$

Mais les propositions qui ont été faites pour l'évaluation des coefficients  $\gamma_g$  et  $\gamma_d$  semblent moins fondées que la relation (3.28) que nous préconnisons ici. Là encore, le prix à payer lors du passage au multi-gaz réel est le caractère itératif du schéma approché. Notons que Abgrall et Montagné ont introduit une initialisation très robuste de l'algorithme de Newton dans ce cas.

• Enfin, la décomposition de flux de van Leer nous semble peu adaptée aux gaz réels même si elle est très populaire. En effet, elle est fondée sur un calcul algébrique sur des polynomes par rapport au coefficient  $\gamma$ , calcul qui est plus difficile à justifier pour un gaz réel quelconque. Toutefois B. Larrouturou [La91] a développé des corrections pour assurer la positivité de toutes les fractions massiques, lesquelles sont très efficaces en pratique. Nous préférons utiliser la décomposition de Sanders-Prendergast [SP74] moins satisfaisante du point de vue de ses propriétés théoriques mais fondée physiquement sur une discussion relative au nombre de Mach qui garde toujours une signification claire.

• Nous retiendrons de ce chapitre sur l'approximation du problème de Riemann que le fait de manipuler des solutions particulières des équations de la dynamique des fluides compressibles pour construire des schémas numériques donne aux méthodes ainsi construites de très bonnes propriétés de robustesse. Pour améliorer la précision, on fait appel en général à l'extension au second ordre proposéee par Van Leer [vL79] et exposée à la troisième partie.