



HAL
open science

Etude numérique d'écoulements réactifs transsoniques

Didier Chargy

► **To cite this version:**

Didier Chargy. Etude numérique d'écoulements réactifs transsoniques. Mécanique [physics.med-ph]. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1991. Français. NNT : . tel-00523155

HAL Id: tel-00523155

<https://pastel.hal.science/tel-00523155>

Submitted on 4 Oct 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

79044

N5 15792
(2)

THÈSE

présentée à

L'ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR

Spécialité: Mathématiques appliquées

par

Didier CHARGY

Sujet de la thèse:

ETUDE NUMERIQUE D'ÉCOULEMENTS REACTIFS TRANSSONIQUES



Soutenue le 17 JUIN 1991 devant la commission composée de:

Mr. P. CLAVIN	Président
Mr. V. GIOVANGIGLI	Rapporteurs
Mr. R. PEYRET	
Mr. R. BORGHI	Examineurs
Mr. T. DELAPORTE	
Mr. A. DERVIEUX	
Mr. B. LARROUTOUROU	



~~ES~~ M

11/11/11

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à exprimer ma plus profonde gratitude à Monsieur Bernard LARROUTUROU qui m'a permis d'entreprendre cette thèse en me proposant un sujet de recherche passionnant. Il a suivi et orienté de manière continue ce travail. J'ai énormément appris à ses côtés et je voudrais aussi saluer ici sa compétence scientifique qui n'a d'égale que sa gentillesse.

Mes remerciements vont également à Monsieur Alain DERVIEUX, responsable du projet SINUS, qui m'a accueilli dans ses locaux avant que le CERMICS ne soit créé. Il est à l'origine de plusieurs travaux présentés dans cette thèse et les discussions que j'ai eues avec lui m'ont toujours été d'un grand secours. Je tiens aussi à le remercier pour la disponibilité dont il a fait preuve malgré son emploi du temps très chargé.

J'exprime toute ma reconnaissance à Monsieur le professeur Paul CLAVIN qui me fait l'honneur de présider cette thèse. Messieurs Vincent GIOVANGIGLI et Roger PEYRET ont accepté la lourde tâche d'être rapporteur, je leur adresse mes plus sincères remerciements.

Monsieur le Professeur Roland BORCHI ainsi que Monsieur Thierry DELAPORTE me font l'honneur de participer à ce jury, je les en remercie.

Je tiens aussi à remercier chaleureusement toutes les personnes avec qui j'ai directement collaboré et qui cosignent certains travaux de cette thèse, notamment Madame Loula FEZOUÏ et Messieurs Remi ABGRALL, Mark LORIOT et Nathan MAMAN. Je remercie aussi la société SIMULOG et plus particulièrement Madame Françoise LORIOT pour m'avoir fourni l'essentiel des maillages ayant servi pour les calculs bidimensionnels.

Je remercie aussi tous les membres du projet SINUS avec qui j'ai eu des échanges fructueux. Je tiens également à remercier l'ensemble du personnel du centre de calcul et du centre de documentation de l'INRIA pour leur disponibilité et leur efficacité.

Enfin, je tiens à remercier toutes les personnes qui m'ont soutenu et surtout Patricia sans l'affection de laquelle je n'aurais pu mener à terme ce travail.

A Bérénice et Alexandre,

Table des Matières

INTRODUCTION GENERALE	1
I LES EQUATIONS DE LA COMBUSTION	5
I.1 INTRODUCTION	5
I.2 EQUATIONS DE BASE DE LA COMBUSTION	6
I.2.1 Conservation de la masse	6
I.2.2 Conservation de la quantité de mouvement	7
I.2.3 Equation de conservation de l'énergie	7
I.2.4 Fermeture du modèle	8
I.2.5 Equation d'un mélange gazeux réactif	10
I.3 DEFLAGRATION ET DETONATION	11
I.3.1 Théorie de Chapman-Jouguet	13
I.3.2 Un modèle de déflagration: le modèle isobare monodimensionnel	15
I.3.3 Un modèle de détonation: le modèle ZND	18
II ETUDE DE PLUSIEURS SCHEMAS CONSERVATIFS DECENTRES POUR LES MELANGES DE GAZ PARFAITS	23
II.1 INTRODUCTION	23
II.2 LES EQUATIONS D'EULER MULTI-ESPECES	24
II.2.1 Les équations	24
II.2.2 Hyperbolicité du flux	25
II.2.3 Le problème de Riemann multi-espèces	27
II.3 SCHEMAS DECENTRES DU PREMIER ORDRE	27
II.3.1 Une première extension : l'approche découplée	28

II.3.2	Un seconde approche : l'approche couplée	29
II.3.3	Une troisième approche : le flux de Riemann approché	33
II.4	SCHEMAS DECENTRES DU SECOND ORDRE	34
II.5	RESULTATS NUMERIQUES ET COMPARAISONS	35
II.5.1	Résultats précis au premier ordre	35
II.5.2	Résultats précis au second ordre	42
II.6	CONCLUSIONS	45
II.7	ANNEXE A	46
II.8	ANNEXE B	50
 III ETUDE NUMERIQUE DES ONDES DE DETONATION MONODIMENSIONNELLES		55
III.1	INTRODUCTION	55
III.2	EQUATIONS ET ADIMENSIONNEMENT	58
III.2.1	Equations	58
III.2.2	Adimensionnement	59
III.2.3	Equations réécrites en utilisant l'énergie totale	59
III.3	SCHEMAS NUMERIQUES	60
III.3.1	Schémas explicites	60
III.3.2	Schémas à stabilité inconditionnelle	63
III.3.3	Equations équivalentes pour le modèle de combustion	64
III.3.4	Traitement du terme source	68
III.3.5	Schémas de type Godunov basés sur la solution du PRG	69
III.3.6	Solution du PRG et schéma numérique pour l'équation modèle	71
III.4	RESULTATS NUMERIQUES POUR UNE DETONATION DE CHAPMAN-JOUGUET	71
III.4.1	Présentation du cas test	71
III.4.2	Comparaison des schémas	72
III.4.3	Analyse des solutions non physiques	76
III.4.4	Conclusions	83
III.5	ETUDE NUMERIQUE DES ONDES DE DETONATIONS INSTABLES	83
III.5.1	Introduction	83

III.5.2	Présentation du cas test	83
III.5.3	Résultats numériques	84
III.5.4	Conclusions	85
III.6	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	85
IV ETUDE NUMERIQUE DE L'INTERACTION REACTIVE DE JETS GAZEUX TRANSSONIQUES		89
IV.1	INTRODUCTION	89
IV.2	EQUATIONS	90
IV.3	DISCRETISATION SPATIALE	94
IV.3.1	Formulation variationnelle	94
IV.3.2	Terme temporel et terme source	96
IV.3.3	Termes convectifs	96
IV.3.4	Termes diffusifs	99
IV.4	DISCRETISATION TEMPORELLE	99
IV.4.1	Partie Euler	100
IV.4.2	Termes de diffusion et terme source	101
IV.4.3	Stabilité	101
IV.5	CONDITIONS AUX LIMITES	102
IV.5.1	Sur Γ_0 : traitement des bords glissants	102
IV.5.2	Sur Γ_∞ : traitement des bords sortants	103
IV.5.3	Détermination de la fonction de flux numérique $\hat{\Phi}$	103
IV.5.4	Conclusions	124
IV.6	PROBLEME PHYSIQUE A RESOUDRE	124
IV.6.1	Introduction	124
IV.6.2	Caractéristiques physiques	126
IV.7	RESULTATS NUMERIQUES	127
IV.7.1	Détente d'un jet supersonique	127
IV.7.2	Interaction réactive de deux jets gazeux	130
IV.7.3	Interaction des jets sur la géométrie à 3 injecteurs	140
IV.7.4	Présentation d'une solution stationnaire obtenue par une procédure d'adaptation dynamique du maillage	153

IV.8 CONCLUSION	157
IV.9 ANNEXE: Etude du flux de Steger et Warming modifié utilisant le β -schéma	157
IV.9.1 Introduction	157
IV.9.2 Etude du β -schéma sur l'équation scalaire d'advection	158
IV.9.3 Conclusion	159
V SIMULATION NUMERIQUE DE LA COMBUSTION D'UN MELANGE GAZEUX H₂-O₂ DANS UNE TETE DE CHAMBRE	161
V.1 INTRODUCTION	161
V.2 EQUATIONS	163
V.2.1 Modèle	163
V.2.2 Adimensionnement	165
V.2.3 Caractéristiques des jets et constantes physiques	167
V.3 CONDITIONS AUX LIMITES ENTRANTES	174
V.3.1 Conditions aux limites à pression libre: Flux N^0 1	174
V.3.2 Conditions aux limites à pression uniforme: Flux N^0 2	175
V.4 RESULTATS NUMERIQUES	175
V.4.1 Introduction	175
V.4.2 Solution Euler	176
V.4.3 Solution Euler avec termes diffusifs et combustion	186
V.5 CONCLUSION	196
VI ETUDE D'UNE CLASSE DE SCHEMAS IMPLICITES PAR RELAXATION NON LINEAIRE POUR LES SYSTEMES HYPERBOLIQUES AVEC OU SANS TERME SOURCE	199
VI.1 INTRODUCTION	199
VI.2 PRESENTATION DU PROBLEME SCALAIRE	200
VI.2.1 Schéma de relaxation	201
VI.2.2 Rappels	203
VI.3 ETUDE THEORIQUE SUR LE SCHEMA DE RELAXATION	204
VI.3.1 Préliminaires	204
VI.3.2 Stabilité L^∞	205
VI.3.3 Convergence de la suite $\{u_i^\alpha\}^\alpha$	206

VI.3.4	Conservation de la variation totale spatiale	208
VI.3.5	Conservation de la variation temporelle	210
VI.3.6	Conclusion partielle	211
VI.3.7	Stabilité L^2 dans le cas linéaire	211
VI.4	ETUDE DE LA CONVERGENCE SUR UNE EQUATION MODELE	213
VI.4.1	Convection	215
VI.4.2	Diffusion	215
VI.4.3	Terme source	217
VI.4.4	Convection-diffusion	217
VI.4.5	Conclusion	219
VI.5	RESULTATS NUMERIQUES SUR UN PROBLEME STATIONNAIRE	222
VI.5.1	Equations monodimensionnelles	222
VI.5.2	Schéma numérique	223
VI.5.3	Résultats numériques	224
VI.5.4	Conclusion	225
VI.6	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	229
VI.7	ANNEXE	230
VI.7.1	Convergence vers la solution faible pour $q = Cst$	230
VI.7.2	Unicité de la solution au sens de Kruzkov	232
VII	ETUDE DE METHODES IMPLICITES POUR LA RESOLUTION DES EQUATIONS DE LA COMBUSTION	235
VII.1	INTRODUCTION	235
VII.2	SCHEMAS NUMERIQUES POUR LE SYSTEME DECOUPLE	236
VII.2.1	Schéma explicite	237
VII.2.2	Schéma implicite linéarisé	238
VII.2.3	Formation d'une équation pour le terme source	241
VII.2.4	Schéma totalement implicite	243
VII.2.5	Schéma implicite par relaxation non linéaire	243
VII.2.6	Conclusion	247
VII.2.7	Résultats numériques	247
VII.3	SCHEMAS NUMERIQUES POUR LE SYSTEME COUPLE	257

VII.3.1 Schéma implicite linéarisé	257
VII.3.2 Schéma implicite par relaxation	260
VII.3.3 Résultats numériques	261
VII.3.4 Conclusion	263
VII.4 APPLICATION A LA RESOLUTION DES ECOULEMENTS REACTIFS	266
VII.4.1 Introduction	266
VII.4.2 Equation d'un mélange gazeux réactif à 2 espèces	266
VII.4.3 Schéma explicite pour la partie Euler et la convection de l'espèce . . .	267
VII.4.4 Schéma explicite par sous-cyclage pour la diffusion et la réaction . . .	268
VII.4.5 Schémas implicites pour la diffusion et la réaction	268
VII.4.6 Paramètres numériques	272
VII.4.7 Résultats numériques	272
VII.4.8 Conclusion	276
VII.5 CONCLUSION	280
CONCLUSIONS GENERALES	281

INTRODUCTION GENERALE

Les phénomènes de combustion interviennent dans de nombreux secteurs industriels; à titre d'exemples, on peut citer les domaines touchant à la production d'énergie (fours et foyers industriels) ou à la propulsion d'engins (moteurs à combustion interne des voitures où moteurs de fusées). Dans ce type d'écoulement, la physique est souvent extrêmement complexe (présence de gouttes, effets de turbulence, réactions chimiques multiples...) et à caractère multi-échelle spatiale et temporelle. La modélisation et la simulation numérique de l'ensemble de ces phénomènes font l'objet actuellement de nombreuses recherches fondamentales et appliquées.

Les écoulements fluides se classifient en fonction d'un nombre sans dimension qui est le nombre de Mach. Ce nombre noté M est le rapport de la vitesse du fluide sur la vitesse du son. On distingue alors principalement quatre régimes:

Si $M \ll 1$, l'écoulement est fortement subsonique. En général, les variations de pression sont négligeables.

Si $M \gg 1$, l'écoulement est hypersonique. C'est le cas typique des écoulements autour des corps rentrant dans l'atmosphère.

Si $0.5 < M < 1$, l'écoulement est subsonique, mais les variations de pression ne sont en général plus négligeables.

Si $M > 1$, l'écoulement est supersonique.

Les écoulements considérés dans cette thèse appartiennent à ces deux dernières catégories. Nous parlerons alors, de façon abusive, d'écoulements transsoniques.

Les écoulements que nous nous proposons d'étudier sont en fait très simplifiés par rapport aux écoulements réels et ne comportent que les éléments de base, à savoir la convection, la diffusion et la réaction chimique. Même pour un modèle simplifié, les effets compressibles qui apparaissent dans les écoulements transsoniques avec ou sans réaction chimique sont très importants. Ils nécessitent la mise au point de schémas numériques efficaces et performants ainsi que des maillages suffisamment fins si l'on souhaite capturer les détails essentiels (capture des chocs, des discontinuités de contact ou des zones de réaction pour ne citer que les principaux). Une autre difficulté provient de la disparité des échelles temporelles. Contrairement aux écoulements fortement subsoniques, pour lesquels les phénomènes acoustiques sont les plus contraignants, ce sont en général la chimie et les termes diffusifs qui s'avèrent être les plus restrictifs pour les écoulements transsoniques.

Pour résoudre numériquement les équations d'Euler réactive ainsi définies, nous utilisons une formulation mixte Eléments finis-Volumes finis sur des maillages non structurés (à base de triangles pour le cas bidimensionnel) utilisant des fonctions de flux numériques décentrés. Ces flux décentrés ne nécessitent aucun ajustement de paramètre comme c'est le cas pour les schémas centrés. L'utilisation de maillages non structurés présente le double avantage d'une part, de prendre en compte de façon naturelle les géométries complexes que l'on rencontre dans les écoulements industriels et d'autre part, de permettre des raffinements locaux du maillage lorsque cela est nécessaire. Pour atteindre l'ordre deux, nous combinons la méthode précédente avec une approche MUSCL (Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws) introduite par van-Leer [68]. Cette méthode numérique a été initialement développée pour les écoulements externes par la NASA au début des années 80. Les études réalisées à l'INRIA, pour des écoulements externes hypersoniques ([22],[30],...) et pour des écoulements internes subsoniques ([7],[23],[27],[31],...) ont montré les performances de cette méthode.

Les travaux que nous présentons constituent la première étape d'un programme d'étude visant à étudier le comportement de ces méthodes numériques pour les problèmes de combustion en régime transsonique. Il est en effet nécessaire d'un point de vue numérique de bien maîtriser ces écoulements avant d'y inclure des modèles physiques plus sophistiqués.

Le plan de la thèse qui comprend sept chapitres est le suivant:

Dans le premier chapitre, on présente en détail les équations de base pour l'étude des écoulements réactifs multi-espèces. Ces équations peuvent se scinder en trois parties; dans une première partie on retrouve les équations d'Euler multi-espèces écrites pour un mélange de gaz parfaits, tandis que les deux autres parties comprennent respectivement les effets diffusifs et les effets dus à la combustion.

Dans la plupart des cas, l'étude d'un phénomène de combustion se ramène à l'étude de la propagation d'un front de combustion. On distingue alors deux grandes classes d'écoulements réactifs suivant la valeur de la vitesse du front par rapport à la vitesse du son dans les gaz frais: les déflagrations et les détonations. Pour chacun de ces deux phénomènes, on présente des modèles simplifiés qui permettront entre autres de déterminer les différentes échelles caractéristiques utiles pour le traitement numérique.

Étant donné que notre objectif principal est l'étude du processus instationnaire de combustion, on se limite pour la partie hyperbolique à des méthodes numériques explicites en temps. Au chapitre 2, nous présentons une comparaison détaillée de trois classes de schémas numériques explicites adaptés au calcul d'écoulements de mélanges de gaz. Les principales différences entre les schémas résident dans le couplage discret entre les équations d'Euler écrites pour le mélange et les relations de conservation additionnelles décrivant la convection des espèces gazeuses. Les meilleurs résultats sont obtenus pour une classe de schémas qui préservent le principe du maximum pour les fractions massiques de chaque espèce. On met aussi en évidence que la meilleure stratégie pour étendre les schémas au second ordre avec la technique MUSCL est d'effectuer la limitation sur les variables physiques.

L'étude des phénomènes de détonation a connu un essor très important ces dernières

années. Et si d'importants progrès ont été réalisés aussi bien au niveau de la modélisation que de l'expérimentation, il semble maintenant que la majeure partie des difficultés provient d'une certaine inadaptation des méthodes numériques existantes pour le calcul de ce type d'écoulement. Le travail présenté dans le chapitre 3 est la première partie d'une étude ayant pour but d'évaluer les besoins en termes de schémas et de méthodes numériques pour le calcul des fronts de détonation stables ou instables en une dimension d'espace. On compare différents schémas numériques explicites et semi-implicites. On apporte aussi une justification sur l'existence des solutions non physiques qui apparaissent dans ces écoulements lorsque le pas spatial devient important devant la largeur de la zone de réaction.

Au chapitre 4 on présente en détail la méthode numérique bidimensionnelle qui est ensuite utilisée pour résoudre un certain nombre d'écoulements réactifs. Pour l'étude de ces écoulements multi-fluides à caractéristiques physiques différentes, le traitement des conditions aux limites est un problème très délicat. Il peut conduire dans certains cas à des solutions non physiques. On étudie en détail ce point et on propose des traitements qui se sont avérés relativement performants pour les écoulements considérés. Les différents solveurs que nous utilisons sont construits sur des maillages triangulaires non structurés, ce qui permet le cas échéant d'effectuer des calculs sur des géométries complexes ou bien d'avoir recours à une adaptation statique ou dynamique du maillage pour capter correctement les chocs ou les zones de réaction. Dans le cadre de ce travail, une procédure d'adaptation dynamique a été implémentée dans le code numérique, on présente quelques résultats illustrant les avantages de cette méthode.

Au chapitre 5, en utilisant le même modèle numérique que précédemment, on traite un problème bidimensionnel de flamme de diffusion dans une tête de chambre de moteur de fusée. Pour ce calcul on a dû traiter le problème des conditions aux limites entrantes qui, contrairement aux autres cas tests rencontrés sont subsoniques. Le choix adopté pour ces conditions aux limites conduit à des instabilités. Ces instabilités associées au caractère subsonique de la solution conduisent à des temps de calcul importants. On propose alors différentes solutions pour s'affranchir de cette difficulté. On met aussi en évidence dans ce chapitre les limites du modèle physique adopté et on compare l'influence d'un raffinement de maillage sur les valeurs les plus représentatives de l'écoulement.

Dans le chapitre 6, on présente une méthode de résolution des équations d'Euler monodimensionnelles, avec ou sans terme source, par un schéma totalement implicite, où une relaxation non linéaire par point est utilisée. Un des intérêts directs de ce schéma, mis à part le fait qu'il soit consistant en temps, est l'absence de matrice implicite à stocker. Dans une première partie on montre que cette classe de schéma possède de bonnes propriétés: stabilité inconditionnelle et, pour le cas linéaire, de préservation de la variation totale. Sous certaines hypothèses on montre que ce schéma converge vers la solution faible. Ensuite, on étudie la convergence de la phase de relaxation par analyse matricielle ou par analyse de Fourier; on montre que dans certains cas et par l'utilisation d'un processus de sur-relaxation, il est possible d'accroître cette convergence. Sur un cas test de flamme stationnaire, on obtient par ce schéma des gains en temps de calcul, par rapport à l'explicite, voisins de 5.

Enfin dans le dernier chapitre, on a étudié différents schémas numériques explicites et implicites pour résoudre un problème monodimensionnel de combustion instationnaire. L'originalité de ce travail réside dans la décomposition des différents opérateurs constituant le système et l'utilisation pour chacun du schéma numérique le mieux adapté. On a ainsi pu, tout en conservant une solution instationnaire de bonne qualité, et en utilisant une procédure de sur-relaxation obtenir des gains en temps de calcul supérieurs à 10.

Chapitre Premier

LES EQUATIONS DE LA COMBUSTION

I.1 INTRODUCTION

Dans cette première partie, on présente tout d'abord les équations de base de la combustion. Afin de simplifier le traitement numérique et mathématique des équations, on fait un certain nombre d'hypothèses qui bien que paraissant parfois grossières, seront jugées "physiquement raisonnables" pour les phénomènes que nous nous proposons d'étudier. On trouvera dans [72] ou [40], l'écriture de ces équations pour un écoulement très général comportant différentes espèces dont les caractéristiques physiques sont a priori différentes. Après avoir rappelé ces équations de base, on présente le modèle bidimensionnel qui est utilisé dans le code numérique (voir chapitres 4 et 5).

Dans la plupart des cas, l'étude d'un phénomène de combustion se ramène à l'étude de la propagation d'un front de combustion. On distingue alors deux grandes classes d'écoulements réactifs suivant la valeur de la vitesse de propagation du front D par rapport à la vitesse du son dans les gaz frais C_0 dans lesquels s'effectue cette propagation. Si $D > C_0$, le front de flamme est supersonique ($D \sim km/s$), on parle alors de détonation. Si par contre $D < C_0$, le front de flamme est subsonique ($D \sim m/s$), on est en présence d'une déflagration ou flamme. L'étude physique et numérique de ces phénomènes distincts (bien que régis par le même système d'équations) ne fait pas intervenir les mêmes phénomènes physiques. En effet, alors que pour les processus de déflagration les effets diffusifs sont essentiels, les processus de détonation sont si rapides et si violents que ces mêmes phénomènes deviennent négligeables ([28], [72]). C'est cette propriété de conversion très rapide de l'énergie qui caractérise les explosifs. L'étude directe sur le système d'équation général est très coûteuse et pas toujours justifiée pour la mise au point de méthodes numériques. Aussi, il n'est pas surprenant de trouver dans la littérature des modèles simplifiés ne prenant en compte que les effets essentiels apparaissant pour chacun de ces phénomènes. On citera par exemple pour une flamme le modèle

thermodiffusif isobare ([72], [39]) et pour une détonation le modèle de Zeldovich-Neumann-Doering (ZND) [28] ou celui de Majda [49]. De plus ces différents modèles permettent d'avoir des estimations sur des quantités essentielles pour le traitement numérique (par exemple la largeur de la zone de combustion).

On se propose de mettre en évidence à partir de la théorie de Chapman-Jouguet [28] les propriétés principales des déflagrations et des détonations. Ensuite, on présente deux modèles de combustion qui nous serviront pour le traitement numérique (détermination entre autre des échelles spatiales et temporelles). Le premier, propre à la déflagration, est le modèle de flamme isobare tandis que le second portant sur la détonation, est le modèle γ -D.

I.2 EQUATIONS DE BASE DE LA COMBUSTION

Pour établir ces équations, on se place dans le cadre théorique de la mécanique des milieux continus. On considère l'écoulement d'un fluide homogène composé de N espèces gazeuses pouvant donner lieu à une réaction exothermique du type combustion:



où A_k représente l'espèce k ; $k \in [1, N]$. μ_k et ν_k sont les coefficients stœchiométriques de la réaction (1). On note ρ_k la masse volumique de l'espèce k , $Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}$ la fraction massique de l'espèce k et m_k la masse molaire de l'espèce k .

I.2.1 Conservation de la masse

Pour chaque espèce k , on a:

$$\rho_t^k + \text{div}(\rho_k \vec{v}_k) = \dot{\rho}_k, \quad (2)$$

où \vec{v}_k représente la vitesse moyenne de l'espèce k et $\dot{\rho}_k$ le taux de variation de la masse volumique de l'espèce k due à la réaction chimique.

On somme la relation (2) sur toutes les espèces pour $k = 1, N$; on obtient alors:

$$\sum_k \rho_t^k + \text{div}(\sum_k \rho_k \vec{v}_k) = \sum_k \dot{\rho}_k.$$

mais $\sum_k \dot{\rho}_k = 0$ puisque globalement il n'y ni production ni consommation de matière. De plus, si l'on note \vec{v} la vitesse du mélange, on a:

$$\vec{v}_k = \vec{v} + \vec{V}_k,$$

où \vec{V}_k représente la vitesse de diffusion de l'espèce k .

Mais par définition $\vec{v} = \sum_k Y_k \vec{v}_k$ et $\rho_k = \rho Y_k$, alors:

$$\rho_t + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

On retrouve pour le mélange la forme classique de la conservation de la masse pour les écoulements fluides mono-espèce.

I.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

De la même façon, on écrit la conservation de la quantité de mouvement pour une espèce et on somme sur toutes les espèces.

$$(\rho_k v_i^k)_t + \text{div}(\rho_k v_i^k \vec{v}_k) = \sigma_{ij,j}^k + \rho_k F_i^k + P_i^k,$$

i représente la coordonnée d'espace.

\vec{P}_k est la variation de la quantité de mouvement de l'espèce k due aux interactions avec les autres espèces.

\vec{F}_k est la somme des efforts extérieurs s'exerçant sur l'espèce k et σ_{ij} représente le tenseur des contraintes.

La réaction chimique ainsi que les collisions entre molécules d'espèces différentes ne créent pas de quantité de mouvement, en conséquence $\sum_k P_i^k = 0$.

En sommant sur toutes les espèces $k = 1, N$ on obtient alors

$$(\rho v_i)_t + \text{div}(\rho v_i \vec{v}) = \sigma_{ij,j} + \rho F_i.$$

Dans cette écriture, on a posé $\sigma_{ij} = \sum_k \sigma_{ij}^k - \rho Y_k v_i^k v_j^k$; le terme $\rho Y_k v_i^k v_j^k$ représente un terme visqueux de diffusion.

On retrouve là aussi une équation similaire à celle obtenue pour un seul gaz.

I.2.3 Equation de conservation de l'énergie

Pour chaque espèce on a:

$$(\rho_k \epsilon_k + \frac{1}{2} \rho_k v_k^2)_t + \text{div}[\vec{v}_k (\rho_k \epsilon_k + \frac{1}{2} \rho_k v_k^2)] = \rho_k F_i^k v_i^k + (\sigma_{ij}^k v_i^k)_{,j} + \dot{Q}_k - \text{div} \vec{q}_k,$$

avec ϵ_k l'énergie interne de l'espèce k par unité de masse, \vec{q}_k le flux surfacique d'énergie et Q_k la variation d'énergie de l'espèce k due aux interactions entre les espèces.

On somme sur les espèces, $k = 1, N$:

$$(\rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho v^2)_t + \text{div}[\vec{v} (\rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho v^2)] = (\sigma_{ij} v_i)_{,j} + \rho F_i v_i - q_{j,j}$$

avec $\rho\epsilon = \sum_k (\rho Y_k \epsilon_k + \frac{1}{2} \rho Y_k V_i^k V_i^k)$ et $q_j = \sum_k [q_j^k - \sigma_{ij}^k V_i^k + \rho Y_k \epsilon_k V_j^k + \frac{1}{2} \rho Y_k V_i^k V_i^k V_j^k]$.

$\rho\epsilon$ représente l'énergie interne par unité de volume. C'est la somme des énergies internes volumiques des espèces et des énergies cinétiques de diffusion et \vec{q} est le flux total surfacique d'énergie.

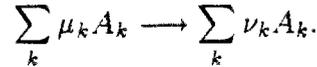
On a donc ainsi une équation de masse, N équations pour les espèces Y_k , trois pour la quantité de mouvement et une d'énergie. Soit au total N+5 équations.

On choisit comme variables indépendantes: ρ , Y_k , \vec{v} et T la température, soit N+5 variables. Pour effectuer la fermeture du modèle, il reste donc à exprimer les quantités inconnues en fonction de ces variables.

I.2.4 Fermeture du modèle

Termes de réaction

Comme décrit au début de ce paragraphe, la réaction qui a lieu est du type:



Si on note n_k le nombre de molécules de l'espèce k par unité de volume, on a:

$$\dot{\rho}_k = m_k \frac{dn_k}{dt} \text{ avec } \frac{dn_k}{dt} = \omega_k.$$

ω_k est le taux de réaction relatif à l'espèce k . La quantité constante $\frac{\omega_k}{(\nu_k - \mu_k)} = \omega$ est le taux global de la réaction.

Dans le cas où une seule réaction chimique a lieu, on a (avec une loi de type Arrhenius):

$$\dot{\rho}_k = m_k (\nu_k - \mu_k) \omega, \quad \omega = \prod_k \left(\frac{\rho Y_k}{m_k} \right)^{\mu_k} \mathcal{B}(T) \exp\left(\frac{-\epsilon_n}{RT}\right).$$

avec $\mathcal{B}(T)$ fonction algébrique de la température, ϵ_n est l'énergie d'activation de la réaction et R la constante des gaz parfaits.

Contraintes et forces

Les forces extérieures \vec{F} sont supposées connues. De plus, chaque fluide pris séparément est newtonien avec même viscosité cinématique ν , ce qui entraîne que la viscosité dynamique $\mu_k = \mu Y_k$ (car $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ et $\frac{\mu}{\rho} = \frac{\mu_k}{\rho_k} = \frac{\mu_k}{\rho Y_k}$).

Enfin, on néglige les termes quadratiques en \vec{V}_k , on obtient alors pour σ_{ij} :

$$\sigma_{ij} = -(p + \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\vec{v})) \delta_{ij} + \mu (v_{i,j} + v_{j,i}),$$

p , la pression totale du fluide, est donnée par la loi de Dalton, $p = \sum_k p_k$.

Termes de diffusion

\vec{q}_k , le flux de diffusion de l'espèce k , est donné par la loi de Fourier:

$$\vec{q}_k = -\lambda_k \vec{\nabla} T.$$

En négligeant les termes non linéaires en \vec{V}_k et en supposant les coefficients de diffusion thermique λ_k identiques pour chaque espèce, il s'en suit:

$$\vec{q} = -\lambda \vec{\nabla} T + \sum_k (\rho Y_k \vec{V}_k h_k),$$

où $\lambda = \sum_k \lambda_k$ est la conductivité thermique du mélange et $h_k = \epsilon_k + \frac{p_k}{\rho_k}$ l'enthalpie totale de l'espèce k .

Le terme de diffusion des espèces $Y_k \vec{V}_k$ est quant à lui donné par la loi de Fick avec comme hypothèse que le coefficient de diffusion moléculaire D est identique pour chaque espèce. On obtient alors:

$$Y_k \vec{V}_k = -D \vec{\nabla} Y_k.$$

Lois d'état

Il reste à exprimer les pressions partielles et totale ainsi que les énergies en fonction des variables indépendantes choisies.

On suppose que chaque fluide suit une loi d'état de gaz parfait. On a donc:

$$p_k = \frac{\rho Y_k}{m_k} RT, \quad p = \rho RT \sum_k \frac{Y_k}{m_k},$$

R est la constante universelle des gaz parfaits.

D'autre part, l'énergie interne ϵ peut s'exprimer en fonction des enthalpies h_k , en effet :

$$\epsilon = h - \frac{p}{\rho} \text{ et } h_k = h_k^0 + \int_{T_0}^T C_p^k dT,$$

donc:

$$\epsilon = \sum_k Y_k h_k^0 + Y_k \int_{T_0}^T C_p^k dT - \frac{p}{\rho}.$$

h_k^0 est l'enthalpie massique de formation à la température T_0 de l'espèce k , C_p^k la chaleur massique à pression constante.

Nous pouvons maintenant aborder la phase finale de cette partie: assembler les différentes parties pour aboutir, moyennant quelques hypothèses, au système d'équation implémenté dans le code numérique.

I.2.5 Equation d'un mélange gazeux réactif

On suppose que les forces extérieures \vec{F}_k sont nulles. On néglige d'autre part, parfois de façon abusive, le tenseur des contraintes visqueuses. Enfin, on suppose que les chaleurs massiques à pression constante C_p^k ne dépendent pas de la température.

Conservation des espèces

On a $\rho_t^k + \text{div}[\rho_k(\vec{v} + \vec{V}_k)] = \dot{\rho}_k$, cette équation conduit à:

$$(\rho Y_k)_t + (\rho v Y_k)_i = (\rho D Y_{k,i})_i + m_k(\nu_k - \mu_k)\omega.$$

Conservation de la masse

Cette équation reste inchangée.

$$\rho_t + (\rho v)_i = 0.$$

Conservation de la quantité de mouvement

En reportant dans l'équation correspondante l'expression du tenseur des contraintes σ_{ij} , il vient:

$$(\rho v_i)_t + (\rho v_i \vec{v})_i = -p_{,i}.$$

Conservation de l'énergie

L'équation d'énergie peut se mettre sous la forme:

$$(\rho e)_t + (\rho v_i e)_i = \sigma_{ij} v_{j,i} - q_{i,i}$$

On pose $Q\omega = \sum_k \tilde{h}_k^0 \dot{\rho}_k$ avec $\tilde{h}_k^0 = h_k^0 - C_p^k T_0$. Q représente la chaleur dégagée (exprimée en Joule/mole) par la réaction chimique à la température T_0 , c'est la différence entre l'enthalpie des réactants et l'enthalpie des produits de réaction à la température de référence T_0 . En notant e l'énergie totale par unité de volume diminuée de l'énergie de formation des espèces:

$$e = \rho \sum_k Y_k C_p^k T - p + \frac{1}{2} \rho v_i^2.$$

L'équation d'énergie devient:

$$e_t + [v_i(e + p)]_i = (\lambda T_{,i})_i + Q\omega + \sum_k (\rho D C_p^k T Y_{,i}^k)_i.$$

Modèle bidimensionnel à une réaction chimique

On note u et v les composantes du vecteur vitesse \vec{v} ; moyennant les différentes hypothèses énoncées plus haut, le modèle s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y = 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y = 0, \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y = 0, \\ e_t + [u(e + p)]_x + [v(e + p)]_y = \vec{\nabla}(\lambda \vec{\nabla} T) + Q\omega + \sum_{k=1}^{k=N} \vec{\nabla}(\rho D C_p^k T \vec{\nabla} Y_k), \\ \forall k = 1, N - 1, (\rho Y_k)_t + (\rho Y_k u)_x + (\rho Y_k v)_y = \vec{\nabla}(\rho D \vec{\nabla} Y_k) + m_k(v_k - \mu_k)\omega. \end{array} \right. \quad (3)$$

Notons $R = 8.314 J/^\circ K/mole$ la constante des gaz parfaits. On définit alors les caractéristiques physiques du mélange de gaz parfaits:

$$C_v = \sum_{k=1}^{k=N} Y_k C_v^k \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{\sum_{k=1}^{k=N} \gamma_k Y_k C_v^k}{\sum_{k=1}^{k=N} Y_k C_v^k}.$$

p_k la pression partielle s'exprime en fonction de γ_k et de C_v^k .

$$p_k = Y_k(\gamma_k - 1)C_v^k \rho T = \frac{\rho Y_k R T}{m_k}.$$

Alors les équations de fermeture du système (3) s'écrivent:

$$\left\{ \begin{array}{l} p = (\gamma - 1)\rho C_v T, \\ e = \rho C_v T + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2). \end{array} \right. \quad (4)$$

A ce système d'équations, on associe des conditions initiales et des conditions aux limites. D'un point de vue pratique, la résolution numérique d'un tel système se fait sur des équations adimensionnées afin de mettre en évidence les différentes échelles de grandeur. On présentera lorsque cela sera nécessaire l'adimensionnement et le système qui en découle (voir notamment pour les cas bidimensionnels les chapitres 4 et 5).

I.3 DEFLAGRATION ET DETONATION

Introduction

Les phénomènes de déflagration et de détonation ont été mis en évidence, à partir d'expériences portant sur la propagation d'un front de combustion d'un mélange gazeux dans un tube,

par plusieurs physiciens français: Berthelot (1881), Vieille (1882), Maillard et Le Chatelier (1881). Ils ont observé qu'en fonction des circonstances de l'expérience, des phénomènes très différents et reproductibles peuvent se produire. En effet, la plupart du temps le front de combustion se déplace dans le tube à une vitesse relativement faible (quelques m/s). Mais dans certains cas le front peut se déplacer à des vitesses de l'ordre du km/s . La première explication permettant de justifier l'existence de ces deux phénomènes a été donnée indépendamment par Chapman (1899) et par Jouguet (1905, 1917). Leur théorie repose sur les hypothèses suivantes:

1. L'écoulement est monodimensionnel.
2. La réaction chimique est instantanée (i.e les gaz frais et les gaz brûlés sont séparés par une interface d'épaisseur nulle à travers laquelle on peut utiliser les lois de conservation). Le fluide derrière la discontinuité (i.e dans les gaz brûlés) est en équilibre thermo-chimique.
3. Le saut au niveau du front de combustion est stationnaire. Par contre derrière le front, l'état des gaz brûlés peut éventuellement dépendre du temps.

Ces hypothèses, bien que très simplistes permettent cependant de mettre en évidence, comme nous allons le voir, les deux phénomènes observés expérimentalement. De plus, ce modèle permet de dégager certaines caractéristiques propres à chacun d'eux. D'un point de vue quantitatif, cette théorie est relativement satisfaisante pour les fronts de déflagration: elle prédit bien la forme des variables caractéristiques de l'écoulement. Par contre elle s'avère très approximative pour les détonations, c'est-à-dire pour les fronts qui se déplacent à grande vitesse. Alors que cette théorie prédit des variables hydrodynamiques (vitesse, pression, ...) monotones, l'expérience montre au contraire que ces mêmes variables présentent derrière le choc un pic qui peut être très important (jusqu'à 10 fois plus grand que la valeur prédite). L'explication et la théorie permettant d'expliquer cette structure ont été données indépendamment par Zeldovich (1940) en URSS, von Neumann (1942) aux Etats Unis et par Doering (1943) en Allemagne (modèle de détonation référencé ZND). L'idée, relativement simple, consiste à remarquer que la vitesse de propagation du choc est trop importante pour que la réaction chimique puisse avoir lieu instantanément sur une épaisseur nulle. C'est-à-dire que l'on considère une détonation comme un choc purement hydrodynamique suivi d'une zone de réaction dans laquelle toute l'énergie chimique est libérée. Les hypothèses de cette théorie sont alors les suivantes:

1. L'écoulement est monodimensionnel.
2. Le choc est une discontinuité purement hydrodynamique d'épaisseur nulle (car tous les phénomènes visqueux et diffusifs sont négligés).
3. Le taux de réaction chimique est nul au niveau du choc et est fini derrière celui-ci, la réaction est irréversible.
4. Toutes les variables hydrodynamiques autres que la composition chimique sont en équilibre thermodynamique local.

En fait, des effets 3-D très complexes se produisent dans l'onde de choc, mais la théorie de l'onde de choc plane comporte tous les éléments essentiels et permet d'obtenir une bonne précision des vitesses, températures et pressions correspondant à l'onde de détonation.

I.3.1 Théorie de Chapman-Jouguet

On considère un choc réactif d'épaisseur nulle se déplaçant à la vitesse $D > 0$ dans un milieu réactant supposé au repos. Notons par l'indice $_0$ la valeur des variables à droite du choc (i.e dans les gaz frais), et sans indice les variables justes à gauche de ce choc (i.e dans les gaz brûlés). Le choc étant stationnaire, les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent:

$$\rho_0 D = \rho(D - u). \quad (5)$$

$$p + \rho(D - u)^2 = p_0 + \rho_0 D^2. \quad (6)$$

où ρ représente la masse volumique, u la vitesse et p la pression du fluide.

Par élimination de la vitesse u dans ces deux équations, on définit une droite dans le plan $(p - v)$, (v est dans ce paragraphe le volume spécifique $v = \frac{1}{\rho}$) appelée droite de Rayleigh:

$$\mathcal{R} = \rho_0^2 D^2 - \frac{p - p_0}{v_0 - v} = 0. \quad (7)$$

Cette droite passe par le point (p_0, v_0) et sa pente vaut $-\rho_0^2 D^2$. L'équation (7) montre aussi que la pression et le volume massique varient en sens contraire à la traversée du choc. Ceci nous permet déjà de distinguer deux types de choc: ceux à travers lesquels la pression et la densité croissent (ce sont les détonations) et ceux à travers lesquels la pression et la densité décroissent (ce sont les déflagrations). Si on analyse l'équation (5) on constate alors que dans une détonation la vitesse du fluide est diminuée alors que dans une déflagration elle est augmentée.

Remarque :

En mécanique des fluides classique (i.e sans réaction chimique) les déflagrations, c'est-à-dire les chocs correspondant à une diminution de pression ne peuvent pas exister, ils violent le second principe de la thermodynamique (croissance de l'entropie).

Pour finir et déterminer entièrement l'état du fluide derrière le choc, il reste à utiliser la loi de conservation de l'énergie. Notons Y la fraction massique du réactant ($Y = 1$ dans les gaz frais et $Y = 0$ dans les gaz brûlés) et $\epsilon(p, v, Y)$ l'énergie interne spécifique. Cette loi de conservation donne alors:

$$\epsilon(p, v) + pv + \frac{1}{2}(D - u)^2 = \epsilon(p, v) + p_0 v_0 + \frac{1}{2}D^2. \quad (8)$$

Si maintenant on élimine u et D de cette équation par utilisation de (5-6), on obtient la courbe de Hugoniot dans le plan $(p - v)$:

$$\mathcal{H} = \epsilon(p, v, Y = 0) - \epsilon(p, v, Y = 1) - \frac{1}{2}(p + p_0)(v_0 - v) = 0. \quad (9)$$

En conclusion si l'équation d'état ϵ est connue, les deux équations (7-9) déterminent alors l'état final (p, v) (pour une vitesse de choc donnée) comme l'intersection de la droite de

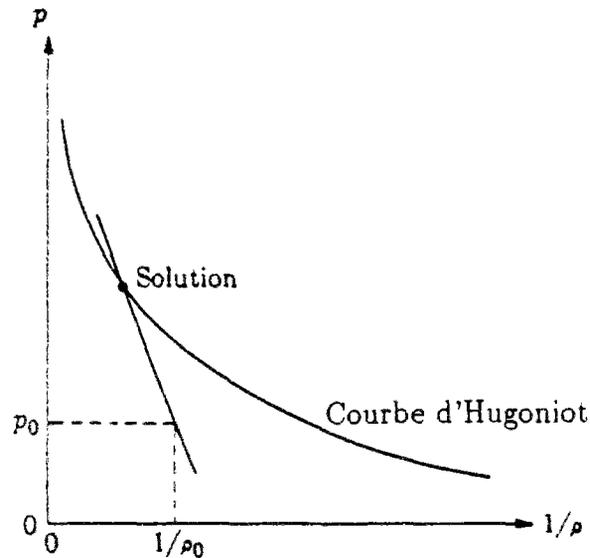


Figure I.1 : Détermination de l'état du fluide derrière le choc

Rayleigh avec la courbe d'Hugoniot. On suppose que la réaction chimique est exothermique c'est à dire que $\epsilon(p, v) < \epsilon(p_0, v_0)$ (voir figure I.1 ci-dessus).

La courbe de Hugoniot peut être divisée en quatre parties. Considérons les deux demi-droites de Rayleigh issues du point (p, v) et tangentes à la courbe de Hugoniot. On définit alors deux points: le point B ou point de détonation de Chapman-Jouguet et le point E ou point de déflagration de Chapman-Jouguet (voir figure I.2). On définit également la classification suivante de ces chocs réactifs:

Si le point (p, v) est situé:

-Sur AB: on a une détonation forte (l'écoulement par rapport au front est supersonique devant le front et subsonique derrière).

-Sur BC: on a une détonation faible (l'écoulement par rapport au front est supersonique devant le front et supersonique derrière).

En B on a une détonation de Chapman-Jouguet.

D'après (7), on constate que la zone CD est interdite.

-Sur DE: on a une déflagration faible (l'écoulement par rapport au front est subsonique devant le front et subsonique derrière).

-Sur EF: on a une déflagration forte (l'écoulement par rapport au front est subsonique devant le front et supersonique derrière).

La caractérisation de ces états en terme de vitesse subsonique ou supersonique en amont et en aval du choc constitue la "règle de Jouguet".

Avec ce modèle de Chapman-Jouguet, les quatre phénomènes précédemment décrit peuvent exister. Cependant sous des hypothèses moins restrictives et plus réalistes (par exemple réaction non instantanée), on peut montrer [28] que les déflagrations fortes n'existent pas. En fait, la plupart des déflagrations sont quasiment isobares, c'est à dire près du point D.

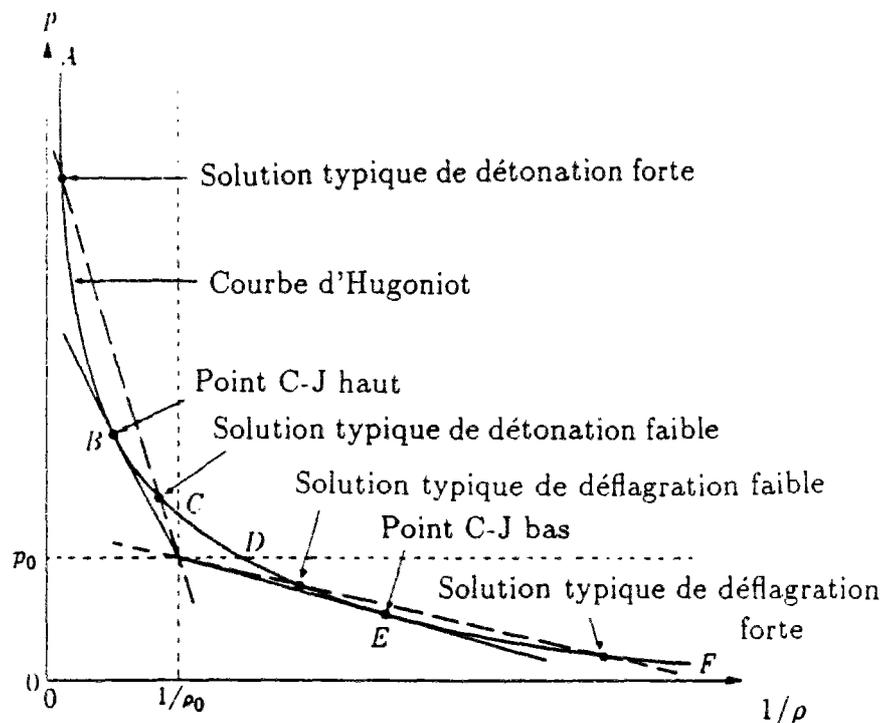


Figure I.2 : Diagramme montrant les différents états possibles sur la courbe de Hugoniot.

Par contre les deux types de détonation peuvent exister, mais les détonations faibles sont très rares et ne peuvent s'obtenir que dans des circonstances très particulières. A ce sujet mentionnons les travaux de Wagner [71] qui montre que des détonations faibles peuvent être solutions des équations de Navier-Stokes sous certaines conditions (paramètre de diffusion très important), ce résultat confirme les phénomènes observés dans les calculs numériques et dans le modèle de Colella, Majda et Roytburd [10]. On peut aussi montrer que sans intervention extérieure les détonations fortes sont très rares et convergent vers la détonation de Chapman-Jouguet. Notons par D_{CJ} la vitesse du front de détonation au point de Chapman-Jouguet (pour $D < D_{CJ}$ il n'existe pas de solution). Pour obtenir des détonations fortes, il suffit à l'aide d'un piston par exemple de forcer les gaz brûlés dans le sens de propagation du front de combustion; on introduit alors un paramètre de pilotage (overdrive dans la littérature américaine) $f = (D/D_{CJ})^2$, ou la vitesse D dépend directement de la vitesse que l'on impose au fluide par l'intermédiaire du piston.

I.3.2 Un modèle de déflagration: le modèle isobare monodimensionnel

On présente maintenant le modèle utilisé pour les déflagrations. Pour cela, on va se servir du système d'équations (3) réécrit pour deux espèces ($Y, 1 - Y$) de mêmes caractéristiques

physiques. Bien que ce système résulte de nombreuses hypothèses simplificatrices, il demeure encore trop complexe pour une étude mathématique. On va donc faire des hypothèses supplémentaires qui finalement permettront d'aboutir au modèle isobare monodimensionnel.

Comme on l'a vu, une déflagration se caractérise par le fait que l'écoulement par rapport au front de combustion est subsonique devant et derrière le front. On s'intéresse plus particulièrement à une classe d'écoulements fortement subsoniques (en d'autres termes dans le cadre du modèle de Chapman-Jouguet, l'état du fluide derrière le front de combustion se situe dans la courbe de Hugoniot près du point D).

La première approximation, relativement classique dans ce cas, consiste à remarquer que lorsque l'écoulement se fait à vitesse faible (le nombre de Mach est petit $Ma \ll 1$) la pression s'écrit:

$$p(x, t) = P(t) + \tilde{p}(x, t) \text{ avec } \frac{\tilde{p}}{P} = O(Ma^2)$$

Une étude d'ordres de grandeurs permet d'établir que le terme $\vec{\nabla} p$ est négligeable dans l'équation d'énergie (réécrite sous forme de température), mais pas dans l'équation de quantité de mouvement. Ceci permet d'aboutir au modèle isobare monodimensionnel.

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho u = c = Cste, \\ cT_x = \frac{\lambda}{C_p} T_{xx} + \frac{Q\omega}{C_p}, \\ cY_x = \frac{\lambda Y_{xx}}{LeC_p} - m\omega. \end{array} \right.$$

Avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega = \frac{B\rho Y}{m} \exp\left(\frac{-\varepsilon_n}{RT}\right), \\ Le = \frac{\lambda}{\rho DC_p}. \end{array} \right.$$

Analyse asymptotique

Pour étudier la structure de la flamme, on effectue des développements asymptotiques lables pour les grandes énergies d'activation [7,18,39].

On suppose que les gaz frais sont en $x = -\infty$ (à gauche), avec $T = T_u$ et $y = y_u$. En $x = +\infty$ (à droite), on a les gaz brûlés définis par $T = T_b$ et $y = y_b = 0$. (On suppose que tous les gaz frais sont brûlés par la réaction chimique). On arrive alors aux résultats suivants

[7,39]:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_b = T_u + \frac{Q}{mC_p} y_u \\ V_f = \frac{RT_b^2}{\varepsilon_n(T_b - T_u)} \sqrt{\frac{2\mathcal{B} Le \lambda T_u}{C_p T_b \rho_u}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{2RT_b}\right) \\ L_f = \frac{\lambda}{V_f C_p \rho_u}, \end{array} \right.$$

où V_f représente la vitesse d'avancement du front de flamme et L_f représente l'épaisseur de la flamme.

D'autre part, on note $\beta = \frac{\varepsilon_n(T_b - T_u)}{RT_b^2}$, β est le nombre de Zeldovich. Alors la largeur de la zone de réaction L_ω vérifie $L_\omega \sim \frac{L_f}{\beta}$. On a alors la structure de flamme représentée ci-dessous figure I.3.

Cette étude met en évidence deux grandeurs caractéristiques de la flamme qui sont L_f et L_ω .

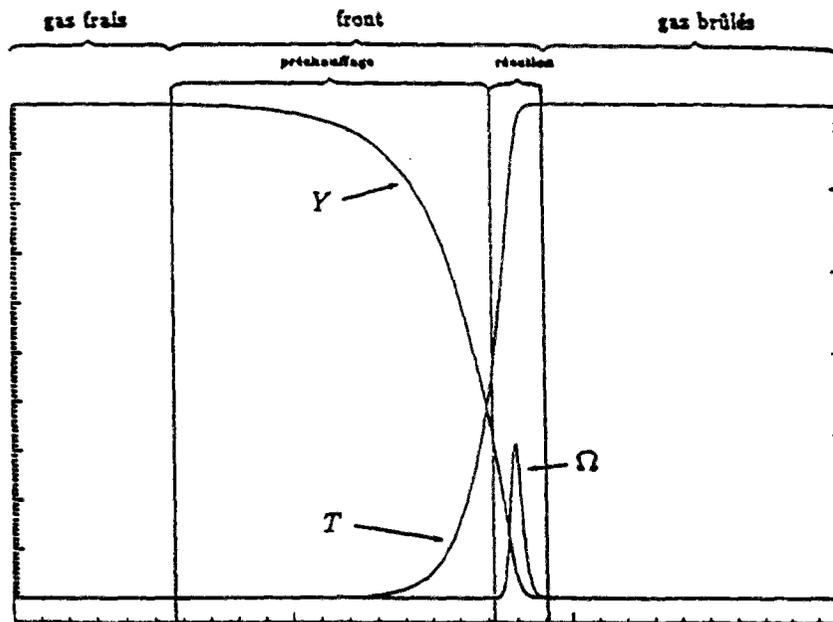


Figure I.3 : Structure de la flamme, profil de T, Y, ω

Pour des paramètres physiques réels, L_f est de l'ordre du dixième de millimètre et le rapport $\frac{L_f}{L_\omega}$ est de l'ordre de dix. Si la longueur du tube est de dix centimètres, on constate une disproportion entre ces différentes grandeurs caractéristiques : rapport de 1000. Une solution pour s'affranchir de cette difficulté consiste à utiliser un maillage adapté (soit une adaptation

dynamique pour l'étude des phénomènes instationnaires soit une adaptation statique pour les phénomènes stationnaires).

Notons avant de conclure cette partie que l'étude présentée est valable pour des phénomènes fortement subsoniques. Or les flammes que l'on considérera (interaction réactive de jets) apparaissent dans des milieux où l'écoulement peut être supersonique. Il n'est pas prouvé que les résultats asymptotiques restent valables dans ce cadre, c'est l'objet actuellement de nombreux travaux. Quoi qu'il en soit, pour les problèmes que l'on a traités, ces résultats asymptotiques ont tout de même permis de se fixer des ordres de grandeur qui se sont trouvés assez bien vérifiés dans les expériences numériques réalisées.

I.3.3 Un modèle de détonation: le modèle ZND

Il n'est pas possible, comme c'était le cas pour le phénomène de déflagration, de tirer du système d'équation (3) un modèle simplifié permettant d'apprécier les caractéristiques d'une détonation. Nous conserverons donc pour l'étude des détonations le système complet (3).

Par ailleurs, Le modèle de Chapman-Jouguet s'avère insuffisant et ce pour deux raisons: il ne prédit pas les pics précédemment évoqués et surtout il ne permet pas l'obtention d'une estimation de la largeur de flamme (puisque ce modèle confond dans une zone d'épaisseur nulle le choc et la zone de réaction chimique). Le modèle ZND dont nous avons précisé les hypothèses dans l'introduction ci-dessus, donne une réponse à ces deux problèmes.

Dans ce modèle, le front de détonation est représenté par un choc d'épaisseur nulle suivi par une zone de réaction stationnaire. On appelle état final l'état du fluide juste derrière la zone de réaction. Les gaz brûlés derrière l'état final peuvent être (comme le montre la figure I.4) de deux types suivant la valeur de la vitesse u_p qu'un hypothétique piston imposerait au fluide. Le cas (b) (cas piloté) où le fluide derrière l'état final est stationnaire correspond au cas $f \geq 1$, dans ce cas la vitesse du piston u_p est égale à la vitesse de l'état final. Dans ce cas, c'est la vitesse u_p qui conditionne la vitesse $D \geq D_{CJ}$ du front de détonation. Le cas (a) ou cas non piloté (détente du fluide derrière l'état final suivi d'un état stationnaire) correspond à un cas où la vitesse hypothétique du piston est inférieure à la vitesse de l'état final. Dans ce cas c'est le front de détonation, qui se déplace nécessairement à la vitesse D_{CJ} , qui détermine la vitesse de l'état final; l'écoulement est alors entièrement déterminé par les deux conditions aux limites (état final et piston).

En conclusion de ce qui précède, une détonation sera entièrement définie si on sait déterminer l'état final. Aussi, pour rendre les calculs permettant la détermination de l'état final plus simples et plus généraux, on s'impose par la suite le coefficient de pilotage f plutôt que la vitesse u_p du fluide à l'infini.

Compte tenu des hypothèses, les différentes équations mises en place pour la théorie de Chapman-Jouguet (conservation de la masse (5) et de la quantité de mouvement (6)) restent

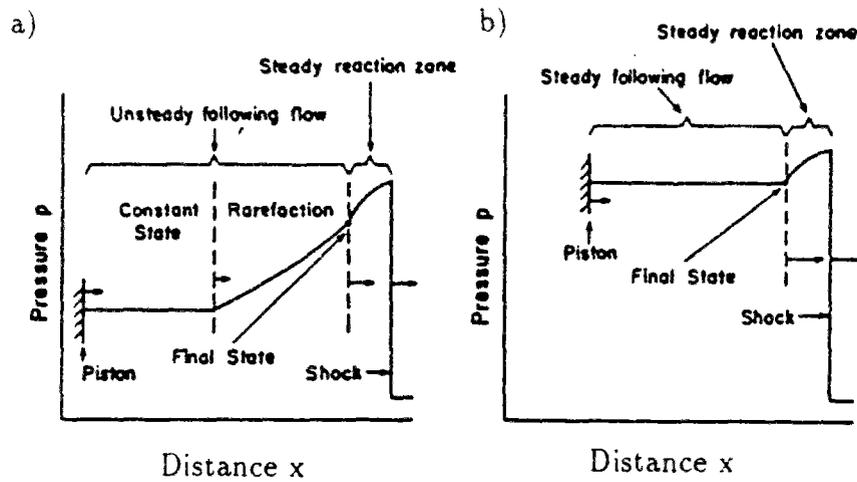


Figure I.4 : Structures des détonations stationnaires, cas non piloté (a) et cas piloté (b)

valables. Simplement, on doit maintenant considérer que l'équation de Hugoniot dépend de la fraction massique Y .

$$\mathcal{H} = \epsilon(p, v, Y) - \epsilon(p, v, Y = 1) - \frac{1}{2}(p + p_0)(v_0 - v) = 0. \quad (10)$$

Donc pour chaque valeur de Y comprise entre 1 et 0, on peut comme on l'a fait pour la théorie de Chapman-Jouguet déterminer l'état du fluide comme étant l'intersection de la courbe de Hugoniot avec la droite de Rayleigh (qui reste la même puisque cette droite ne dépend que de l'état final et de l'état initial). La solution que l'on obtient est représentée dans le plan $(p - v)$ figure I.5. L'intersection de la courbe de Hugoniot correspondant à $Y = 1$ avec la droite D_1 donne le point N pour lequel la réaction ne s'est pas encore produite, ensuite le fluide passe de $Y = 1$ à $Y = 0$ en se déplaçant sur la droite D_1 jusqu'au point S correspondant à l'état final. On constate que ce modèle prédit bien un pic des variables puisque par exemple $p_N > p_S$.

Si on note u la vitesse d'une particule se déplaçant du point N vers le point S , son équation de mouvement sera donnée par l'équation suivante:

$$\frac{dx}{dt} = D_1 - u, \quad (11)$$

où x représente la distance séparant à l'instant t la particule du point N situé juste derrière le choc. Si on se donne en plus la loi de la réaction chimique:

$$\frac{dY}{dt} = \omega(\rho, Y, T), \quad (12)$$

alors on connaît explicitement $Y(x)$, ou $x(Y)$. En effet pour chaque point compris entre N et S l'utilisation des relations (5,6,10) et de la loi d'état du fluide (non précisée ici) permet

de transformer les équations (11,12):

$$\begin{aligned}\frac{dY}{dt} &= \omega(Y), \\ \frac{dx}{dt} &= f(Y).\end{aligned}$$

La résolution de ce système est alors immédiate. La largeur de la zone de réaction devient: $L_r = x(Y = 0)$. Malheureusement, pour les formes classiques du terme source, l'intégration directe permettant de déterminer $Y(x)$ n'est pas possible. Aussi, on doit résoudre ce système de façon numérique.

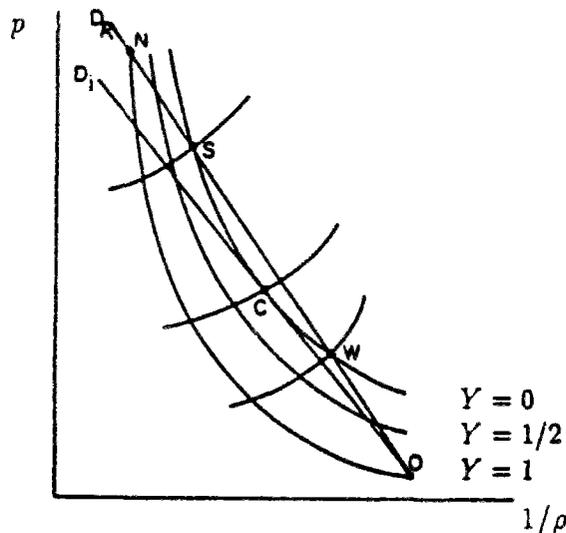


Figure I.5 : Détonations stationnaires pour le modèle ZND

Ce modèle ZND n'autorise en fait que des détonations fortes (S sur la figure I.5) ou des détonations de Chapman-Jouguet (CJ), c'est à dire qu'il exclut toute détonation faible (W). Par exemple, on pourrait très bien imaginer une détonation sans choc amenant directement le fluide du point O au point W; en fait, dans notre contexte ces solutions sont non physiques puisque alors la réaction devrait avoir lieu dans l'état initial sans choc pour la déclencher. Pour mettre en évidence de telles solutions, il faut faire appel à des hypothèses physiques plus réalistes (effets de transport, plusieurs réactions,...) [28,72].

Détermination de l'état CJ

La détermination de l'état CJ est obtenu en remarquant que la droite de Rayleigh est tangente à la courbe de Hugoniot. L'égalité des pentes donne alors (voir [28]):

$$p_{CJ} = \frac{\rho_0 D_{CJ}}{\gamma + 1 - \frac{p_{CJ}}{p_0}}$$

L'utilisation des lois de conservation (5-6) permet d'obtenir le volume massique v_{CJ} et la vitesse u_{CJ} .

Exemples de solutions obtenues par le modèle ZND

On considère une réaction chimique simple du type $A \rightarrow B$ et on suppose que A et B sont deux gaz parfaits de mêmes caractéristiques physiques:

$$pv = \frac{R}{m}T = rT, \quad \epsilon = \frac{pv}{(\gamma - 1)} - q(1 - Y),$$

on prend pour le terme source une loi simple de type Arrhenius:

$$\frac{dY}{dt} = \omega = -k Y \exp(-E/rT),$$

où k est une constante définie de façon à obtenir une demi largeur de réaction $L_{1/2}$ égale à 1 ($L_{1/2}$ est la distance sur laquelle la fraction massique passe de 1 à 1/2).

Par exemple, pour $q = 50rT_0$, $\gamma = 1.2$, $E = 50rT_0$ et $f = 1.6$ on obtient le résultat figure I.6. Dans la pratique, la demi largeur de réaction peut varier dans des proportions très importante: par exemple pour les hydrocarbures, elle varie de 0.3 mm (acétylène) à 25 mm (méthane).

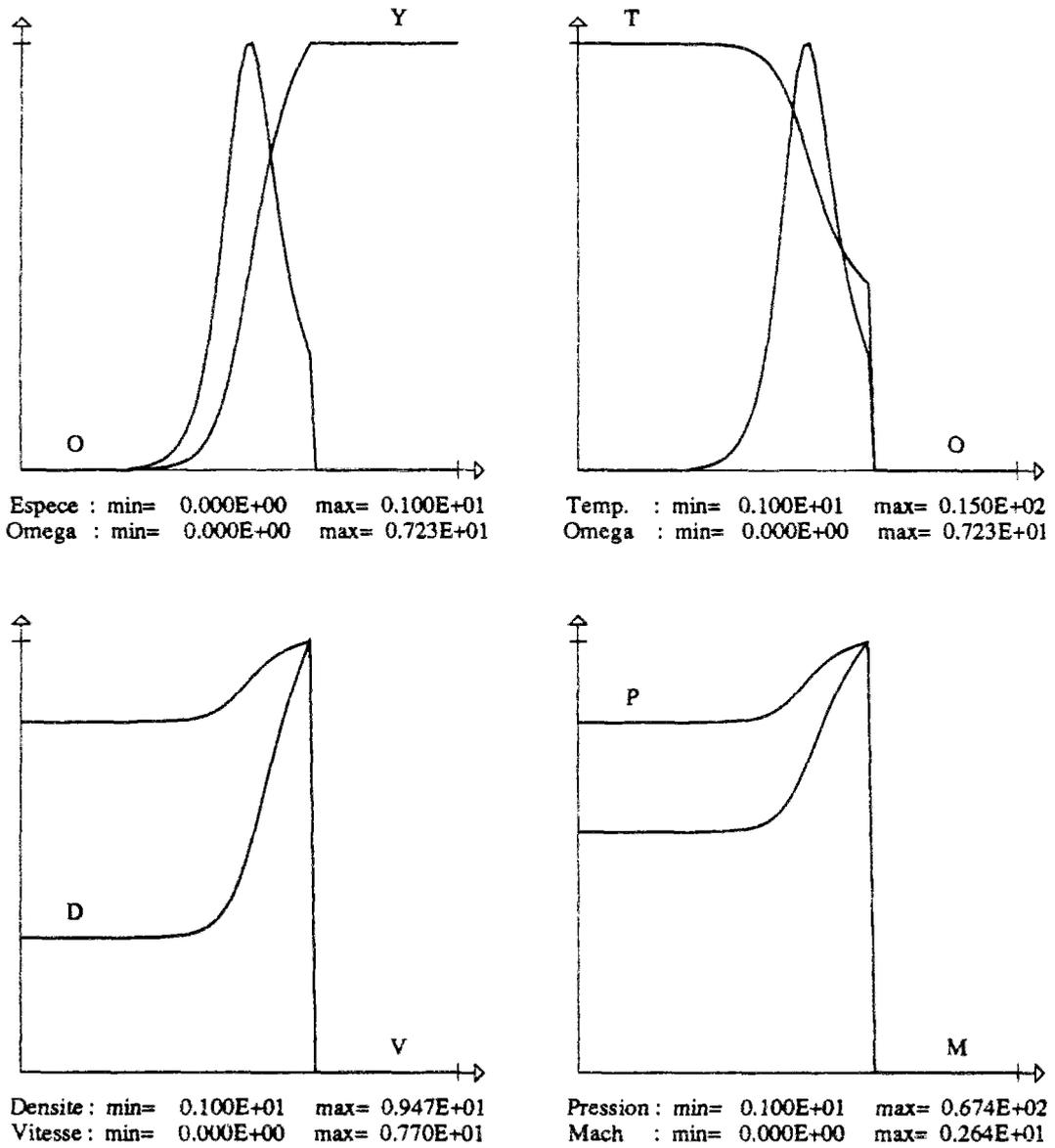


Figure I.6 : Solution ZND pour $f = 1.6$, $L_{1/2} = 1$, état final: $p = 54.82$, $\rho = 1.2$, $u = 6.25$, $M = 1.47$, $D = 8.6$

Chapitre II

ETUDE DE PLUSIEURS SCHEMAS CONSERVATIFS DECENTRES POUR LES MELANGES DE GAZ PARFAITS

II.1 INTRODUCTION

On s'intéresse à l'approximation numérique du système des équations d'Euler multi-espèces :

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 , \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 , \\ E_t + [u(E + p)]_x = 0 , \\ (\rho Y)_t + (\rho u Y)_x = 0 , \end{cases} \quad (13)$$

qui décrit le comportement d'un écoulement unidimensionnel formé de deux espèces (pour les notations, voir plus loin). Ceci constitue une première étape vers des études plus complexes concernant les mélanges de gaz dans lesquels les phénomènes hyperboliques jouent un rôle prépondérant : les écoulements transsoniques réactifs (voir par exemple [15]), les écoulements hypersoniques ou la détonation (voir par exemple [2], [12], [22], [30], [51], [48]).

Nous nous intéressons plus particulièrement aux définitions et comparaisons de schémas décentrés pour ces équations d'Euler multi-espèces. Partant des schémas décentrés qui ont été développés pour les équations d'Euler classiques (tels que les schémas d'Osher [52], van Leer [68] et Roe [57]), nous décrivons trois approches possibles pour étendre ces schémas au système multi-espèces (13). Les différences entre ces trois classes de schémas multi-espèces concerne le couplage de la dernière équation de (13) avec les trois premières équations de ce même système. Deux de ces approches s'appuient sur le caractère hyperbolique du système (13) ainsi que sur le comportement de la solution du problème de Riemann multi-espèces correspondant.

Après avoir rappelé dans la section II.2 quelques propriétés de base du système (13) et du problème de Riemann correspondant, nous décrivons en détail dans la section II.3 les trois différentes classes de méthode numérique pour le calcul des solutions de (13). Une extension au second ordre de ces schémas est décrite dans la section II.4. Des comparaisons numériques détaillées sont présentées dans la section II.5.

II.2 LES EQUATIONS D'EULER MULTI-ESPECES

II.2.1 Les équations

Dans cette partie, on considère l'écoulement unidimensionnel non visqueux d'un mélange de N espèces $\Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_N$. Nous supposons toujours que les différentes espèces constituant le mélange sont à l'équilibre thermodynamique, que la pression du gaz est la somme des pressions partielles de chaque espèce (loi de Dalton), et que chaque espèce Σ_k se comporte comme un gaz parfait dont les chaleurs spécifiques C_{vk} et C_{pk} sont constantes ; on notera γ_k leur rapport $\gamma_k = \frac{C_{pk}}{C_{vk}}$. Enfin les effets diffusifs, ainsi que d'éventuelles réactions chimiques, seront négligés.

Les équations régissant le mélange traduisent la conservation de la masse pour chaque espèce, la conservation de la quantité de mouvement et celle de l'énergie totale. Nous l'écrivons sous la forme suivante (voir par exemple [72]) :

$$\begin{cases} (\rho Y_k)_t + (\rho u Y_k)_x = 0 & \text{pour } 1 \leq k \leq N, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0, \\ \mathcal{E}_t + [u(\mathcal{E} + p)]_x = 0, \end{cases} \quad (14)$$

où ρ est la masse volumique du mélange, Y_k est la fraction massique de l'espèce Σ_k ($\rho_k = \rho Y_k$ est la masse volumique partielle de l'espèce Σ_k , donc $\sum_{k=1}^N Y_k = 1$), u est la vitesse du mélange (qui est aussi la vitesse de chaque espèce si on néglige la diffusion moléculaire), p est la pression du mélange et \mathcal{E} est l'énergie totale par unité de volume.

En tenant compte des hypothèses précédentes, les équations de conservation (14) sont complétées par les relations suivantes (voir par exemple [43]) :

$$\begin{aligned} p &= \sum_{k=1}^N \rho Y_k \frac{R}{M_k} T, \\ \mathcal{E} &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{2} \rho Y_k u^2 + \rho Y_k C_{vk} T + \rho Y_k \tilde{h}_k^0 \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Ici, R est la constante universelle des gaz parfaits, T est la température du mélange, \tilde{h}_k^0 est l'enthalpie spécifique de formation de l'espèce Σ_k et M_k sa masse molaire.

On vérifie immédiatement que les relations (15) peuvent être combinées pour donner :

$$p = (\gamma - 1) \left(\mathcal{E} - \frac{1}{2}u^2 - \sum_{k=1}^N \rho Y_k h_k^0 \right), \quad (16)$$

γ étant le rapport local des chaleurs spécifiques du mélange :

$$\gamma = \frac{(C_p)_{\text{mélange}}}{(C_v)_{\text{mélange}}} = \frac{\sum_k Y_k C_{pk}}{\sum_k Y_k C_{vk}} = \frac{\sum_k Y_k C_{vk} \gamma_k}{\sum_k Y_k C_{vk}}. \quad (17)$$

La dernière égalité (17) montre que la valeur locale de γ (qui dépend de la composition du mélange) est une combinaison convexe des γ_k .

Le système (14-16) peut être réécrit de plusieurs manières. Si le symbole E désigne la somme des énergies cinétiques et thermiques par unité de volume :

$$\begin{cases} (\rho Y_k)_t + (\rho u Y_k)_x = 0 & \text{pour } 1 \leq k \leq N, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0, \\ E_t + [u(E + p)]_x = 0, \end{cases} \quad (18)$$

et si on somme les équations portant sur les espèces dans (18), on peut réécrire (18) comme :

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0, \\ E_t + [u(E + p)]_x = 0, \\ (\rho Y_k)_t + (\rho u Y_k)_x = 0 & \text{pour } 1 \leq k \leq N - 1. \end{cases} \quad (19)$$

la pression p étant donnée par :

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2}\rho u^2 \right). \quad (20)$$

On remarque que dans (19), les trois premières équations sont les équations d'Euler classiques, écrites ici pour le mélange. Dans la suite, ce sera cette forme des équations d'Euler multi-espèces que nous utiliserons.

II.2.2 Hyperbolicité du flux

Dans la suite, nous nous restreindrons au cas du mélange de deux espèces de gaz parfait, Σ_1 et Σ_2 . Néanmoins, tous les résultats présentés ici peuvent être généralisés immédiatement au cas du mélange d'un nombre quelconque N d'espèces. Si on désigne par Y la fraction massique Y_1 de la première espèce, on obtient le système (13), que l'on écrit sous forme

conservative $W_t + F(W)_x = 0$, W et F étant les vecteurs des variables conservatives et des flux :

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \\ \rho Y \end{pmatrix}_t + \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \\ \rho u Y \end{pmatrix}_x = 0, \quad (21)$$

la pression étant définie par la relation (20). Dans (20), γ est défini par :

$$\gamma = \frac{Y C_{v1} \gamma_1 + (1 - Y) C_{v2} \gamma_2}{Y C_{v1} + (1 - Y) C_{v2}}. \quad (22)$$

On obtient facilement le résultat suivant (qui est montré dans, par exemple, [1,3,12,25,43] :

Proposition 1 *Si les rapports des chaleurs spécifiques γ_k de chaque espèce du mélange vérifient l'inégalité :*

$$\gamma_k > 1$$

alors le système (21) est hyperbolique. •

La démonstration de ce résultat est immédiate. Nous mentionnerons simplement que la matrice jacobienne $A(W) = \frac{DF}{DW}$ a l'expression suivante :

$$A(W) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{(\gamma - 3)}{2} u^2 + X & (3 - \gamma)u & \gamma - 1 & X' \\ \frac{(\gamma - 1)}{2} u^3 - uH + uX & H - (\gamma - 1)u^2 & \gamma u & uX' \\ -uY & Y & 0 & u \end{pmatrix}$$

On a posé $H = \frac{E + p}{\rho}$ (H est l'enthalpie totale du mélange), $X = \frac{p}{\gamma - 1} \frac{\partial \gamma}{\partial W^1}$, où γ est donné par (22) et $X' = \frac{p}{\gamma - 1} \frac{\partial \gamma}{\partial W^4}$. Un calcul immédiat montre que les valeurs propres de $A(W)$ sont

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u, \quad \lambda_4 = u + c$$

où la vitesse du son c a l'expression habituelle $c = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}}$ (mais γ est fonction de W et n'est donc plus constant). Un système complet de vecteurs propres de $A(W)$ peut facilement être trouvé : $A(W)$ est diagonalisable. La seule différence avec le cas habituel du gaz parfait est la multiplicité de la valeur propre $\lambda_2 = u$.

Remarque : Les relations suivantes sont faciles à vérifier et seront utiles par la suite :

$$H = \frac{u^2}{2} + \frac{c^2}{\gamma - 1},$$

$$X' = \frac{p}{\gamma - 1} \frac{C_{v1}C_{v2}(\gamma_1 - \gamma_2)}{\rho[YC_{v1} + (1 - Y)C_{v2}]^2} = \frac{C_{v1}C_{v2}(\gamma_1 - \gamma_2)T}{YC_{v1} + (1 - Y)C_{v2}} \cdot \bullet \quad (23)$$

II.2.3 Le problème de Riemann multi-espèces

Dans cette partie, nous étudions la solution du problème de Riemann associé au système (21). Considérons deux états constants W_L et W_R et le problème :

$$\begin{cases} W_t + F(W)_x = 0 & \text{pour } x \in \mathbb{R}, t \geq 0, \\ W(x, 0) = \begin{cases} W_L & \text{si } x < 0, \\ W_R & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases} \quad (24)$$

Ce problème est résolu dans [1,3,43]. Sa solution $W_{\mathcal{R}}(x, t)$ est présentée sur la figure II.1. Elle est bien sûr auto-similaire (c'est à dire $W_{\mathcal{R}}(x, t)$ ne dépend que du rapport $\frac{x}{t}$) et consiste, comme dans le cas mono-espèce, en quatre états constants $W^{(1)}, W^{(2)}, W^{(3)}, W^{(4)}$ séparés par des chocs, ondes de détente ou discontinuités de contact. De manière plus précise, comme cela est montré sur la Figure II.1, $W^{(1)} = W_L$ et $W^{(2)}$ sont séparés par une 1-onde (c.a.d. une onde associée au premier champ caractéristique, soit un 1-choc, soit une 1-détente); $W^{(2)}$ et $W^{(3)}$ sont séparés par une 2-discontinuité de contact ; $W^{(3)}$ et $W^{(4)} = W_R$ sont séparés par une 4-onde. Aussi, la pression p et la vitesse u sont constantes au travers d'une discontinuité de contact. Enfin, la fraction massique Y demeure constante au travers d'une 1- ou 4-onde (quelque soit la nature de ces ondes, chocs ou détentes) ; elle ne peut varier qu'au travers d'une discontinuité de contact.

II.3 SCHEMAS DECENTRES DU PREMIER ORDRE

On s'intéresse ici au calcul numérique de la solution du problème (21) :

$$\begin{cases} W_t + F(W)_x = 0 & \text{pour } x \in \mathbb{R}, t \geq 0, \\ W(x, 0) = W^0(x) & \text{pour } x \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

Dans ce paragraphe, on se restreindra au cas d'un schéma explicite à trois points du premier ordre écrit sous forme conservative. En d'autres termes et si on utilise des notations très classiques, nous considérons des schémas numériques de la forme :

$$\frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} + \frac{\phi_{j+1/2} - \phi_{j-1/2}}{\Delta x} = 0,$$

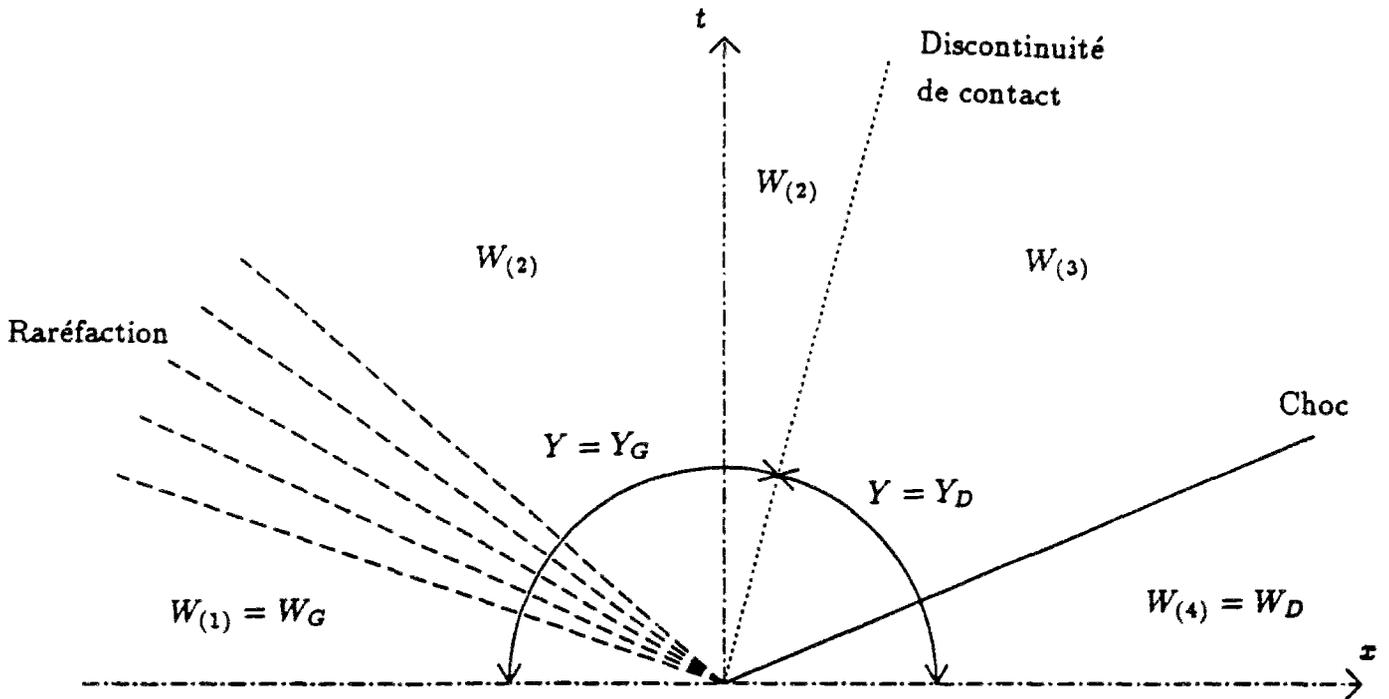


Figure II.1 : La solution $W_{\mathcal{R}}(x, t)$ du problème de Riemann multi-espèces.

où le flux numérique $\phi_{j+1/2}$ est évalué en utilisant une fonction de flux numérique Φ :

$$\phi_{j+1/2} = \Phi(W_j^n, W_{j+1}^n).$$

(Nous écrivons $\phi_{j+1/2}$ au lieu de $\phi_{j+1/2}^n$ pour simplifier).

Il existe de nombreux schémas de ce type pour les équations d'Euler mono-espèce (voir par exemple [32] et les références mentionnées à la fin de cet article). Nous considérerons trois de ces schémas, les schémas d'Osher, de Roe et de van Leer, et nous décrirons trois manières différentes de les généraliser au cas du système multi-espèces (21).

II.3.1 Une première extension : l'approche découplée

Une première approche, très simple, pour calculer les solutions numériques de (21) a été utilisée par exemple dans [24]. Elle consiste à traiter séparément à chaque pas de temps les équations d'Euler et les équations portant sur les espèces dans (21). Dans la suite, cette approche sera dénommée approche "découplée" ou "approche (A)".

Pour les équations d'Euler, on utilise l'un des flux numériques classiques adapté au cas mono-espèce avec γ figé. Cela veut dire que, pour l'évaluation des trois premières composantes de $\phi_{i+1/2}$ au temps t^n , on utilise l'un des flux précédents calculé en remplaçant γ par $\gamma_{i+1/2} = \gamma((Y_i + Y_{i+1})/2)$.

De plus, on utilise une approximation décentrée de type *donor-cell* pour les équations portant sur les espèces ; en définissant $u_{i+1/2} = (u_i^n + u_{i+1}^n)/2$, on évalue la quatrième composante $\phi_{i+1/2}^4$ de $\phi_{i+1/2}$ par :

$$\phi_{i+1/2}^4 = u_{i+1/2}^n \times \begin{cases} (\rho Y)_i^n & \text{si } u_{i+1/2}^n > 0, \\ (\rho Y)_{i+1}^n & \text{si } u_{i+1/2}^n < 0. \end{cases} \quad (25)$$

Cette approximation *donor-cell* repose sur la formulation non conservative $Y_t + uY_x = 0$ de l'équation portant sur les espèces (qui peut être obtenue en combinant les première et quatrième équations de (21) : la variable Y est simplement convectée par l'écoulement).

On peut facilement voir que l'approche (A) garantit la positivité des concentrations (si $Y_j^n \geq 0$ pour tout j , alors $Y_j^{n+1} \geq 0$) sous une condition de type CFL appropriée (voir [41]).

II.3.2 Un seconde approche : l'approche couplée

Dans cette seconde approche, on ne traite plus les équations d'Euler et les équations sur les espèces séparément : on considère maintenant le système (21) comme un système hyperbolique d'équations non linéaires couplées et on généralise à celui-ci les trois schémas de base, les schémas de Roe, de Osher et de van Leer. On appellera cette approche "l'approche couplée" ou encore "approche (B)".

Remarque 2 : Evidemment, puisqu'on peut calculer la solution exacte du système couplé (24), on aurait pu aussi définir un "schéma de Godunov couplé" : en appelant $\mathcal{W}(\sigma; W_L, W_R)$ la valeur de $W^R(\sigma t, t)$, qui est indépendante de t pour tout $\sigma \in \mathbb{R}$ et $t > 0$, on aurait simplement posé $\Phi(W_L, W_R) = \mathcal{W}(0; W_L, W_R)$. •

Le schéma de van Leer multi-espèces

Un extension naturelle de la décomposition de flux de van Leer au cas multi-espèces est proposé dans [43]. On pose simplement :

$$\Phi(W_L, W_R) = F_+(W_L) + F_-(W_R) ,$$

où $F_+(W) = F(W)$ quand $u \geq c$, $F_+(W) = 0$ quand $u \leq -c$, et :

$$F_+(W) = \begin{pmatrix} F_+^1 \\ F_+^2 \\ F_+^3 \\ F_+^4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\rho}{4c}(u+c)^2 \\ F_+^1 \left(u - \frac{u-2c}{\gamma} \right) \\ \frac{\gamma^2}{2(\gamma^2-1)} \frac{(F_+^2)^2}{F_+^1} \\ Y F_+^1 \end{pmatrix} , \quad (26)$$

quand $-c \leq u \leq c$.

On remarque que dans (26), les trois premières composantes de F_+ ont la même expression que dans le cas mono-espèce, mais avec une valeur locale (non constante) de γ .

Le résultat suivant, qui étend au cas multi-espèces le résultat obtenu par van Leer [66] dans le cas mono-espèce, montre la validité de cette décomposition de flux et la stabilité du schéma qu'on obtient : le schéma utilise des valeurs amont (resp. aval) pour F_+ (resp. F_-) parce que toutes les valeurs propres associées à F_+ (resp. F_-) sont positives (resp. négatives) (voir [43] pour la preuve).

Proposition 2 *Si le rapport des chaleurs spécifiques γ_k de chaque espèce du mélange satisfait l'inégalité $1 < \gamma_k < 3$, alors toutes les valeurs propres de la matrice Jacobienne $\frac{DF^+}{DW}$ (resp. $\frac{DF^-}{DW}$) sont réelles et positives (resp. négatives). •*

Le schéma de Roe multi-espèces

L'extension du solveur de Riemann de Roe [57] a été obtenu dans [1] et dans [25]. Le schéma de Roe multi-espèces repose sur les relations :

$$\Phi(W_L, W_R) = \frac{F(W_L) + F(W_R)}{2} + \frac{1}{2} |\tilde{A}| (W_L - W_R), \quad (27)$$

où la matrice $\tilde{A} = \tilde{A}(W_L, W_R)$ satisfait la propriété :

$$F(W_L) - F(W_R) = \tilde{A}(W_L - W_R). \quad (28)$$

Dans (27), nous avons utilisé une notation classique : si C est une matrice diagonalisable, la matrice $|C|$ est définie de la manière suivante : la diagonalisation de C est écrite comme $C = T\Lambda T^{-1}$ où Λ est la matrice diagonale $\Lambda = [\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n]$, et on pose $|C| = T|\Lambda|T^{-1}$, avec $|\Lambda| = [|\mu_1|, |\mu_2|, \dots, |\mu_n|]$.

Comme dans le cas mono-espèce, on peut définir une moyenne de Roe $\tilde{W} = (\tilde{\rho}, \tilde{\rho}\tilde{u}, \tilde{E}, \tilde{\rho}\tilde{Y})^T$ par :

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= \frac{\rho_L \sqrt{\rho_L} + \rho_R \sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad \tilde{u} = \frac{u_L \sqrt{\rho_L} + u_R \sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \\ \tilde{H} &= \frac{H_L \sqrt{\rho_L} + H_R \sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \\ \tilde{Y} &= \frac{Y_L \sqrt{\rho_L} + Y_R \sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \end{aligned} \quad (29)$$

(En fait, la valeur réelle de $\tilde{\rho}$ ne joue pas, comme on le voit sur l'expression (30) de la matrice \tilde{A} donnée plus bas). Cependant, à moins que les deux gaz formant le mélange aient le même

rapport de chaleurs spécifiques, la matrice jacobienne $A(\tilde{W})$ ne vérifie pas la propriété (28). En conséquence, la matrice \tilde{A} doit être différente de $A(\tilde{W})$ (mais suffisamment proche de cette dernière puisque nous voulons que cette généralisation se réduise au schéma de Roe usuel quand les deux espèces sont identiques). Le résultat, donné dans [1] et [25], est le suivant :

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{(\tilde{\gamma}-3)\tilde{u}^2 - \tilde{Y}\tilde{X}'}{2} & (3-\tilde{\gamma})\tilde{u} & \tilde{\gamma}-1 & \tilde{X}' \\ -\tilde{u}\tilde{H} + \frac{(\tilde{\gamma}-1)\tilde{u}^3 - \tilde{u}\tilde{Y}\tilde{X}'}{2} & \tilde{H} - (\tilde{\gamma}-1)\tilde{u}^2 & \tilde{\gamma}\tilde{u} & \tilde{u}\tilde{X}' \\ -\tilde{u}\tilde{Y} & \tilde{Y} & 0 & \tilde{u} \end{pmatrix}, \quad (30)$$

où $\tilde{\gamma} = \gamma(\tilde{W})$ mais où \tilde{X}' n'est pas égal à $X'(\tilde{W})$ donné par (23). De manière à avoir la propriété (28), on doit choisir :

$$\tilde{X}' = \frac{C_{v1}C_{v2}(\gamma_1 - \gamma_2)\tilde{T}}{\tilde{Y}C_{v1} + (1 - \tilde{Y})C_{v2}}, \quad (31)$$

avec :

$$\tilde{T} = \frac{T_L\sqrt{\rho_L} + T_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \neq T(\tilde{W}). \quad (32)$$

(comparer (31) avec (23)).

La matrice \tilde{A} définie par (30)-(32) est alors diagonalisable : ses valeurs propres sont $\tilde{u} - \tilde{c}$, \tilde{u} , \tilde{u} , $\tilde{u} + \tilde{c}$ où $\tilde{c}^2 = (\tilde{\gamma}-1) \left(\tilde{H} - \frac{\tilde{u}^2}{2} \right)$. Il est facile de voir que cette quantité est bien positive. La vérification de (28) est laissée au lecteur, les calculs peuvent aussi être trouvés dans [1].

Le schéma d'Osher multi-espèces

La généralisation du schéma d'Osher [52] au cas multi-espèces a été faite dans [3]. Le schéma obtenu est défini par les relations :

$$\Phi(W_L, W_R) = \frac{F(W_L) + F(W_R)}{2} - \frac{1}{2} \int_{W_L}^{W_R} |A(W)| dW, \quad (33)$$

où l'intégration est faite sur un chemin reliant W_L et W_R dans l'espace des phases. Il est formé de trois sous-chemins ; chacun d'entre eux est parallèle à l'un des vecteurs propres à droite de $A(W)$, notés $r_m(W)$. Aussi, l'évaluation de l'intégrale dans (33) repose sur la

connaissance des invariants de Riemann associés à chaque valeur propre. Rappelons que $\phi^{(m)} = \phi^{(m)}(W)$ est un m -invariant de Riemann si

$$\nabla_W \phi^{(m)}(W) \cdot r_m(W) = \sum_{l=1}^4 \frac{\partial \phi^{(m)}}{\partial W_l} \cdot (r_m)_l = 0,$$

ce qui implique que $\phi^{(m)}$ est constant le long d'une courbe $W(s)$ dans l'espace des phases qui est parallèle au $m^{\text{ième}}$ vecteur propre à droite de la matrice jacobienne A , c'est à dire le long de laquelle $\frac{dW}{ds}$ est colinéaire à $r_m(W(s))$. Il est facile de voir que les quantités suivantes sont des invariants de Riemann :

m	1	2	3	4
λ_m	$u - c$	u	u	$u + c$
$\phi^{(m)}$	$u + \frac{2c}{\gamma(W) - 1}$ $\frac{p}{\rho^{\gamma(W)}}$ Y	u p	u p	$u - \frac{2c}{\gamma(W) - 1}$ $\frac{p}{\rho^{\gamma(W)}}$ Y

Table 1: Invariants de Riemann.

Plusieurs commentaires sont nécessaires ici. Puisque Y est un invariant de Riemann pour les premier et dernier champs caractéristiques, Y est constant sur une courbe parallèle aux premier et dernier vecteurs propres. Ceci explique pourquoi les deux autres invariants de Riemann de ces champs de vecteurs sont les mêmes que pour le cas mono-espèce. De plus, il n'y a que deux invariants de Riemann associés à la valeur propre u parce que celle-ci est double.

Une fois que les invariants de Riemann sont connus, le problème de l'évaluation de l'intégrale dans (33) est essentiellement similaire au cas mono-espèce, puisque Y (et donc γ) est constant le long des sous chemins de Γ qui sont parallèles à r_1 ou r_4 . Nous renvoyons le lecteur à [3] pour plus de détails. On peut aussi définir deux schémas d'Osher différents suivant le choix du chemin d'intégration entre W_L et W_R : dans le schéma originellement proposé par Osher-Solomon [52], le chemin d'intégration entre W_L et W_R est parallèle par morceaux aux vecteurs propres à droite correspondant à $u + a$, u et $u - a$ pris dans cet ordre. On peut définir un autre schéma, souvent nommé "Osher physique" en définissant le chemin d'intégration comme précédemment mais en choisissant l'ordre inverse des valeurs propres (voir l'annexe A pour plus de détails).

II.3.3 Une troisième approche : le flux de Riemann approché

Une troisième approche (“approche (C)”) est proposée dans [41] ; elle est motivée par la remarque que les schémas de Roe et Osher rappelés plus haut ne préservent pas le principe du maximum pour les fractions massiques (c’est à dire que ces schémas ne préservent pas les inégalités $0 \leq Y \leq 1$). Au contraire, les schémas de van Leer et de Godunov couplés préservent cette propriété. On montre dans [41] que cette propriété du schéma de Godunov repose sur la propriété suivante de la solution exacte du problème de Riemann (on utilise à nouveau la notation \mathcal{W} de la remarque 2) :

Proposition 3 *Pour deux états quelconques W_L et W_R , on a l’égalité suivante :*

$$F^4[\mathcal{W}(0)] = F^1[\mathcal{W}(0)] \times \begin{cases} Y_L & \text{si } F^1[\mathcal{W}(0)] > 0, \\ Y_R & \text{si } F^1[\mathcal{W}(0)] < 0. \bullet \end{cases} \quad (34)$$

Aussi, pour les schémas d’Osher et de Roe, où l’évaluation du flux est obtenue par un solveur de Riemann approché, nous définissons l’approche (C) comme suit. Nous conservons les trois premières composantes de $\phi_{i+1/2}$ évalués comme dans l’approche (B), et nous calculons la quatrième composante $\phi_{i+1/2}^4$ du flux à partir de la relation suivante, calquée sur (34) :

$$\phi_{i+1/2}^4 = \phi_{i+1/2}^1 \times \begin{cases} Y_i^n & \text{si } \phi_{i+1/2}^1 > 0, \\ Y_{i+1}^n & \text{si } \phi_{i+1/2}^1 < 0. \end{cases} \quad (35)$$

Ainsi, la proposition 3 montre que le schéma de Godunov du type (B) est aussi du type (C). L’approche (C) définit un flux de Riemann approché pour le système multi-espèces complet et utilise les même flux discrets de masse pour l’équation de continuité et les équations sur les espèces. De plus, le principal avantage de cette approche est le suivant : il respecte le principe du maximum pour la fraction massique. Le résultat démontré dans [41] est le suivant :

Proposition 4 *Sous les conditions de type CFL suivantes*

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{\max(\phi_{i+1/2}^1, 0)}{\rho_i^n} - \frac{\min(\phi_{i+1/2}^1, 0)}{\rho_{i+1}^n} \right] \leq 1, \quad (36)$$

le schéma de type (C) respecte le principe du maximum pour la fraction massique Y : pour tout i et $n \geq 0$:

$$\min_j Y_j^0 \leq Y_i^n \leq \max_j Y_j^0. \bullet$$

Remarque 3 : Toutes les expériences numériques que nous avons faites en utilisant les schémas de Roe ou d’Osher de type (C) ont montré que la condition (36) n’est pas plus restrictive, en pratique, que la condition de CFL habituelle. •

Remarque 4 : On peut remarquer que les fonctions de flux numérique du schéma d’Osher (C) et du schéma de Roe (B) et (C) ne sont pas différentiables, tandis que les fonctions de flux numérique du schéma de van Leer et du schéma d’Osher (B) le sont. •

II.4 SCHEMAS DECENTRES DU SECOND ORDRE

Considérons maintenant les extensions au second ordre des schémas précédents. Partant des schémas du premier ordre que l'on a construit précédemment, la précision au second ordre est obtenue en utilisant des interpolations linéaires par morceaux de certaines variables au lieu d'approximations constantes par morceaux, et en évaluant les flux $\phi_{i+1/2}$ au demi pas de temps $n+1/2$. Nous suivons ici l'approche "MUSCL" de van Leer [73]. La méthode demande six étapes à chaque pas de temps, en démarrant de W_i^n :

(a) On évalue des pentes s_i^n pour toutes les variables qui sont choisies pour l'interpolation linéaire par morceaux. Plusieurs choix sont possibles : par exemple, on peut choisir ou bien les variables conservatives $\rho, \rho u, E, \rho Y$ ou bien les "variables physiques" ρ, u, p, Y ou encore les variables conservatives (voir [73]) pour varier linéairement dans chaque cellule de contrôle.

(b) Des limiteurs de pentes sont employés de manière à éviter la création de nouveaux extrema ; on peut de même utiliser plusieurs stratégies pour évaluer les pentes limitées (voir par exemple [21], [58], [65], [66]). Dans les expériences numériques dont les résultats sont présentés ci-dessous, on a utilisé le limiteur "superbee" de Roe [58].

(c) Les pentes limitées sont employées pour évaluer les valeurs $W_{i+1/2,\pm}^n$ aux interfaces des cellules de contrôle : pour chaque variable linéaire par morceau f , on pose :

$$f_{i+1/2,-}^n = f_i^n + \frac{\Delta x}{2} s_i^n, \quad f_{i-1/2,+}^n = f_i^n - \frac{\Delta x}{2} s_i^n.$$

(d) La solution est avancée d'un demi pas en temps en utilisant un prédicteur centré :

$$W_i^{n+1/2} = W_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[F(W_{i+1/2,-}) - F(W_{i-1/2,+}) \right].$$

(e) Ensuite, on utilise encore les mêmes pentes s_i^n pour évaluer les valeurs $W_{i+1/2,\pm}^{n+1/2}$ aux interfaces des cellules de contrôle au demi pas de temps (on pose $f_{i+1/2,-}^{n+1/2} = f_i^{n+1/2} + \frac{\Delta x}{2} s_i^n$).

(f) Enfin, le calcul de W_i^{n+1} s'effectue en utilisant une fonction de flux numérique Φ :

$$\frac{W_i^{n+1} - W_i^n}{\Delta t} + \frac{\phi_{i+1/2}^{n+1/2} - \phi_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} = 0,$$

où :

$$\phi_{i+1/2}^{n+1/2} = \Phi(W_{i+1/2,-}^{n+1/2}, W_{i+1/2,+}^{n+1/2}).$$

La construction (a)-(f) peut être appliquée à n'importe quelle fonction de flux numérique Φ , c'est à dire à n'importe lequel des schémas de type (A), (B) ou (C) présentés dans les parties précédentes.

Remarque 5 : On montre dans [41] que les schémas du second ordre de type (C) respectent le principe du maximum pour la fraction massique quand les pentes sur les variables *physiques* sont employées, plus précisément quand la fraction massique Y elle-même (et non ρY) fait partie des variables qui sont choisies pour l'interpolation linéaire dans chaque cellule de contrôle. •

II.5 RESULTATS NUMERIQUES ET COMPARAISONS

Nous présentons dans cette partie une comparaison détaillée des approches (A), (B) et (C). Pour cela, nous considérons principalement le problème classique du tube à choc de Sod [59] avec 2 espèces. En d'autres termes, nous voulons résoudre le problème de Riemann (24) avec:

$$\begin{cases} \rho_L = 1, & \rho_R = 0.125, \\ u_L = 0, & u_R = 0, \\ p_L = 1, & p_R = 0.1, \end{cases} \quad (37)$$

Les valeurs de Y_L , Y_R , γ_L et γ_R varieront d'une expérience à l'autre; elles seront donc précisées plus loin. Tous les résultats présentés ici montrent une solution numérique ainsi que la solution exacte correspondante au temps $t_0 = .21$. Ces résultats sont obtenus avec une grille de 101 points également espacés sur l'intervalle $(-0.5, 0.5)$, et 60 pas de temps constants (le nombre de CFL moyen est d'environ 0.75).

II.5.1 Résultats précis au premier ordre

Dans cette partie, nous étudions les solutions précises au premier ordre du problème du tube à choc pour différents types de γ .

Le tube à choc à γ constant

Nous considérons pour commencer, le problème de Riemann avec un γ constant de part et d'autre de la discontinuité: $\gamma_L = \gamma_R = 1.4$.

Nous représentons sur la Figure II.2 les courbes des fractions massiques obtenues avec le schéma non couplé de Roe (A). Les fractions massiques initiales sont $Y_L = 1$, $Y_R = 0$ dans le cas (a) et $Y_L = 0$, $Y_R = 1$ dans le cas (b). (Les deux courbes de $Y_1 = Y$ et $Y_2 = 1 - Y$ sont représentées sur la Figure).

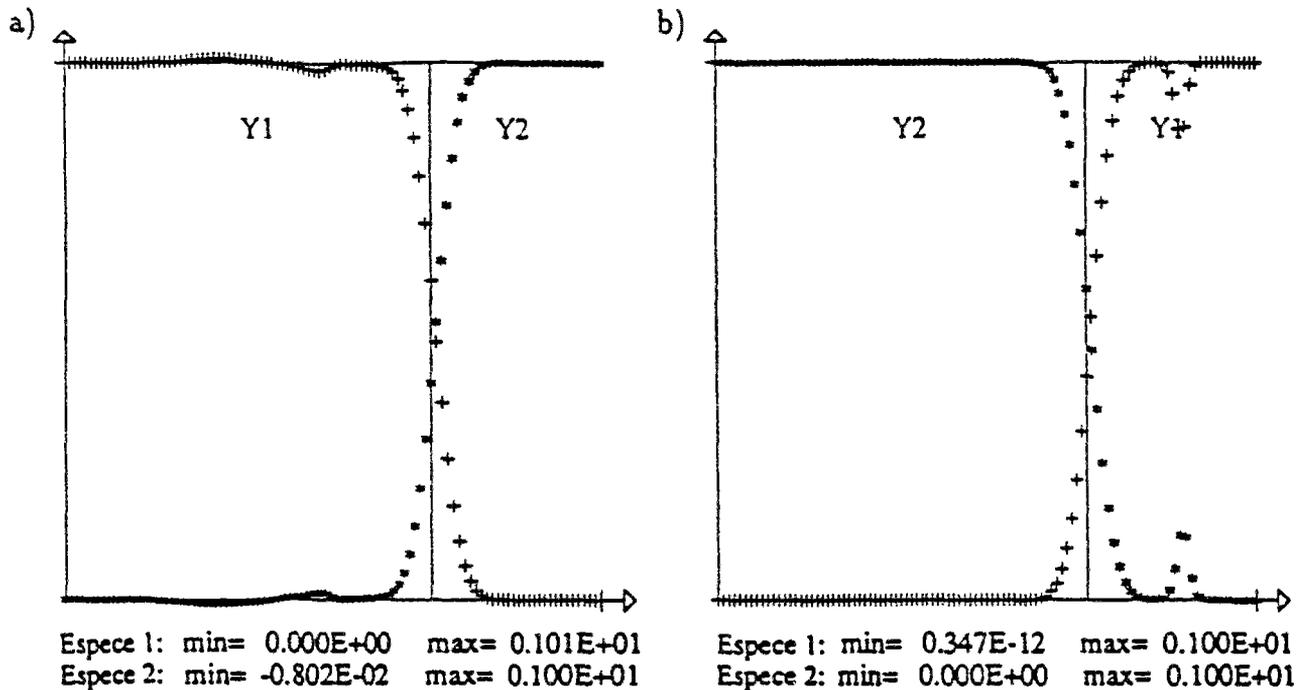


Figure II.2 : Fractions massiques pour le tube à choc de Sod à γ constant. Schéma de Roe du premier ordre (A) avec 2 conditions initiales distinctes.

On peut remarquer sur cette expérience que l'approche (A) donne de mauvais résultats bien que la positivité des fractions massiques Y soit préservée. La solution présente des oscillations (en particulier des valeurs non physiques de Y dépassant la valeur 1) dans la détente pour le cas (a) alors qu'un défaut est visible en avant du choc pour le cas (b). Par ailleurs, le fait que les cas (a) et (b) donnent par cette méthode des résultats différents est un artefact numérique; en effet cela veut dire que le fait d'indiquer par 1 ou 2 le gaz qui se trouve initialement dans la partie gauche du tube a une influence sur le résultat quand on utilise l'approche (A)!

Ce fait surprenant provient de la formulation conservative. En effet la fraction massique est obtenue comme fonction non-linéaire des variables de calcul: $Y = \frac{W_4}{W_1}$. C'est ce qui explique aussi pourquoi l'approche (A) donne de si mauvais résultats: la fraction massique est calculée comme le rapport de deux variables qui avancent en temps selon des approches distinctes, plus précisément par des décentrages différents: l'un basé sur la viscosité artificielle du schéma de Roe (pour W_1) et l'autre, sur la formulation "donor-cell" (25) pour W_4 .

En conclusion, nous estimons que l'approche (A) produit des résultats inacceptables et nous ne la considérerons plus par la suite.

Contrastant avec les résultats précédents, les approches (B) et (C) donnent de meilleures

courbes de fraction massique. Les résultats correspondants à ceux de la Figure II.2 (cas (a)) sont représentés maintenant sur la Figure II.3.

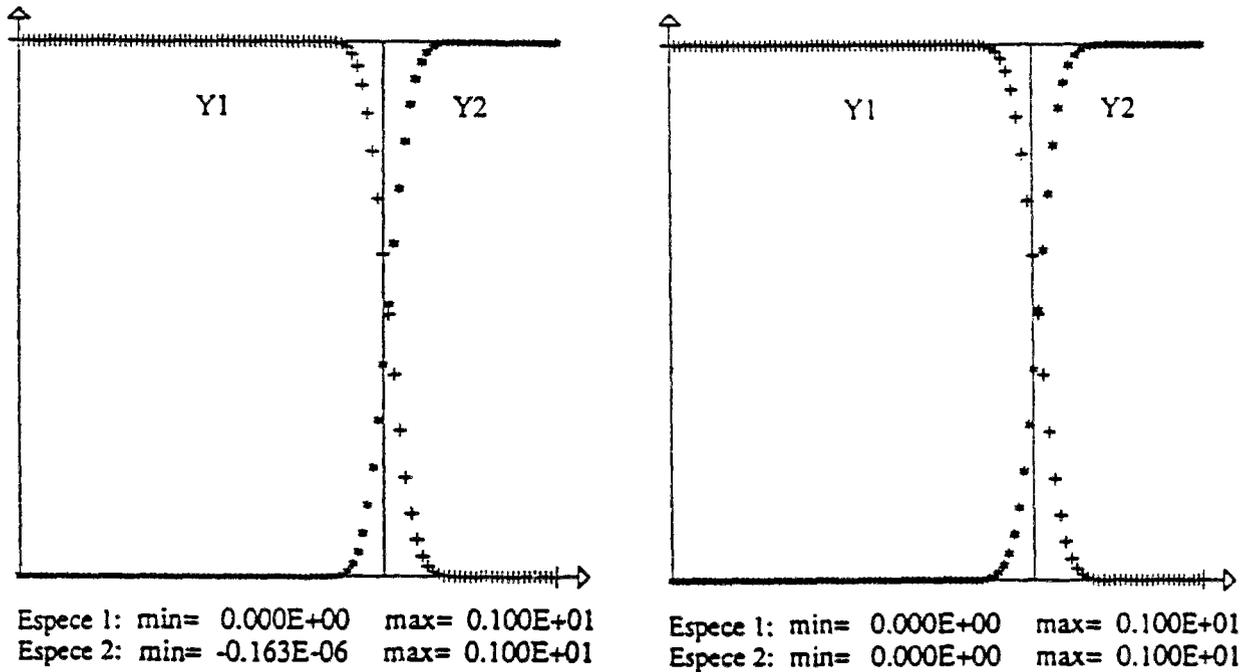


Figure II.3 : Fractions massiques pour le tube à choc de Sod à γ constant = 1.4 (Schéma de Roe du premier ordre, approche (B) et (C)).

Le schéma utilisé ici étant précis au premier ordre, la diffusion numérique a pour effet d'étaler la discontinuité de contact. On peut remarquer aussi que conformément à la proposition 4, les valeurs Y restent toutes dans l'intervalle $[0, 1]$ avec l'approche (C) alors que certaines de ces valeurs sortent de l'intervalle lorsqu'on utilise l'approche (B). Néanmoins tous les résultats de la Figure II.3 sont acceptables.

Un autre progrès en comparaison de l'approche (A) est le suivant: si on considère le problème avec les conditions initiales du cas (b) (ie, si on interchange les parties gauche et droite du gaz dans le tube), on obtient les mêmes fractions massiques que sur la Figure II.3: le fait que ces résultats restent inchangés peut être prouvé dans ce cas particulier (γ constant), en utilisant les relations (39)-(40), (42)-(43) et (44)-(45) de l'annexe A.

Nous ne montrons pas ici les résultats obtenus pour les variables hydrodynamiques ρ, u, v, p . En effet, γ étant constant, la fraction massique Y n'a aucune influence sur l'écoulement et les trois approches (A), (B) et (C) donnent pour ces variables les mêmes résultats que dans le cas d'un gaz mono-espece.

Le tube à choc avec γ variable

On résoud maintenant le tube à choc de Sod avec un γ non constant: on prend $\gamma_L = 1.4, \gamma_R = 1.2$, et $Y_L = 1, Y_R = 0$.

On a représenté sur les Figures II.4 à II.6 les résultats obtenus avec le schéma de Van Leer (B) et avec les extensions (B) et (C) du schéma de Roe. Le schéma d'Osher-Solomon et celui de Osher "physique" donnent, dans l'approche (B) ou (C), des résultats très proches de ceux du schéma de Roe correspondant.

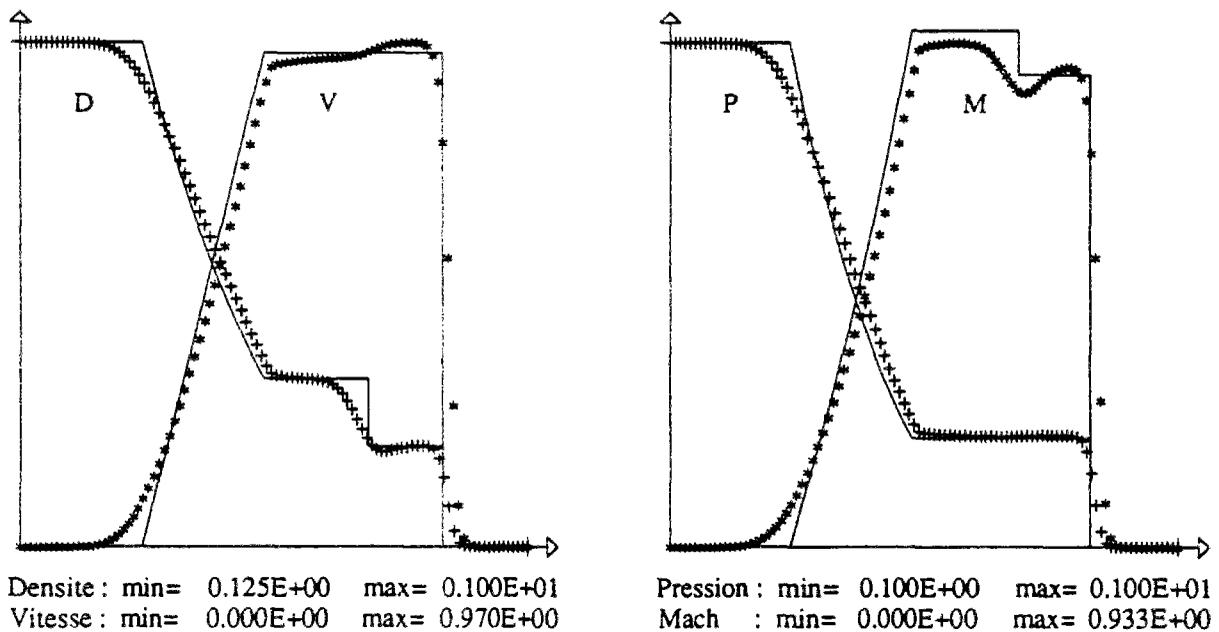


Figure II.4 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod avec γ variable (Schéma de Van Leer du premier ordre (B)).

Une différence intéressante entre ces résultats et ceux obtenus à γ constant est l'apparition d'un saut de la vitesse dans la discontinuité de contact. Ce phénomène est clairement lié au fait que γ n'est plus constant dans ces expériences; ce point est analysé dans l'annexe B.

On observe cependant sur les Figures II.4 à II.6 des différences dans les résultats obtenus avec les divers schémas utilisés. Mais la remarque principale que l'on peut faire est que les schémas complètement couplés (B) et (C) donnent des résultats sensiblement équivalents, à l'exception de la fraction massique Y pour laquelle les valeurs calculées par l'approche (C) sont toutes dans l'intervalle $[0, 1]$ alors que le minimum de Y est de l'ordre -10^{-6} avec les schémas de Roe et de Osher dans la formulation (B) (les calculs sont effectués en double-précision). Les courbes de fractions massiques sont quasiment identiques à celles de la Figure II.3 et ne sont donc pas représentées ici.

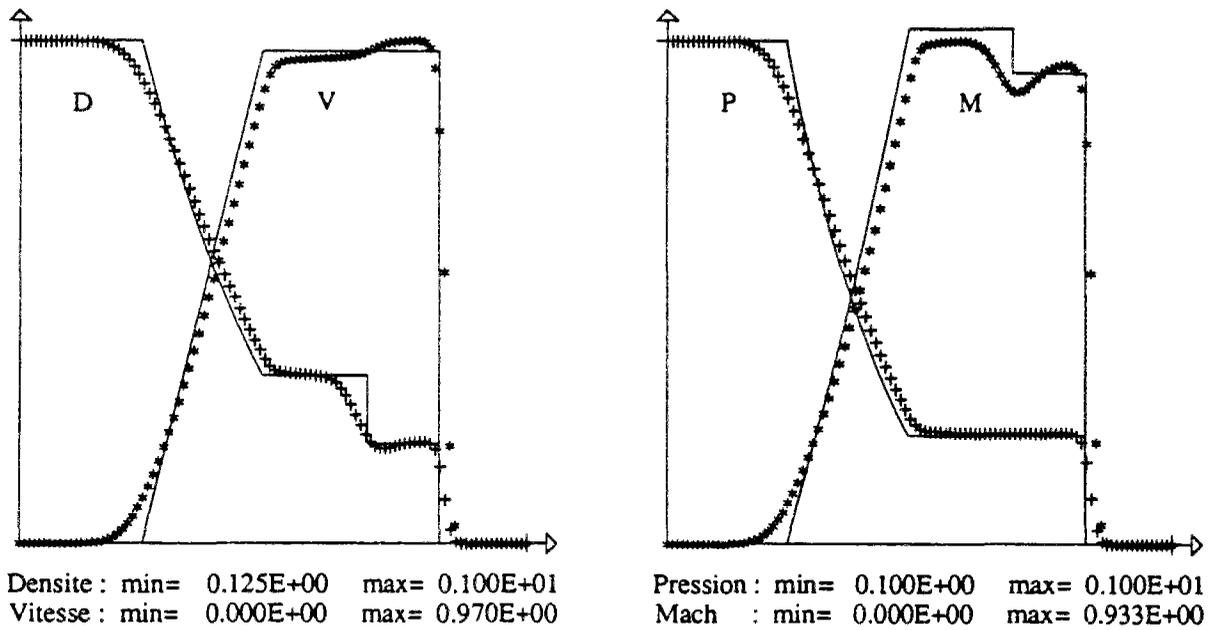


Figure II.5 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod avec γ variable (Schéma de Roe du premier ordre (B)).

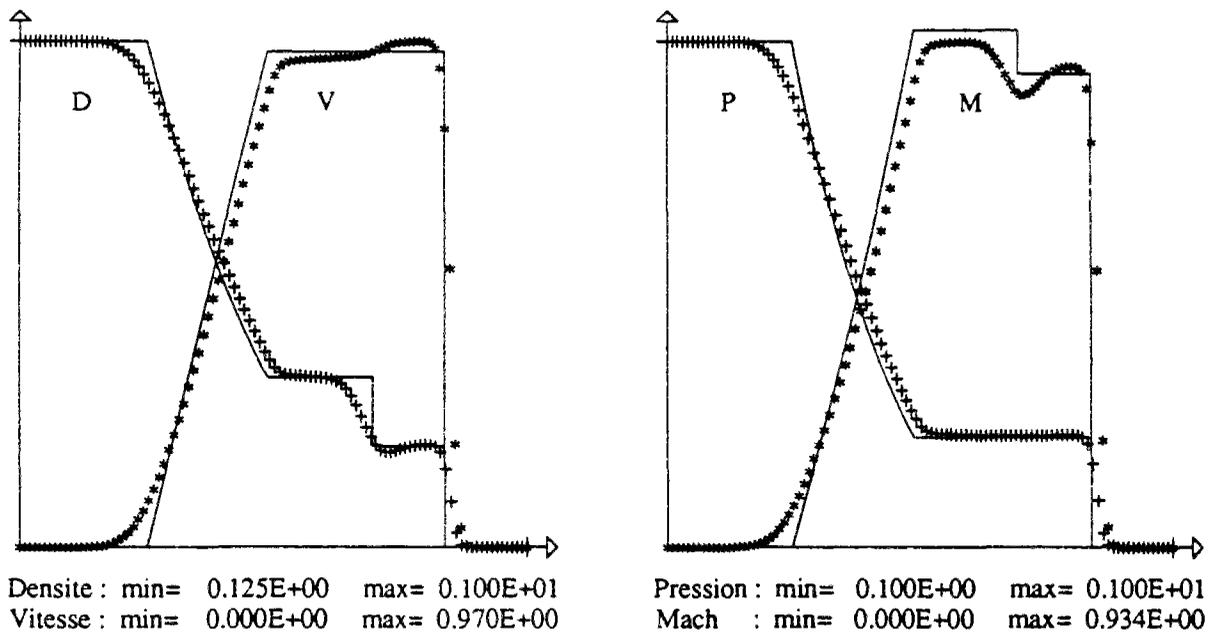


Figure II.6 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod avec γ variable (Schéma de Roe du premier ordre (C)).

Nous pouvons aussi comparer les approches (B) et (C) en termes de coût en temps de calcul. A travers ces expériences, les schémas précis au premier ordre utilisés ici (Roe, Osher-Solomon, Osher "physique") sont environ 8% moins chers dans la formulation (C) que dans la formulation (B). On peut légitimement penser que cette efficacité de l'approche (C) par rapport à l'approche (B) ne peut qu'augmenter avec le nombre d'espèces présentes dans le gaz étudié.

Le tube à choc avec γ figé

Comme cela a été proposé dans une version préliminaire de [41], on peut considérer une approche (C) simplifiée où les trois premières composantes du flux $\phi_{i+1/2}$ sont calculées comme dans l'approche (A) avec un γ figé et la quatrième composante $\phi_{i+1/2}^4$ est calculée à partir de (35). Cette approche intermédiaire aura ainsi la simplicité de programmation de l'approche (A) tout en utilisant la propriété (35) qui assure en particulier que le principe du maximum est vérifié pour les fractions massiques. Les résultats obtenus avec cette nouvelle approche en utilisant le schéma de Roe sont représentés sur la Figure II.7. On voit clairement que ces résultats sont bien médiocres en comparaison de ceux obtenus avec le même schéma en utilisant l'approche (C) complète (Figure II.6), et ce en particulier au voisinage de la discontinuité de contact. Le gain en temps CPU est encore de 8%. Il est intéressant de remarquer que cette différence entre l'approche (C) complète et l'approche (C) avec un γ figé s'estompe quelque peu lorsqu'on remplace le tube à choc de Sod par le problème de Riemann (plus raide) suivant:

$$\begin{cases} \rho_L = 1 & , & \rho_R = 0.125 & , \\ u_L = 0 & , & u_R = 0 & , \\ p_L = 1000 & , & p_R = 1 & , \\ Y_L = 1 & , & Y_R = 0 & , \\ \gamma_L = 1.6 & , & \gamma_R = 1.4 & . \end{cases} \quad (38)$$

Il apparaît sur la Figure II.8 que les résultats obtenus avec l'approche (C) avec γ figé sont plus acceptables pour ce tube à choc. On peut trouver une explication de ce fait dans l'expression (30) de la matrice de Roe \tilde{A} . En effet figer γ revient essentiellement à négliger X dans le premier terme de la deuxième et la troisième lignes de \tilde{A} : par conséquent plus le rapport $\frac{X}{u^2}$ est grand et plus l'erreur numérique due au "gel" de γ est grande. Mais une évaluation grossière de ce rapport montre qu'on a $\frac{X}{u^2} \simeq 3$ pour le tube à choc de Sod alors qu'on a $\frac{X}{u^2} \simeq 10^{-3}$ pour le deuxième tube à choc.

Néanmoins nous ne considérerons plus par la suite cette approche simplifiée (γ figé), l'approche (C) complète donnant indubitablement de meilleurs résultats.

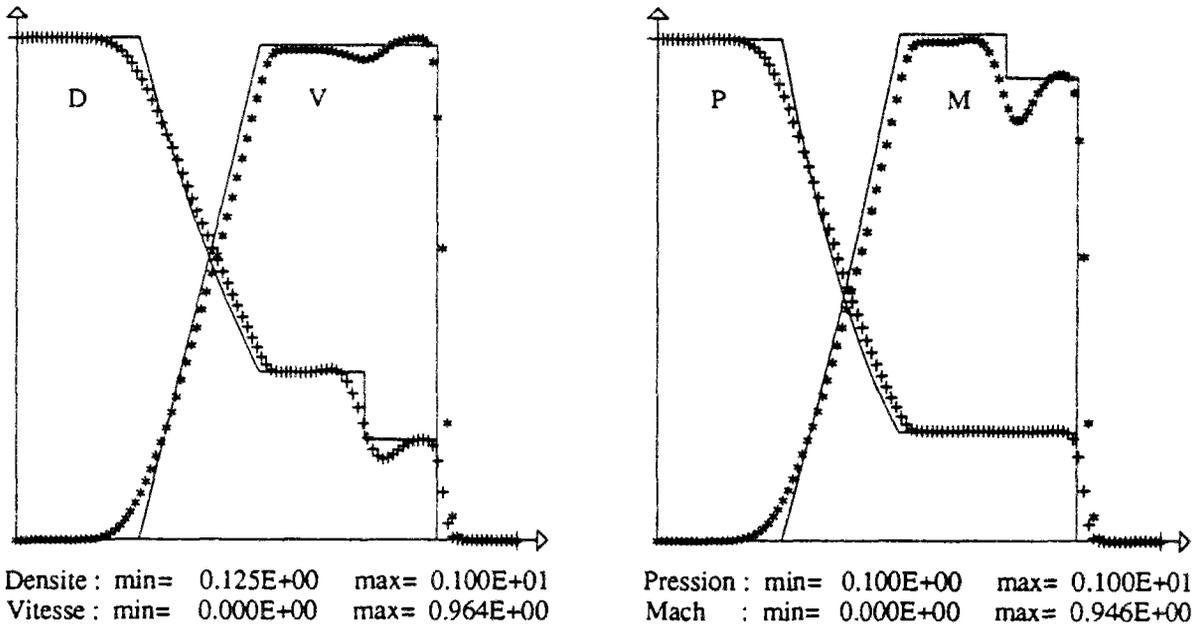


Figure II.7 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod avec γ variable (Schéma de Roe du premier ordre (C) avec γ figé).

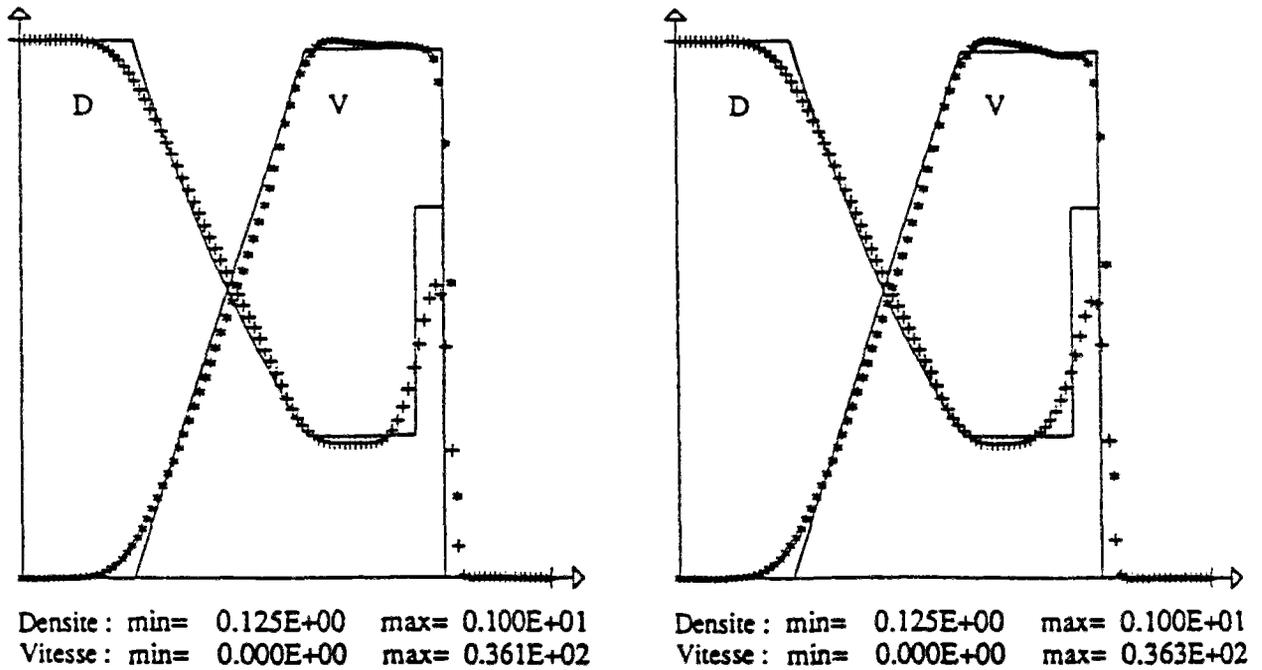


Figure II.8 : Courbes de densité et vitesse pour le tube à choc raide (38) avec γ variable (Schéma de Roe du premier ordre (B) et (C) avec γ figé).

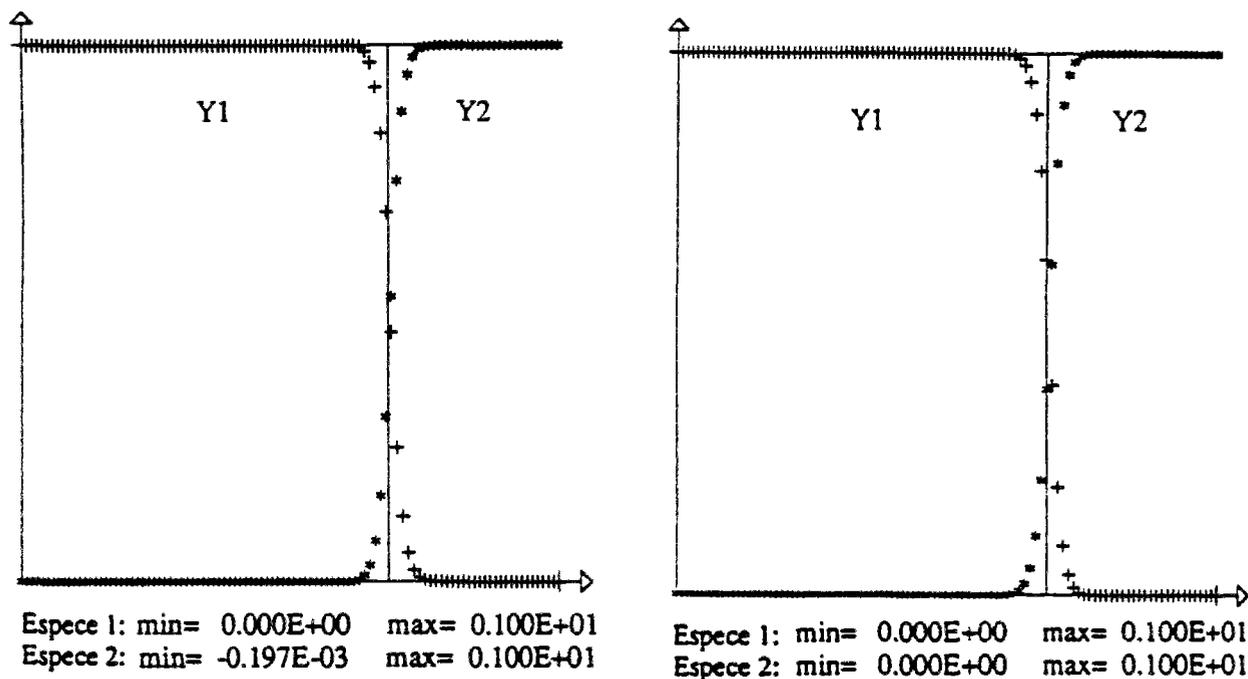


Figure II.9 : Courbes de fractions massiques pour le tube à choc de Sod à γ constant = 1.4 (Schémas de Roe du second-ordre (B) et (C), limiteurs sur les variables physiques).

II.5.2 Résultats précis au second ordre

Le tube à choc avec γ constant

On considère maintenant les solutions précises au second ordre du tube à choc de Sod (37) avec la donnée initiale: $Y_L = 1$, $Y_R = 0$ et $\gamma_L = \gamma_R = 1.4$.

On présente sur la Figure II.9 les courbes des fractions massiques obtenues avec les schémas précis au second ordre de Roe (B) et (C). On peut constater sur ce résultat comme pour tous les résultats précis au second ordre, que l'étalement de la discontinuité de contact due à la viscosité numérique a été réduit d'un facteur 2 en comparaison avec les résultats du premier ordre de la Figure II.3 (bien entendu, les pas de temps et d'espace sont les mêmes dans les deux cas).

Aucune différence sensible n'apparaît entre ces différentes courbes de fraction massique (ainsi d'ailleurs que sur toutes les autres courbes obtenues par les schémas du second-ordre considérés ici). On peut remarquer cependant que les valeurs de Y obtenues avec les schémas de Roe et de Osher de type (B) sont dans l'intervalle $[-10^{-3}, 1]$ et ce, quelques soient les variables choisies dans la limitation: physiques, conservatives ou caractéristiques. Le schéma de Van Leer ainsi que les schémas (C), avec une limitation sur les variables physiques, vérifient quant à eux le principe du maximum pour les fractions massiques (comme le prédit la remarque 5).

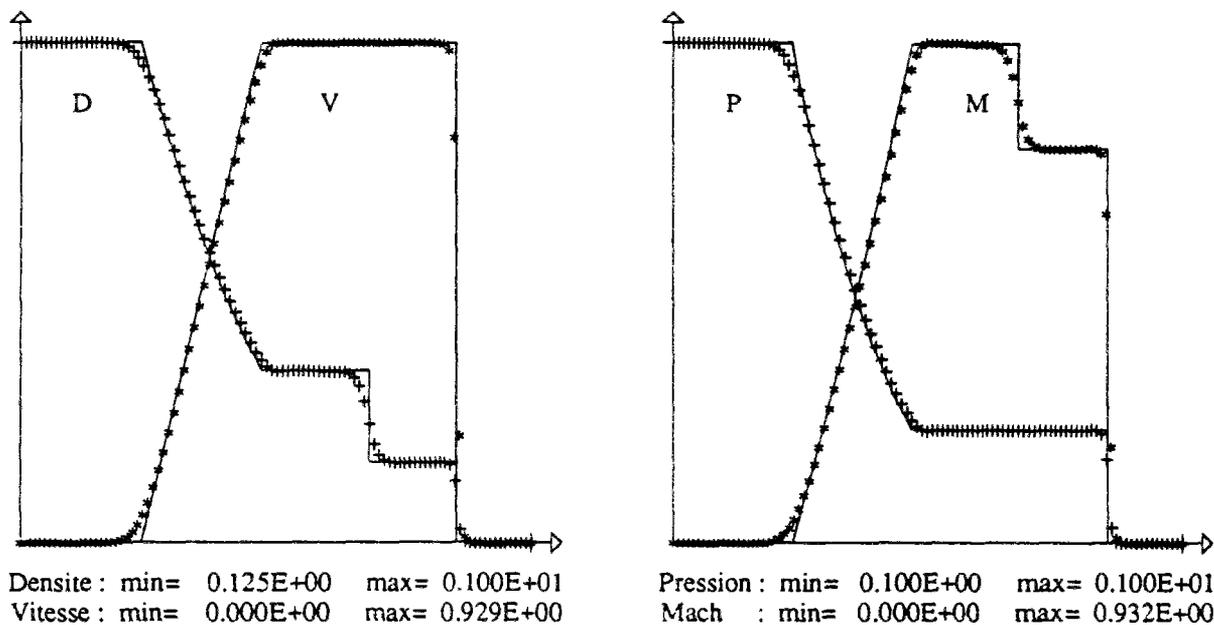


Figure II.10 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod à γ constant = 1.4 (Schéma de Roe du second-ordre, limiteurs sur les variables physiques).

Le rapport γ étant constant, les résultats obtenus pour les variables hydrodynamiques ρ, u, p coïncident là aussi avec les résultats du cas du gaz mono-espèce, qui sont déjà publiés (voir Figure II.10 pour les résultats avec le schéma de Roe et se référer par exemple à [14] pour les résultats obtenus avec les autres schémas).

Le tube à choc de Sod avec γ variable

Nous avons fait plusieurs comparaisons entre les différents schémas du second-ordre dans le cas où γ est variable (en prenant encore $\gamma_L = 1.4, \gamma_R = 1.2$). Nous présentons sur les Figures II.11 et II.12 les schémas de Roe du second-ordre de type (B) et (C) avec une limitation sur les variables physiques. En comparant ces résultats avec ceux de la Figure II.10, on peut remarquer qu'un léger saut de la vitesse réapparaît sur la discontinuité de contact et qu'une oscillation sur la densité est visible à droite de cette discontinuité de contact. On pourra se référer à l'annexe B pour une discussion sur ce point.

Nous n'avons pas montré les courbes des fractions massiques qui sont quasiment identiques à celles de la Figure II.9. Là encore on obtient un minimum de Y de l'ordre de -10^{-3} avec l'approche (B) alors que l'approche (C) respecte le principe du maximum quand la limitation s'opère sur les variables physiques.

Une conclusion importante reste que les approches (B) et (C) donnent des résultats comparables et que cette dernière est légèrement moins coûteuse que l'approche (B).

Toutes les précédentes observations et conclusions demeurent lorsqu'on considère le tube à choc raide (38) pour comparer les différents schémas. On pourra se référer à [14] pour des comparaisons plus détaillées.

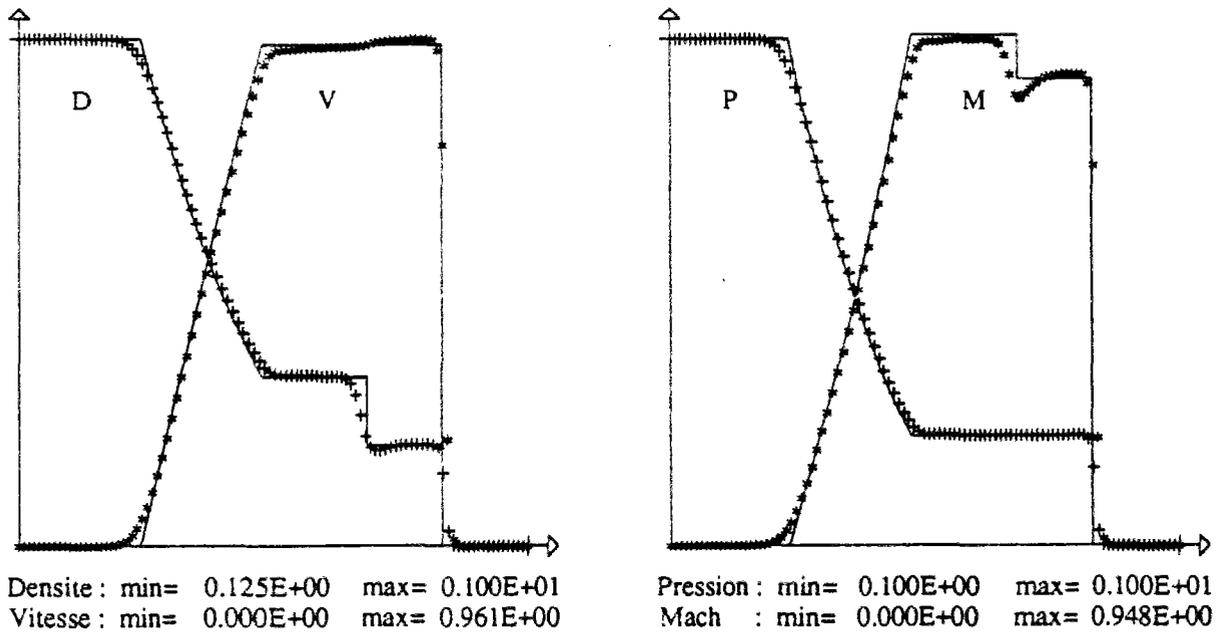


Figure II.11 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod avec γ variable (Schéma de Roe du second-ordre (B), limiteurs sur les variables physiques).

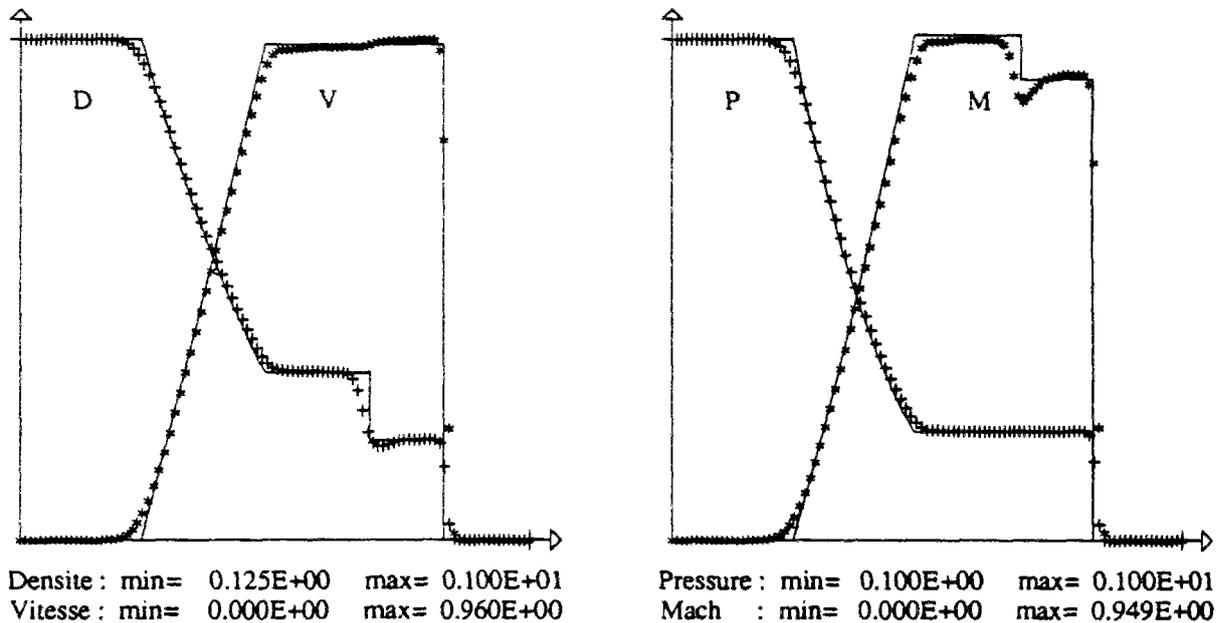


Figure II.12 : Courbes de densité, vitesse, pression et nombre de Mach pour le tube à choc de Sod avec γ variable (Schéma de Roe du second-ordre (C), limiteurs sur les variables physiques)

II.6 CONCLUSIONS

Dans cette étude, nous avons considéré trois approches adaptées au calcul d'écoulements fluides formés de mélanges de gaz : une approche découplée (A) où les équations d'Euler pour le mélange sont résolues au moyen d'un schéma décentré classique utilisant un " γ équivalent" et où les équations portant sur les fractions massiques sont approchées au moyen d'un schéma "donor-cell" ; une approche couplée (B) qui utilise une généralisation des schémas classiques construits pour des gaz mono-espèce non visqueux au système complet des équations d'Euler multi-espèces, et une approche couplée modifiée (C) qui repose sur l'approche (B) mais dans laquelle les équations sur les fractions massiques sont résolues au moyen d'une technique qui utilise l'information contenue dans l'équation de continuité. Chacun de ces schémas peut être facilement étendu au cas d'écoulements multidimensionnels (voir par exemple [41],[42]).

Les principales conclusions des comparaisons que l'on a présentées ici sont les suivantes. Il est clair que les schémas (A) qui découplent partiellement les équations d'Euler classiques et les équations portant sur les espèces en utilisant un " γ figé équivalent" donne des résultats inacceptables. Quand γ est constant, toutes les approches donnent les mêmes résultats pour les variables hydrodynamiques, tandis que les résultats donnés par chacune des approches quand γ varie effectivement ne sont pas aussi bons dans le cas où γ est constant. De plus, ces comparaisons montrent aussi que la modification des solveurs de Roe et d'Osher de type (B)

proposés dans l'approche (C) améliore la qualité des résultats numériques obtenus sur les fractions massiques (les schémas (C) respectent exactement le principe du maximum pour les fractions massiques comme prévu par la proposition 4 et la remarque 5) sans altérer les résultats obtenus pour les variables hydrodynamiques.

Cet avantage des schémas (C) sur les schémas multi-espèces de Roe ou d'Osher de type (B) peut se révéler utile dans de nombreuses applications, notamment pour le calcul d'écoulements réactifs. En particulier, bien que nous ayons obtenu numériquement avec les schémas (B) des fractions massiques Y qui débordent très peu de l'intervalle $[0, 1]$ (de 10^{-3} par excès ou par défaut), ceci ne devrait pas faire oublier la capacité de ces schémas à produire des valeurs non physiques qui peuvent être vraiment inacceptables dans certains cas. Cependant, il faut noter que les flux donnés par les schémas (C) ne sont pas différentiables, ce qui peut avoir une influence non évaluée ici sur le comportement des calculs utilisant une formulation implicite de ces schémas.

Plus généralement, nous avons observé que les extensions que nous avons considérées ici des schémas de Roe, Osher et van Leer au cas multi-espèces se comportent comme les schémas de Roe, Osher et van Leer mono-espèce dans le problème du tube à choc sauf à la discontinuité de contact où des difficultés numériques supplémentaires apparaissent si le rapport des chaleurs spécifiques varie fortement à travers la discontinuité.

La dernière conclusion de ce travail est que la meilleure stratégie pour étendre au second ordre, avec la technique MUSCL, les schémas étudiés ici est d'appliquer les techniques de limiteurs de pente aux "variables physiques". Ceci est certainement vrai quand l'approche (C) est utilisée, comme le suggère la remarque 5, et semble aussi exact pour l'approche (B).

II.7 ANNEXE A

Dans cette annexe, on montre que les schémas (B) utilisant les flux de Roe et d'Osher peuvent ne pas préserver le principe du maximum pour les fractions massiques.

Commençons tout d'abord par le schéma de "Osher physique". Les états W_L et W_R étant donnés, il est nécessaire d'introduire quelques notations de façon à détailler l'équation (33). Le chemin Γ reliant W_L à W_R est décomposable en trois parties (on note $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_4$), qui sont définies par les propriétés suivantes: $\frac{dW}{ds}$ est parallèle au premier vecteur propre $r_1(W(s))$ sur Γ_1 , $\frac{dW}{ds}$ est parallèle au quatrième vecteur propre $r_4(W(s))$ sur Γ_4 , et $\frac{dW}{ds}$ appartient à l'espace propre associé à la valeur propre u sur Γ_2 . On note $W_{1/3}$ et $W_{2/3}$ les points extrêmes de Γ_2 . De plus, puisque le premier champ caractéristique est vraiment non linéaire (voir [3], [43]), il existe au plus un point pour lequel λ_1 s'annule sur Γ_1 ; ce point, appelé point sonique, est noté $W_{1/3}^s$. De la même façon, il existe au plus un point $W_{2/3}^s$ pour lequel λ_4 s'annule sur Γ_4 . Enfin, u est constant le long de Γ_2 puisque cette valeur propre

est associée à un champ caractéristique linéairement dégénéré: on note $u \equiv u^*$ sur Γ_2 (voir Figure II.13).

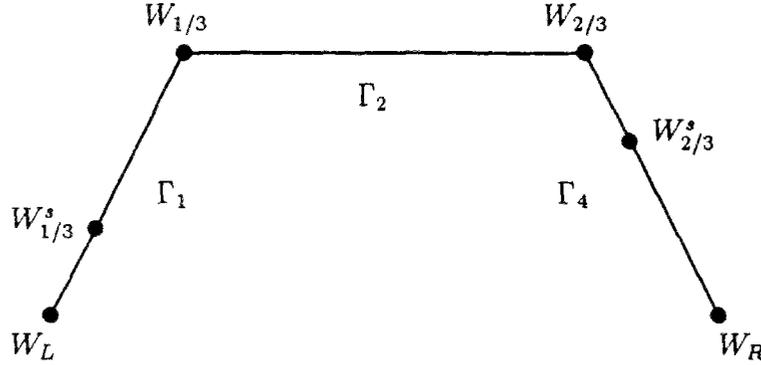


Figure II.13 : Chemin reliant W_L à W_R pour le schéma de Osher physique.

Avec ces différentes notations, l'intégrale qui apparaît dans (33) se détermine facilement. Par exemple, on a:

$$\begin{aligned} \int_{W_L}^{W_{1/3}^s} |A(W)| dW &= \int_{W_L}^{W_{1/3}^s} \text{sign}(\lambda_1(W)) A(W) dW \\ &= \text{sign}(\lambda_1(W_L)) [F(W_{1/3}^s) - F(W_L)] , \end{aligned}$$

puisque $\text{sign}(\lambda_1(W))$ est constant sur la partie de Γ_1 considérée. Alors, (33) peut se réécrire:

$$\begin{aligned} \Phi(W_L, W_R) &= \frac{F(W_L) + F(W_R)}{2} - \frac{\text{sign}(u^*)}{2} [F(W_{2/3}) - F(W_{1/3})] \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} |A(W)| dW - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_4} |A(W)| dW . \end{aligned}$$

Puisque nous savons que la fraction massique Y est constante le long de Γ_1 et de Γ_4 , on peut écrire la première et la quatrième composante du flux numérique sous la forme:

$$\Phi^1(W_L, W_R) = \Phi_+^1(W_L, W_R) + \Phi_-^1(W_L, W_R) , \quad (39)$$

$$\Phi^4(W_L, W_R) = Y_L \Phi_+^1(W_L, W_R) + Y_R \Phi_-^1(W_L, W_R) , \quad (40)$$

où:

$$\Phi_+^1(W_L, W_R) = \frac{F^1(W_L)}{2} - \frac{1}{2} \left(\int_{\Gamma_1} |A(W)| dW \right)^1 + \frac{\text{sign}(u^*)}{2} F^1(W_{1/3}) ,$$

$$\Phi_-^1(W_L, W_R) = \frac{F^1(W_R)}{2} - \frac{1}{2} \left(\int_{\Gamma_4} |A(W)| dW \right)^1 - \frac{\text{sign}(u^*)}{2} F^1(W_{2/3}) .$$

Par conséquent, de (39) et (40), on constate que le schéma "Osher physique" de type (B) utilise les mêmes flux discrets pour l'équation de continuité et pour l'équation d'espèce (comme les schémas (C)). Il est prouvé dans [41] qu'une condition nécessaire et suffisante pour préserver le principe du maximum pour les fractions massiques est alors:

$$\Phi_+^1(W_L, W_R) \geq 0, \quad \Phi_-^1(W_L, W_R) \leq 0. \quad (41)$$

On peut remarquer ici que, pour le schéma multi-espèces de Van Leer, on a les relations:

$$\Phi^1(W_L, W_R) = F_+^1(W_L) + F_-^1(W_R), \quad (42)$$

$$\Phi^4(W_L, W_R) = Y_L F_+^1(W_L) + Y_R F_-^1(W_R), \quad (43)$$

lesquelles sont très proches des relations (39)-(40). De plus, il est aisé de montrer que $F_+^1(W) \geq 0$ et $F_-^1(W) \leq 0$ pour tout W . D'après la relation (41), ceci est la raison pour laquelle le schéma multi-espèces de Van Leer préserve le principe du maximum pour les fractions massiques.

Malheureusement, (41) n'est pas toujours vérifiée pour le schéma de "Osher physique". Les tableaux A.1 and A.2 ci-dessous, dans lesquels nous distinguons 16 cas différents, en suivant Spekreijse [60], indiquent les cas pour lesquels la relation (41) est vérifiée ou non:

	$u_L < c_L, u_R > -c_R$	$u_L > c_L, u_R > -c_R$
$c_{1/3} < u^*$	Oui(1)	Oui(5)
$0 < u^* < c_{1/3}$	Oui(2)	Non (6)
$-c_{2/3} < u^* < 0$	Oui(3)	Non (7)
$u^* < -c_{2/3}$	Oui(4)	Non (8)

Table A.1: Principe du maximum pour la fraction massique en utilisant le schéma de "Osher physique".

	$u_L < c_L, u_R < -c_R$	$u_L > c_L, u_R < -c_R$
$c_{1/3} < u^*$	Oui(9)	Oui(13)
$0 < u^* < c_{1/3}$	Oui(10)	Non (14)
$-c_{2/3} < u^* < 0$	Oui(11)	Non (15)
$u^* < -c_{2/3}$	Oui(12)	Non (16)

Table A.2: Principe du maximum pour la fraction massique en utilisant le schéma de "Osher physique".

Les calculs sont laissés au lecteur. L'idée est d'évaluer si la quantité de mouvement m augmente ou non dans une détente. Remarquons que le cas (6) est hybride : le respect ou

non de la positivité des fractions massiques dépend du signe de $m_L + m_{1/3} - m^s$ (où m^s désigne la quantité de mouvement au point sonique) qui n'est pas uniforme dans tous les cas: il est possible que les fractions massiques gardent le bon signe. Dans tous les autres cas où la réponse est négative, ce principe est généralement violé.

On peut illustrer ces résultats en considérant le problème du tube à choc défini par les conditions initiales suivantes:

$$\begin{cases} \rho_L = 1, & \rho_R = (1.4)^5, \\ u_L = 2, & u_R = 0, \\ p_L = (1.4)^{-1}, & p_R = (1.4)^6, \\ Y_L = 1, & Y_R = 0, \\ \gamma_L = 1.4, & \gamma_R = 1.4. \end{cases}$$

Ce problème particulier correspondant aux cas (6) et (7), est celui qui a le plus de chance de se produire parmi tout les cas où la relation (41) n'est pas vérifiée (voir Spekreijse [24]). Il est choisi tel que $W_{1/3} = W_{2/3} = W_R$.

Soit i tel que $W_j^0 = W_L$ pour tout $j < i$ et $W_j^0 = W_R$ pour $j \geq i$. Un calcul direct montre qu'après un pas de temps, on a:

$$\begin{aligned} (\rho Y)_i^1 &= \frac{\Delta t}{\Delta x} [(\rho u)_L - (\rho u)_{1/3}^s], \\ (\rho)_i^1 &= \rho_R + \frac{\Delta t}{\Delta x} [(\rho u)_L - (\rho u)_{1/3}^s]. \end{aligned}$$

Puisque $[(\rho u)_L - (\rho u)_{1/3}^s] \approx -0.52$, on a $Y_{j_0}^1 < 0$, et le principe du maximum n'est pas préservé. Un calcul analogue conduit aux mêmes conclusions pour le schéma de "Osher-Solomon".

Considérons maintenant le schéma multi-espèces de Roe. Il est facile de voir que le schéma multi-espèces de Roe de type (B) peut s'écrire sous la forme (39)-(40) (là encore, ce schéma utilise les mêmes flux discrets pour l'équation de continuité et pour l'équation d'espèce). On a ici:

$$\begin{aligned} \Phi_+^1(W_L, W_R) &= \rho_L(u_L + |\tilde{u}|) - |\tilde{u}| \frac{\sqrt{\rho_L}}{2(\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R})} \frac{\Delta p}{\tilde{c}^2} \\ &+ \frac{\sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \left(|\tilde{u} - \tilde{c}| \left\{ \frac{\Delta p}{\tilde{c}^2} - \frac{\bar{\rho} \Delta u}{\tilde{c}} \right\} + |\tilde{u} + \tilde{c}| \left\{ \frac{\Delta p}{\tilde{c}^2} + \frac{\bar{\rho} \Delta u}{\tilde{c}} \right\} \right), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \Phi_-^1(W_L, W_R) &= \rho_R(u_R - |\tilde{u}|) + |\tilde{u}| \frac{\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \frac{\Delta p}{\tilde{c}^2} \\ &- \frac{\sqrt{\rho_R}}{2(\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R})} \left(|\tilde{u} - \tilde{c}| \left\{ \frac{\Delta p}{\tilde{c}^2} - \frac{\bar{\rho} \Delta u}{\tilde{c}} \right\} + |\tilde{u} + \tilde{c}| \left\{ \frac{\Delta p}{\tilde{c}^2} + \frac{\bar{\rho} \Delta u}{\tilde{c}} \right\} \right), \end{aligned} \quad (45)$$

avec $\bar{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R}$, $\Delta u = u_L - u_R$, $\Delta p = p_L - p_R$.

Pour montrer que le schéma (B) multi-espèces de Roe ne préserve pas toujours le principe du maximum pour les fractions massiques, on exhibe simplement un exemple pour lequel les inégalités (41) ne sont pas vérifiées. On considère le problème du tube à choc défini par les conditions suivantes:

$$\begin{cases} \rho_L = 1, & \rho_R = 1, \\ u_L = -1, & u_R = 1, \\ H_L = 1, & H_R = 5, \\ Y_L = 1, & Y_R = 0, \\ \gamma_L = 1.4, & \gamma_R = 1.4. \end{cases}$$

Ces valeurs ont été choisies de façon à obtenir pour la matrice \tilde{A} des valeurs propres positives, ce qui permet de simplifier l'expression des flux puisqu'alors (27)-(28) donne simplement $\Phi(W_L, W_R) = F(W_L)$. On obtient pour cet exemple $\Phi_+^1(W_L, W_R) = -1$, $\Phi_-^1(W_L, W_R) = 0$, et donc la relation (41) n'est pas vérifiée.

II.8 ANNEXE B

Dans cette annexe, on discute des problèmes spécifiques qui apparaissent lorsque γ n'est pas constant. On montre que tous les schémas décentrés considérés précédemment ont des difficultés pour traiter ces problèmes.

Comme nous l'avons dit précédemment, les légères oscillations qui apparaissent au niveau de la discontinuité de contact pour les écoulements multi-espèces lorsque γ n'est pas constant sont intrinsèquement dues à la présence des différentes espèces. En suivant les travaux présentés dans [1] et [43], on analyse l'origine de cette difficulté en considérant le problème de Riemann (24) dans un cas où les deux états W_L et W_R sont supersoniques et peuvent être séparés par une discontinuité de contact (plus précisément, on suppose que $u_L = u_R = \bar{u}$, $u_L > c_L$, $u_R > c_R$, $p_L = p_R = \bar{p}$). On suppose en outre que l'on utilise un schéma décentré qui vérifie:

$$\Phi(W_L, W_R) = F(W_L), \quad (46)$$

pour le problème considéré, cette condition est tout à fait naturelle puisque les états W_L et W_R sont supersoniques. Après discrétisation spatiale, on a au temps $t = 0$: $W_j^0 = W_L$ pour $j \leq i - 1$, $W_j^0 = W_R$ pour $j \geq i$. En utilisant la relation de consistance $\Phi(W, W) = F(W)$, il est facile de voir que les valeurs W_j^1 (valeurs obtenues après une itération) sont égales à W_j^0 pour tout $j \neq i$, et que W_i^1 est donné par:

$$W_i^1 = W_R - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F(W_R) - F(W_L)]. \quad (47)$$

En notant $\nu = \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x}$ le nombre de Courant (la condition de stabilité impose $0 \leq \nu \leq 1$), on déduit aisément de (47) que:

$$\begin{aligned}\rho_i^1 &= (1 - \nu)\rho_R + \nu\rho_L, \\ Y_i^1 &= \frac{(1 - \nu)\rho_R Y_R + \nu\rho_L Y_L}{(1 - \nu)\rho_R + \nu\rho_L},\end{aligned}$$

et:

$$u_i^1 = \bar{u}, \quad (48)$$

$$\frac{p_i^1}{\gamma(Y_i^1) - 1} = \bar{p} \left(\frac{1 - \nu}{\gamma(Y_R) - 1} + \frac{\nu}{\gamma(Y_L) - 1} \right). \quad (49)$$

Aussi, après un pas de temps la vitesse a une valeur correcte en chaque point, mais la pression est modifiée au point i (puisque en général $p_i^1 \neq \bar{p}$). Cette inaptitude du schéma à reproduire d'une itération à l'autre la pression constante \bar{p} peut très bien causer après après plusieurs itérations temporelles les oscillations observées, et est *directement lié au fait que γ est non constant*, i.e que le fluide est un mélange de plusieurs espèces.

Avant d'étudier de façon plus détaillée la relation (49), nous tenons à souligner que l'observation précédente se produit dès que l'hypothèse (46) est satisfaite; en particulier elle se produit même si un solveur de Riemann exact est utilisé à chaque interface $x_{j+1/2}$ du maillage, comme c'est le cas pour la méthode de Godunov, et également avec le schéma de Van Leer. Seul le schéma de Glimm [29], qui n'utilise pas les procédés de moyenne qui apparaissent dans les schémas de type Godunov, devrait permettre d'obtenir une pression correcte $p_i^1 = \bar{p}$. Une autre façon de s'affranchir de cette difficulté consiste à déplacer les points du maillage localisés dans le voisinage de la discontinuité de contact avec la vitesse \bar{u} , comme le font Harten and Hyman [34] dans leur méthode de maillage mobile.

Pour des raisons de simplicité, supposons maintenant que $Y_L = 1$, et $Y_R = 0$. Alors (49) devient:

$$\frac{p_i^1}{\bar{p}} = \frac{\nu(\gamma_L - 1)\rho_L C_{vL} + (1 - \nu)(\gamma_R - 1)\rho_R C_{vR}}{\nu\rho_L C_{vL} + (1 - \nu)\rho_R C_{vR}} \left(\frac{1 - \nu}{\gamma_R - 1} + \frac{\nu}{\gamma_L - 1} \right). \quad (50)$$

En gardant tous les autres paramètres fixés, on considère le membre de droite de (50) comme une fonction de γ_L et γ_R , notée $f(\gamma_L, \gamma_R)$. En posant $\alpha = \frac{\nu\rho_L C_{vL}}{(1 - \nu)\rho_R C_{vR}}$ et $\beta = \frac{\nu}{1 - \nu}$, on peut écrire:

$$f(\gamma_L, \gamma_R) = \frac{[\alpha(\gamma_L - 1) + \gamma_R - 1][\beta(\gamma_L - 1) + \gamma_R - 1]}{(\alpha + 1)(\beta + 1)(\gamma_L - 1)(\gamma_R - 1)}. \quad (51)$$

On montre sur la figure II.14 le tracé de la fonction $\gamma_R \mapsto f(\gamma_L, \gamma_R)$ dans le cas particulier où $\alpha = 1$ et $\beta = \frac{2}{3}$, pour trois valeurs de γ_L . Il apparaît que, pour la même valeur de $|\gamma_L - \gamma_R|$, la situation après une itération temporelle est plus mauvaise dans le cas $\gamma_R < \gamma_L$ que dans le cas $\gamma_R > \gamma_L$: par exemple, on a $f(1.6, 1.2) > f(1.2, 1.6) > 1$.

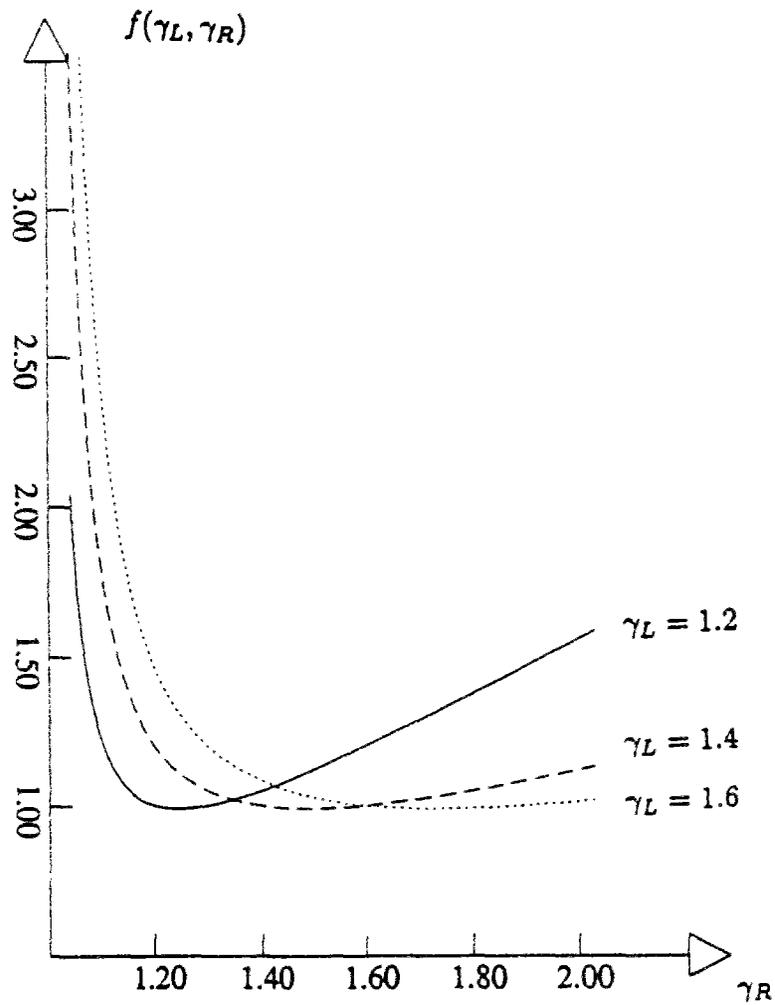


Figure II.14 : Tracé de $f(\gamma_L, \gamma_R)$, pour trois valeurs de γ_L ($\alpha = 1, \beta = \frac{2}{3}$).

Cette conclusion peut être illustrée par les résultats suivants. On considère de nouveau le tube à choc de Sod résolu en prenant un nombre de CFL proche de 0.75. Les valeurs des paramètres précédents α et β définis pour la discontinuité de contact sont approximativement celles de la figure (II.14). La figure (II.15) montre alors les résultats pour deux cas différents: pour le cas (a), on prend $\gamma_L = 1.2, \gamma_R = 1.6$, tandis que pour le cas (b) on prend $\gamma_L = 1.6, \gamma_R = 1.2$. En accord avec nos observations sur la figure (II.14), on voit que les résultats obtenus pour le cas (b) sont plus mauvais que ceux obtenus pour le cas (a)

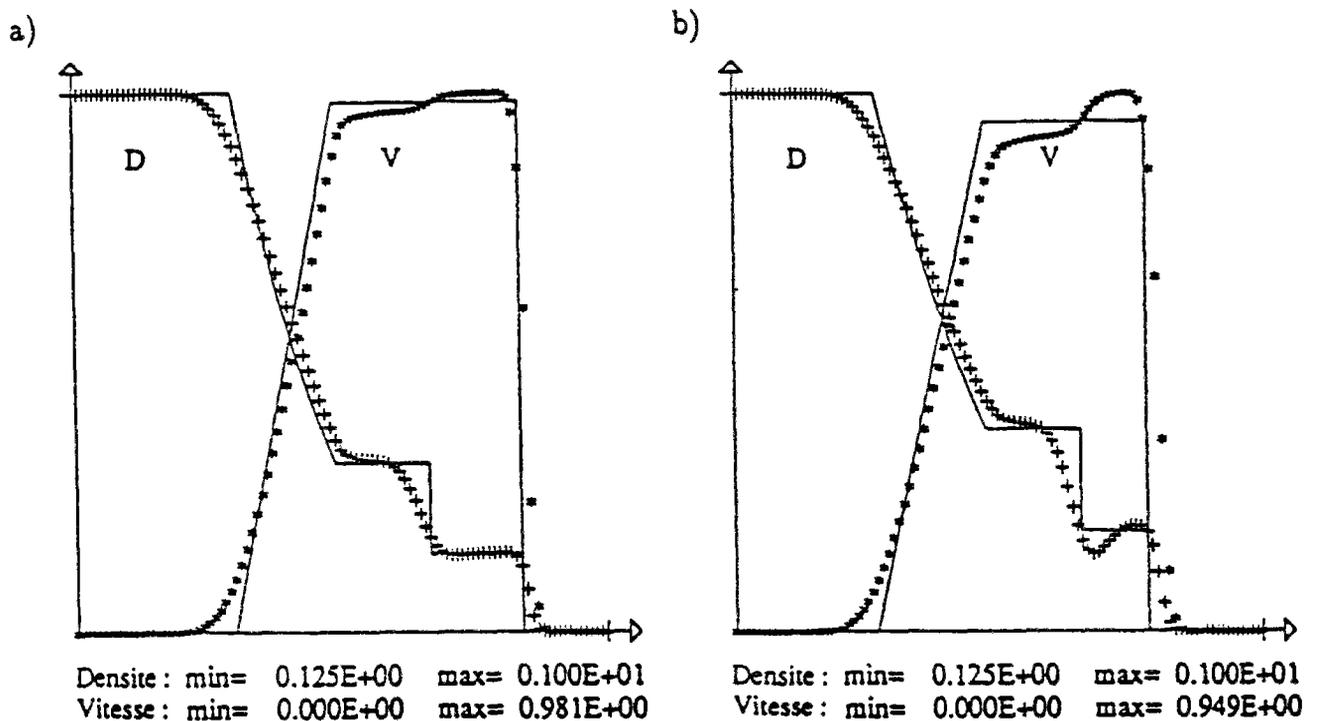


Figure II.15 : Densité et vitesse pour le tube à choc de Sod avec $\gamma_L = 1.6, \gamma_R = 1.2$ (cas (a)) et $\gamma_L = 1.2, \gamma_R = 1.6$ (cas (b)) (Schéma (C) de Roe précis au premier ordre).

Naturellement, l'analyse précédente basée sur les relations (50)-(51) ne s'applique que pour la première itération temporelle et ceci pour une situation très particulière (laquelle, strictement parlant, ne concerne pas le tube à choc de Sod dont la discontinuité de contact est subsonique). Par conséquent, cette analyse donne simplement quelques éléments de réponse concernant les médiocres résultats que l'on obtient au niveau de la discontinuité de contact de la figure II.15. La conclusion principale de cette annexe est seulement qualitative: tous les schémas décentrés que nous avons considérés dans cet article ont un mauvais comportement en présence de fortes variations de γ . •

Chapitre III

ETUDE NUMERIQUE DES ONDES DE DETONATION MONODIMENSIONNELLES

III.1 INTRODUCTION

Les phénomènes de détonation ont fait l'objet ces dernières années de gros efforts de recherche. Si d'importants progrès ont été réalisés aussi bien au niveau de la modélisation que de l'expérimentation, il semble maintenant que la majeure partie des difficultés viennent d'une certaine inadaptation des méthodes numériques existantes au calcul de ce type d'écoulement. Ceux-ci se caractérisent, par rapport aux phénomènes de déflagration qui sont maintenant bien maîtrisés, par des chocs et une cinétique chimique très raide spatialement qui nécessite la mise au point de méthodes numériques performantes si l'on souhaite capturer une solution physique. En effet, sous certaines conditions, on peut obtenir comme solutions des ondes de détonation faible avec un front de flamme qui peut se propager à la vitesse d'une maille par itération; bien évidemment ces solutions sont non physiques et d'origine purement numérique. Un autre problème soulevé par ce type d'écoulement provient de leur structure instable. L'instabilité monodimensionnelle est régie par une équation aux amplitudes de Landau-Stuart [10] et elle dépend directement du coefficient de pilotage f introduit au chapitre 1. Pour les écoulements monodimensionnels, cette instabilité se traduit par une oscillation des variables (pression, vitesse,...) autour de la solution ZND. La régularité de ces oscillations dépend du nombre de modes instables (c'est à dire du nombre de valeurs propres de partie réelle positive de l'équation aux amplitudes). Pour les écoulements multidimensionnels, cette instabilité peut donner lieu à des structures instables bien plus complexes, la plus connue étant la structure cellulaire qui représente la trace spatiale des points triples [28] (le point triple est l'intersection d'un choc droit, d'un choc incident et d'un choc réfléchi). Là encore, on souhaite que les méthodes numériques puissent capter correctement ces instabilités lorsqu'elles existent.

Le travail présenté dans ce chapitre concerne la première partie d'une étude de ces phénomènes de détonation. Les objectifs que nous nous sommes fixés sont dans un premier temps d'étudier le comportement des méthodes numériques développées à l'INRIA et de les comparer aux meilleures méthodes existantes pour ces problèmes, puis en parallèle à cette analyse, d'étudier les différentes solutions envisageables (existantes ou non) pour améliorer les résultats (traitement particulier du terme source, utilisation d'une procédure d'adaptation dynamique du maillage, utilisation de schémas numériques d'ordre élevé.....). Cette étude purement monodimensionnelle est faite dans le but d'être étendue au cas multidimensionnel.

Mis à part au CEA [8,9], qui utilise en fait des maillages et des méthodes différentes des nôtres (maillage quadrangulaire, schémas lagrangiens, procédure de suivi de front), très peu d'études numériques des phénomènes de détonation existent en France. Plus proches des méthodes que nous utilisons (schémas Eulériens), on peut citer les travaux de Ben Artzi [6], Bourlioux et al [10] et ceux de Colella et al [19] que nous détaillerons par la suite et qui serviront pour notre étude comparative.

On présente tout d'abord ci-dessous le système d'équations dimensionnées et adimensionnées. Le système d'équation peut en fait s'écrire de deux manières suivant que l'on prend comme variable conservative dans l'équation d'énergie, l'énergie totale (1) ou l'énergie totale diminuée de l'énergie chimique (2). Sur le problème continu, les deux écritures sont bien évidemment équivalentes comme nous l'avons vu au chapitre précédent.

Dans une seconde partie, on présente les différents schémas numériques explicites et implicites qui ont été utilisés. On montre à ce sujet que les discrétisations explicites (couplées ou par pas fractionnaires) des deux systèmes d'équations (1) et (2) sont équivalentes, mais par contre, qu'une discrétisation implicite par pas fractionnaires nécessite une correction si l'on souhaite obtenir les mêmes résultats. Une analyse de stabilité par Fourier est aussi présentée pour ces différents schémas.

Pour les équations d'Euler dont le modèle le plus simplifié s'écrit $u_t + cu_x = 0$, l'utilisation des équations équivalentes ou équations modifiées constitue un outil très performant. En effet, elles permettent d'une part d'obtenir des conditions de stabilité basses fréquences (que l'on obtient aussi par une analyse de stabilité par Fourier) mais surtout de comparer les erreurs de dispersion et de diffusion entre différents schémas numériques. De plus, bien que ces études se fassent sur des équations modèles, les résultats qu'elles permettent d'obtenir sont tout à fait valables pour les équations d'Euler. Pour les équations d'Euler réactives, le modèle le plus simplifié s'écrit $u_t + cu_x = -\lambda u$, où $\lambda < 0$ correspond à une création de la variable u et $\lambda > 0$ correspond à une consommation de la variable u . Pour ce modèle, il n'est pas possible d'obtenir une équation équivalente possédant les mêmes propriétés que pour le modèle purement convectif. Cependant, sous certaines conditions que nous détaillons et pour un modèle légèrement différent, l'équation équivalente montre le couplage entre le terme source et la convection. Une analyse rapide de ces termes permet d'évaluer leurs actions sur la flamme (erreur de diffusion ou de convection), on a ainsi pu justifier certains résultats numériques.

Ensuite, on s'intéresse plus particulièrement au traitement du terme source. L'idée générale est ici qu'un décentrage de ce terme, analogue à ce qui se fait pour les termes convectifs, peut éventuellement améliorer les résultats. A partir de l'équation modèle $u_t + cu_x = \lambda u$, on met en évidence pour un schéma de type Godunov qu'il existe pour le schéma explicite couplé un décentrage optimal basé sur le nombre de courant $c\Delta t/\Delta x$; on montre aussi que le schéma à pas fractionnaires réalise naturellement ce décentrage. On propose alors une extension naturelle de ce schéma pour la résolution des termes sources non linéaires. L'équation équivalente montre alors (pour le modèle non linéaire considéré précédemment) que seul un terme de convection du second ordre distingue ce schéma du schéma à pas fractionnaires.

Sur le cas test de détonation de Chapman-Jouguet (coefficient d'overdrive $f = 1$), les résultats que l'on obtient avec nos méthodes numériques sont tout à fait en accord avec ceux présentés dans [6,10]. On retrouve pour des pas spatiaux importants (par rapport à la largeur de la zone de réaction) des solutions non physiques constituées d'un choc réactif (dont la vitesse peut atteindre une maille par itération) suivi d'un choc purement Euler très diffusé de vitesse plus faible. Ces solutions non physiques sont la conséquence de deux phénomènes distincts. A partir de l'équation modèle non linéaire qui modélise parfaitement le choc réactif précédent, on apporte une explication physique sur l'origine de ces solutions dont la vitesse peut atteindre une maille par itération.

Dans une troisième partie, on s'intéresse plus particulièrement à la capture des instabilités des ondes de détonation. On choisit pour cette étude de prendre le schéma explicite couplé. Le but de cette partie est d'évaluer le comportement de nos méthodes numériques et d'étudier les différentes solutions pour une amélioration des résultats (intérêt d'un schéma d'ordre élevé, utilisation d'une adaptation dynamique du maillage etc...). Pour mener à bien cette étude, on dispose des résultats de Bourlioux et al [10] qui ont testé différentes méthodes.

Le bilan de cette première étude montre que pour une approche instationnaire, il est illusoire de vouloir traiter le terme source de manière implicite puisqu'il est nécessaire d'avoir plusieurs points dans la zone de réaction. Par conséquent un traitement explicite du terme source est tout à fait envisageable et même préférable. Les différents schémas numériques que nous avons considérés se sont montrés équivalents pour les expériences traitées. Il apparaît d'autre part que le calcul des phénomènes de détonation nécessitent à la fois des schémas numériques d'ordre élevé et des maillages fins ce qui rend inévitable l'utilisation de maillages adaptés.

Cette étude mériterait d'être complétée par l'investigation d'un traitement implicite des termes convectifs. En effet l'obtention de solutions précises, c'est à dire avec beaucoup de points dans la zone de réaction (ce qui est fait pour l'étude sur les instabilités), entraîne une limitation du pas de temps (Δx petit), et il serait alors intéressant d'étudier dans quelle mesure la dissipation numérique du schéma implicite (le terme source restant explicite) influe sur la qualité de la solution.

III.2 EQUATIONS ET ADIMENSIONNEMENT

III.2.1 Equations

On considère les équations d'Euler pour un fluide réactif non visqueux à deux espèces. Notre but étant l'étude des phénomènes de détonation, on néglige les effets de la conduction thermique et moléculaire. On considère de plus une réaction chimique simple irréversible du type:



où R et P désignent respectivement les deux espèces présentes dans l'écoulement. De plus, on suppose que R le réactant et P le produit de la réaction ont les mêmes caractéristiques physiques (même γ et même chaleur spécifique à pression constante C_p). Les équations s'écrivent alors:

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ e_t + [u(e + p)]_x = Q\omega \\ (\rho Y)_t + (\rho Y u)_x = -\omega, \end{cases} \quad (52)$$

ρ est la masse volumique, u la vitesse, p la pression du fluide et T est la température. e représente l'énergie totale par unité de volume diminuée de l'énergie de formation des espèces; Q est la quantité de chaleur dégagée par la réaction chimique à la température de référence (Q est exprimée en J/Kg). Enfin, on a noté ω le taux global de la réaction (en $kg/m^3/s$).

Notons $R = 8.314 J/^\circ K/mole$ la constante des gaz parfaits; la capacité calorifique à volume constant est alors donnée par $C_v = \frac{R}{m(\gamma-1)}$, où m la masse molaire. Alors les équations de fermeture du système (52) s'écrivent:

$$\begin{cases} p = (\gamma - 1)\rho C_v T \\ e = \rho C_v T + \frac{1}{2}\rho u^2, \end{cases} \quad (53)$$

Pour le taux de réaction ω , on utilise suivant les cas tests (pour comparer avec les expériences existantes) deux expressions. La première écriture pour ω est donné par une loi d'Arrhenius:

$$\omega = K\rho Y \exp\left(\frac{-E}{RT}\right),$$

où K est une constante et E est l'énergie d'activation.

Le deuxième modèle utilisé est un modèle à température d'ignition correspondant en fait à un modèle à énergie d'activation infinie:

$$\omega = K\rho Y H(T - T_i)$$

où $H(T - T_i) = 0$ si $T < T_i$ et $H(T - T_i) = 1$ si $T \geq T_i$, K est une constante qui détermine le temps de réaction.

A ce système d'équations, on associe les conditions initiales et aux limites.

III.2.2 Adimensionnement

D'un point de vue pratique, la résolution d'un tel système se fait sur des équations adimensionnées afin de mettre en évidence les différentes échelles de grandeur. Pour adimensionner ces équations, on introduit des grandeurs de référence (indiquées par 0).

ρ_0 : masse volumique

t_0 : temps

l_0 : longueur

$v_0 = \frac{l_0}{t_0}$: vitesse

$p_0 = \rho_0 v_0^2$: pression

$e_0 = p_0$: énergie par unité de volume

$T_0 = \frac{R}{m} v_0^2$: température

Y_0 : fraction massique

Cela revient à poser $\rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}$, $p^* = \frac{p}{p_0}$, (les quantités * étant sans dimension), et à les reporter dans les systèmes précédents. Le détail de cet adimensionnement est présenté au chapitre 4. On obtient alors (on supprime la notation *):

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ e_t + [u(e + p)]_x = \mathcal{Q}\Omega \\ (\rho Y)_t + (\rho Y u)_x = -\Omega \end{cases} \quad (54)$$

Avec:

$$\begin{cases} p = (\gamma - 1)(e - \frac{1}{2}\rho u^2) \\ T = \frac{p}{\rho} \\ \Omega = \mathcal{A}\rho Y \exp(-\epsilon_a/T) \text{ ou } \Omega = \mathcal{K}\rho Y H(T - T_i) \end{cases}$$

III.2.3 Equations réécrites en utilisant l'énergie totale

Le système d'équation (54) peut être écrit d'une autre façon en posant $E = e + \mathcal{Q}\rho Y$; E est l'énergie totale par unité de volume. Si on reporte dans le système (54) l'énergie ainsi définie on obtient le système suivant:

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ E_t + [u(E + p)]_x = 0 \\ (\rho Y)_t + (\rho Y u)_x = -\Omega \end{cases} \quad (55)$$

Avec:

$$\begin{cases} p = (\gamma - 1)(E - \frac{1}{2}\rho u^2 - \mathcal{Q}\rho Y) \\ T = \frac{p}{\rho} \\ \Omega = \mathcal{A}\rho Y \exp(-\epsilon_a/T) \text{ ou } \Omega = \mathcal{K}\rho Y H(T - T_i) \end{cases}$$

Bien évidemment, pour le problème continu, les deux systèmes (54) et (55) sont identiques puisque l'on utilise seulement des combinaisons linéaires d'équations conservatives pour transformer un système en l'autre (voir chapitre 2). Par contre, d'un point de vue numérique, les solutions obtenues ne sont identiques que sous certaines conditions que nous précisons par la suite.

III.3 SCHEMAS NUMERIQUES

Etant donné que l'on s'intéresse à la capture de phénomènes instationnaires, on se limite à des schémas numériques explicites pour la partie Euler. Par contre dans certains cas (peu de points dans la zone de réaction par exemple), la réaction chimique peut entraîner une limitation du pas de temps. Aussi, pour s'affranchir de cette contrainte, on envisage la possibilité de traiter le terme source de façon implicite ou éventuellement par un schéma de type exponentiel (voir ci-dessous).

III.3.1 Schémas explicites

D'une manière simplifiée, les deux systèmes (54) et (55) peuvent s'écrire:

$$W_t + F(W)_x = S(W) \quad (56)$$

La discrétisation du système (56) sans terme source ($S(W) = 0$, absence de phénomènes chimiques) par un schéma numérique explicite est présentée au chapitre précédent. En présence du terme source, deux discrétisations sont possibles. La première, appelée schéma couplé, traite dans la même étape la partie Euler et la partie source, tandis que la deuxième, dite schéma à pas fractionnaires traite ces mêmes parties en deux étapes distinctes.

Schéma couplé

$$\frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} + \frac{\phi_{j+1/2}^n - \phi_{j-1/2}^n}{\Delta x} = S(W_j^n), \quad (57)$$

où $\Phi_{j+1/2}^n$ est le flux numérique défini au chapitre précédent.

On peut montrer (nous le verrons par la suite) que le schéma ainsi construit est précis au premier ordre en temps et en espace. Pour obtenir une solution précise au second ordre, on utilise l'approche "MUSCL"; par rapport à ce qui a été présenté au chapitre précédent pour le système Euler multi-espèces, on introduit dans les phases de prédiction et de correction le terme source $S(W)$. Notons par P_j^n le gradient supposé constant de la solution W_j^n sur la cellule $C_j = [j - 1/2, j + 1/2]$, la solution à l'étape $n + 1/2$ s'obtient après l'étape de prédiction:

$$W_j^{n+1/2} - W_j^n + \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F(W_j + P_j^n \frac{\Delta x}{2}) - F(W_j - P_j^n \frac{\Delta x}{2})) = \frac{\Delta t}{2} S(W_j^n). \quad (58)$$

L'étape de correction permet d'obtenir la solution à l'étape $n + 1$:

$$W_j^{n+1} - W_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi(W_{j+1/2-}^{n+1/2}, W_{j+1/2+}^{n+1/2}) - \phi(W_{j-1/2-}^{n+1/2}, W_{j-1/2+}^{n+1/2})) = \Delta t S(W_j^{n+1/2}), \quad (59)$$

où $W_{j+1/2-}^{n+1/2} = W_j^{n+1/2} + P_j^n \frac{\Delta x}{2}$ et $W_{j+1/2+}^{n+1/2} = W_{j+1}^{n+1/2} - P_{j+1}^n \frac{\Delta x}{2}$. On obtient alors un schéma précis au second ordre en temps et en espace.

Stabilité du schéma couplé

Pour déterminer le domaine de stabilité du schéma ainsi construit, on réalise une analyse de Fourier sur une équation scalaire modélisant les deux phénomènes physiques considérés (convection et combustion):

$$u_t + cu_x = -\lambda u,$$

où λ est une constante positive, (on suppose qu'il y a consommation de la variable u). Dans ces conditions, le schéma explicite couplé d'ordre 1 s'écrit pour $c > 0$:

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

où l'on a introduit deux nombres adimensionnés qui sont le nombre de Courant convectif $\mu = c\Delta t/\Delta x$ et le "nombre de Courant chimique" $\nu = \lambda\Delta t$. On étudie la stabilité L^2 du schéma par analyse de Fourier. Posons $u_j^n = e^{ij\epsilon_k}$ et $u_j^{n+1} = G_k e^{ij\epsilon_k}$ ($\epsilon_k = 2k\pi/N$, N étant le nombre de points du maillage); G_k représente le module d'amplification du schéma numérique. Le schéma numérique sera stable si le critère de von Neuman est vérifié, à savoir:

$$\max_k |G_k| \leq 1.$$

Un calcul immédiat permet de montrer que le critère précédent est vérifié si:

$$\nu + 2\mu \leq 2,$$

en fait si on souhaite la positivité de la variable u , on impose en plus la condition suffisante suivante:

$$\nu + \mu \leq 1.$$

Dans la pratique, la condition de stabilité s'est avérée moins sévère que cette dernière.

Schéma à pas fractionnaires

Ce schéma s'écrit:

$$\begin{cases} \frac{W_j^* - W_j^n}{\Delta t} + \frac{\phi_{j+1/2} - \phi_{j-1/2}}{\Delta x} = 0, \\ \frac{W_j^{n+1} - W_j^*}{\Delta t} = S(W_j^*). \end{cases} \quad (60)$$

De même que pour le schéma couplé, le schéma à pas fractionnaires ainsi défini est précis au premier ordre en temps et en espace. Pour obtenir une précision au second ordre, on utilise comme précédemment un schéma prédicteur correcteur pour chaque étape. C'est à dire pour l'étape de convection:

$$\begin{aligned} W_j^{*,n+1/2} - W_j^n + \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F(W_j + \frac{P_j^n}{2\Delta x}) - F(W_j - \frac{P_j^n}{2\Delta x})) &= 0 \\ W_j^* - W_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi(W_{j+1/2}^{*,n+1/2}, W_{j+1/2}^{*,n+1/2}) - \phi(W_{j-1/2}^{*,n+1/2}, W_{j-1/2}^{*,n+1/2})) &= 0 \end{aligned} \quad (61)$$

et pour l'étape de combustion:

$$\begin{aligned} W_j^{**,n+1/2} - W_j^* &= \frac{\Delta t}{2} S(W_j^*) \\ W_j^{n+1} - W_j^* &= \Delta t S(W_j^{**,n+1/2}) \end{aligned} \quad (62)$$

Pour des opérateurs linéaires, on peut montrer que le schéma ainsi construit est précis au second ordre en temps et en espace. Il semble que dans le cas général ceci ne soit plus vrai. D'après Colella et al [19], pour obtenir de l'ordre deux avec ce type de schéma, il suffit alors d'ajouter au processus précédent un schéma identique en inversant simplement l'étape "Euler" et l'étape "combustion". On obtient ainsi la solution au temps t^{n+2} . Pour les calculs numériques effectués par la suite, ces deux schémas se sont avérés équivalents.

Stabilité du schéma à pas fractionnaires

On procède de la même façon par analyse de Fourier. Pour la phase Euler, on obtient $\mu \leq 1$ tandis que pour la phase chimique la conjugaison de la stabilité L^2 et de la stabilité L^∞ donne la condition suffisante $\nu \leq 1$. On constate que par rapport au schéma précédent le domaine de stabilité est considérablement plus étendu et donc qu'a priori ce schéma est préférable.

Condition d'équivalence

Les deux schémas explicites que l'on a présentés s'appliquent aussi bien pour le système (54) que pour le système (55). Cependant, on peut montrer simplement que les solutions obtenues, pour un schéma donné ne sont équivalentes que si:

$$\phi(E) = \phi(e) + Q\phi(\rho Y), \quad (63)$$

où $\Phi(X)$ représente le flux numérique de la variable X . En fait cette relation n'est pas vérifiée si l'on utilise pour le flux d'espèce le schéma (BL) (approche (C) du chapitre précédent), par contre cette relation est vraie pour l'approche (B) (schéma à Jacobien complet). Cependant, pour des raisons de positivité on préfère prendre le schéma (BL) d'autant que les différences constatées entre les deux méthodes restent toujours inférieures à 1%.

III.3.2 Schémas à stabilité inconditionnelle

Comme nous l'avons cité précédemment, nous souhaitons construire des schémas numériques pour lesquels la stabilité liée au terme source est inconditionnelle. Ceci peut être obtenu par des schémas à pas fractionnaires de deux façons. La première très simple et peu coûteuse suppose la température constante durant l'étape de combustion. On a donc un découplage total entre la chimie et la température, c'est cette méthode qui est utilisée entre autre dans [10,6,19]. La deuxième suppose quant à elle que la température évolue durant la combustion, elle entraîne bien évidemment un coût calcul supérieur mais il semble intéressant de savoir si cette méthode améliore les résultats.

Notons $\Omega = \rho Y f(T)$, Le schéma à pas fractionnaires utilisé par les auteurs cités précédemment s'écrit pour le système (55):

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ E_t + [u(E + p)]_x = 0 \\ (\rho Y)_t + (\rho Y u)_x = 0 \end{cases}$$

Cette première étape purement Euler multi-espèces permet par utilisation d'un schéma explicite de déterminer la température T^* . Dans une deuxième étape on résout le processus de combustion:

$$(\rho Y)_t = -\rho Y f(T^*)$$

La résolution de cette dernière équation se fait soit par utilisation d'un schéma implicite ou soit plus simplement en utilisant la solution exacte:

$$(\rho Y)^{n+1} = (\rho Y)^n e^{-f(T^*)\Delta t}. \quad (64)$$

Cette même méthode ne s'applique pas directement pour résoudre le système (54) du fait de la présence du terme source dans l'équation d'énergie. Dans ces conditions, le schéma équivalent (c'est à dire donnant la même solution numérique) s'écrit:

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ e_t + [u(e + p)]_x = 0 \\ (\rho Y)_t + (\rho Y u)_x = 0 \end{cases}$$

Notons comme ci dessus par * les variables issues de la résolution de ce système, la deuxième étape est identique à celle présentée pour le système (55):

$$(\rho Y)_t = -\rho Y f(T^*)$$

Par résolution de cette équation on obtient $(\rho Y)^{n+1}$. L'étape correctrice pour avoir l'équivalence est:

$$e^{n+1} = e^* + Q[(\rho Y)^n - (\rho Y)^{n+1}]$$

La démonstration non présentée est très simple, elle repose sur le fait que pour la phase Euler et pour l'approche (B), les flux numériques ϕ vérifient la relation (63).

Ces schémas numériques sont souvent employés pour leur simplicité; cependant ils présentent l'inconvénient de ne pas prendre en compte dans la phase chimique la variation de température puisque celle-ci est figée après l'étape Euler. Pour pallier cet inconvénient on introduit un schéma par décomposition des opérateurs. Présentons ce schéma pour le système (54), la première phase Euler reste inchangée; par contre pour la deuxième phase relative à la chimie, le système à résoudre est:

$$\begin{cases} e_t = Q\rho Y f(T) \\ (\rho Y)_t = -\rho Y f(T) \end{cases} \quad (65)$$

avec $e_t = \frac{\rho^*}{\gamma - 1} T$, le système ainsi défini est résolu par un schéma implicite linéarisé, par une méthode de Newton ou plus simplement par la solution exacte lorsqu'elle est connue. On peut aussi, bien entendu, le résoudre par un schéma explicite. On trouvera au chapitre 7 une étude détaillée de ce schéma ainsi que des résultats numériques sur des cas tests de flamme qui montre son efficacité. En fait, on peut montrer que pour le modèle de combustion à énergie d'activation infinie, le schéma numérique ainsi construit en utilisant la solution exacte est identique au schéma précédent. En effet au cours du processus de combustion, la température ne peut que croître (comme le montre (65)), et comme $f(T)$ est une constante il est immédiat que les deux schémas sont identiques.

III.3.3 Equations équivalentes pour le modèle de combustion

Pour comparer de façon théorique différents schémas et aussi pour déterminer la précision en temps et en espace de ces mêmes schémas, on dispose d'un outil performant, l'équation équivalente ou équation modifiée. Partant du système différentiel continu et de la discrétisation choisie, on peut par cette technique déterminer quel est réellement le système différentiel résolu par le schéma numérique. Nous pourrions considérer de nouveau ici le modèle simplifié $u_t + cu_x = -\lambda u$ comportant à la fois les effets convectifs et les effets chimiques. En fait, nous préférons utiliser pour cette étude un modèle un peu plus complexe qui permet de tenir compte du signe des valeurs propres de la matrice jacobienne $S'(W)$ (on rappelle à ce sujet que les termes sources que l'on utilise ont des valeurs propres positives dans la zone des gaz frais et négatives dans celle des gaz brûlés). On suppose la variable u comprise entre 0 et 1, le modèle retenu s'écrit alors:

$$u_t + cu_x = -s(u), \quad (66)$$

avec $s = s(u) = au(1 - u)$ et a constante positive. On a:

$$s' = \frac{ds(u)}{du} = a(1 - 2u) \text{ et } s'' = \frac{d^2s(u)}{du^2} = -2a.$$

Remarque:

Dans l'équation (66) est absent tout phénomène de diffusion. Cela signifie que si on initialise par une discontinuité ($u(x) = 0$ si $x < x_0$, $u(x) = 1$ sinon), la solution exacte de cette équation est la même que celle pour laquelle $s(u) = 0$. Or une analyse de stabilité linéaire que nous présentons par la suite montre que cette solution est instable. Cette remarque nous servira pour justifier l'existence de solutions numériques dont la vitesse de propagation est d'une maille par itération.

Equation équivalente pour le schéma couplé d'ordre 1

On note Δt et Δx les pas temporel et spatial de la discrétisation. Le schéma numérique d'ordre 1 s'écrit:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{c}{\Delta x}(u_i^n - u_{i-1}^n) = -s(u_i^n). \quad (67)$$

On effectue dans un premier temps des développements de Taylor pour évaluer les différences:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t u_t + \frac{\Delta t^2}{2} u_{tt} + \frac{\Delta t^3}{6} u_{ttt} + O(\Delta t^4),$$

$$u_{i-1}^n = u_i^n - \Delta x u_x + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx} - \frac{\Delta x^3}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^4).$$

En reportant dans (67), on obtient:

$$u_t + \frac{\Delta t}{2} u_{tt} + \frac{\Delta t^2}{6} u_{ttt} + O(\Delta t^3) + c u_x - c \frac{\Delta x}{2} u_{xx} + c \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^3) = -s(u). \quad (68)$$

Pour déterminer quelle est l'équation différentielle effectivement résolue par le schéma numérique (67), il ne reste plus qu'à éliminer dans (68) les dérivées temporelles. Pour réaliser ceci, on procède par une technique de dérivation et d'élimination. On obtient:

$$\begin{aligned} u_{tt} + \frac{\Delta t}{2} u_{ttt} + c u_{xt} - c \frac{\Delta x}{2} u_{xxt} &= -s' u_t + O(\Delta t^2, \Delta x^2), \\ u_{tx} + \frac{\Delta t}{2} u_{ttx} + c u_{xx} - c \frac{\Delta x}{2} u_{xxx} &= -s' u_x + O(\Delta t^2, \Delta x^2), \\ u_{ttx} + c u_{xxt} &= -s' u_{tx} - s'' u_t u_x + O(\Delta t, \Delta x), \\ u_{ttt} + c u_{xtt} &= -s' u_{tt} - s'' u_t^2 + O(\Delta t, \Delta x), \\ u_{txx} + c u_{xxx} &= -s' u_{xx} - s'' u_x^2 + O(\Delta t, \Delta x). \end{aligned}$$

Les dérivées croisées sont déterminées à partir de (68):

$$\begin{aligned} u_t u_x &= -s u_x - c u_x^2 + O(\Delta t, \Delta x), \\ u_t^2 &= s^2 + c^2 u_x^2 + 2s c u_x + O(\Delta t, \Delta x). \end{aligned}$$

Le calcul que l'on fait n'est valable que si le produit $a\Delta t$ est petit. Ceci provient en fait du terme source pour lequel on ne sait pas, à la main du moins, déterminer l'équation équivalente. En effet dans le calcul apparaissent des puissances en $a\Delta t$ qui ne sont négligeables que si ce produit, qui correspond en fait au CFL chimique, tend vers 0. Pour le schéma explicite, ce CFL est toujours inférieur à 1 et l'équation équivalente est alors précise en $O(a\Delta t)^n$, par contre pour des CFL chimiques proches de l'unité ou supérieurs (cas des schémas implicites) le calcul n'est plus valable. Des études sont envisagés actuellement à l'INRIA pour résoudre ce genre de problème par le calcul formel. En d'autres termes l'étude que l'on présente ne sera valable que pour des CFL chimiques suffisamment petits. Cependant, on peut quant même espérer obtenir des informations sur le couplage entre la chimie et la convection. Après substitution et en faisant l'hypothèse que $a\Delta t$ est petit, on obtient l'équation équivalente au troisième ordre en temps et en espace du schéma aux différences (67):

$$\begin{aligned}
u_t + cu_x + s(u) = & -s(u)\left(\frac{s'(u)\Delta t}{2} + \frac{\Delta t^2}{3}(s'^2(u) + \frac{s''(u)s(u)}{4})\right) \\
& -cu_x(s'(u)\Delta t + \Delta t^2(s'^2(u) + \frac{1}{2}s(u)s''(u))) \\
& + \frac{c\Delta x u_{xx}}{2}\left(1 - \frac{c\Delta t}{\Delta x} + s'(u)\Delta t\left(1 - 2\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)\right) \\
& + \frac{c\Delta x \Delta t}{4}s''(u)u_x^2\left(1 - \frac{3c\Delta t}{\Delta x}\right) \\
& - \frac{c\Delta x^2}{6}u_{xxx}\left(1 - 3\frac{c\Delta t}{\Delta x} + 2\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) \\
& + O[(a\Delta t)^3, \Delta t^3, \Delta x^3, \text{termes croisés}]
\end{aligned} \tag{69}$$

Cette équation nous fournit un certain nombre de renseignements. Tout d'abord, on vérifie bien comme nous l'avions évoqué dans la section précédente que le schéma numérique ainsi construit est précis au premier ordre en temps et en espace.

Pour le modèle purement Euler, c'est à dire avec $a = 0$, l'équation (69) permet de déterminer entre autre les erreur dispersives (dérivées impaires: u_x, u_{xxx}, \dots) et diffusives (dérivées paires: u_{xx}, u_{xxxx}, \dots). On peut aussi en étudiant le signe de la première erreur diffusive obtenir une condition de stabilité. Par exemple, pour le cas $a = 0$, on a stabilité si le coefficient de u_{xx} est positif, à savoir : $1 - \mu \geq 0$. On retrouve la condition de stabilité donnée par analyse de Fourier. On ne peut pas mener une étude identique pour notre équation (avec $a \neq 0$) du fait de la présence des termes non linéaires. En revanche, on peut évaluer simplement le comportement des différents termes non linéaires présents dans l'équation (18). Cela nous servira pour comparer les différents schémas. Supposons la solution u croissante ($u' > 0$) et considérons un terme du type $\beta u_x s'(u)$. Ce terme est du signe de β si $u < u_0$ et du signe opposé sinon ($0 < u_0 < 1$). Si $\beta > 0$, ce terme élargit la zone de réaction. Si par contre $\beta < 0$, ce terme réduit la largeur de flamme. De la même façon, on peut montrer que les termes du type $\beta u_{xx} s'(u)$ sont toujours du signe de β . Ils apparaissent donc comme des termes dispersifs.

Equation équivalente pour le schéma à pas fractionnaires d'ordre 1

Le schéma numérique d'ordre 1 s'écrit:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{c}{\Delta x}(u_i^n - u_{i-1}^n) = -s(u_i^n - \frac{c\Delta t}{\Delta x}(u_i^n - u_{i-1}^n)) \quad (70)$$

On utilise les développements de Taylor, il vient:

$$u_t + \frac{\Delta t}{2}u_{tt} + \frac{\Delta t^2}{6}u_{ttt} + O(\Delta t^3) = -cu_x + c\frac{\Delta x}{2}u_{xx} - c\frac{\Delta x^2}{6}u_{xxx} + O(\Delta x^3) - s(u - c\Delta t(u_x - \frac{\Delta x}{2}u_{xx} + O(\Delta x^3))) \quad (71)$$

On développe le terme source:

$$u_t + \frac{\Delta t}{2}u_{tt} + \frac{\Delta t^2}{6}u_{ttt} + O(\Delta t^3) = -cu_x + c\frac{\Delta x}{2}u_{xx} - c\frac{\Delta x^2}{6}u_{xxx} + O(\Delta x^3) - s(u) + s'(u)c\Delta tu_x - s'(u)c\Delta t\frac{\Delta x}{2}u_{xx} - s''(u)c^2\frac{\Delta t^2}{2}u_x^2 + O(\text{Ordre } 3) \quad (72)$$

Les dérivées d'ordre trois sont identiques à celles du schéma précédent; les dérivées secondes s'écrivent:

$$u_{tt} + \frac{\Delta t}{2}u_{ttt} + cu_{xt} - c\frac{\Delta x}{2}u_{xxt} = -s'u_t + s'c\Delta tu_{xt} + s''c\Delta tu_x u_x + O(\Delta t^2, \Delta x^2)$$

$$u_{tx} + \frac{\Delta t}{2}u_{ttx} + cu_{xx} - c\frac{\Delta x}{2}u_{xxx} = -s'u_x + s'c\Delta tu_{xx} + s''c\Delta tu_x^2 + O(\Delta t^2, \Delta x^2)$$

Après développement et simplification pour $a\Delta t$ petit (même remarque que précédemment), on obtient l'équation équivalente pour le schéma à pas fractionnaires:

$$u_t + cu_x + s(u) = -s(u)\left(\frac{s'(u)\Delta t}{2} + \frac{\Delta t^2}{3}(s'(u) + \frac{s''(u)s(u)}{4})\right) + \frac{c\Delta xu_{xx}}{2}\left(1 - \frac{c\Delta t}{\Delta x}\right) + \frac{c\Delta x\Delta t}{4}s''(u)u_x^2\left(1 - \frac{c\Delta t}{\Delta x}\right) - \frac{c\Delta x^2}{6}u_{xxx}\left(1 - 3\frac{c\Delta t}{\Delta x} + 2\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) + O[(a\Delta t)^3, \Delta t^3, \Delta x^3, + \text{termes croisés}] \quad (73)$$

De même que pour le schéma couplé, on vérifie que le schéma à pas fractionnaires est précis au premier ordre en temps et en espace. On constate que les deux équations équivalentes ont le même terme source. Par contre pour ce schéma, le couplage entre la convection et la combustion ne se fait que sur le terme en u_x^2 . On vérifie aussi que pour $\frac{c\Delta t}{\Delta x} = 1$ on a un découplage total entre la chimie et la convection, on retrouve là une caractéristique du schéma à pas fractionnaires.

III.3.4 Traitement du terme source

On considère l'équation scalaire d'advection-réaction:

$$u_t + cu_x = g(u) = -\lambda u,$$

avec la condition initiale:

$$u(x, t) = u_L \text{ si } x < x_0 \text{ et } u(x, t) = u_R \text{ si } x > x_0$$

La solution exacte de ce problème de Riemann réactif s'écrit:

$$\begin{cases} u(x, t) = u_L e^{-\lambda t} \text{ pour } x < x_0 + ct, \\ u(x, t) = u_R e^{-\lambda t} \text{ pour } x > x_0 + ct. \end{cases} \quad (74)$$

Notons u_j^n la solution au noeud j au temps t^n , on construit la solution numérique au temps t^{n+1} à l'aide d'un schéma de Godunov. On note Δx le pas spatial du maillage supposé uniforme.

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{j-1/2}^{j+1/2} u_{ex}^n dx = u_{j-1} e^{-\lambda \Delta t} \frac{c \Delta t}{\Delta x} + u_j e^{-\lambda \Delta t} \left(1 - \frac{c \Delta t}{\Delta x}\right)$$

$\lambda \Delta t$ est supposé petit, en notant $\mu = \frac{c \Delta t}{\Delta x}$ et $\nu = \lambda \Delta t$, le schéma de Godunov s'écrit:

$$u_j^{n+1} - u_j^n + \mu(u_j^n - u_{j-1}^n) = -\mu(\lambda u_{j-1}) - (1 - \mu)(\lambda u_j) \quad (75)$$

Pour le terme source linéaire que l'on a pris, ce schéma est identique au schéma à pas fractionnaires (70). Dans le cas général où le terme source est non linéaire, on peut par analogie avec (75) construire un schéma couplé pour lequel le terme source est décentré. Ce schéma s'écrit:

$$u_j^{n+1} - u_j^n + \mu(u_j^n - u_{j-1}^n) = \mu g(u_{j-1}) + (1 - \mu)g(u_j), \quad (76)$$

alors que le schéma à pas fractionnaires s'écrit:

$$u_j^{n+1} - u_j^n + \mu(u_j^n - u_{j-1}^n) = g(\mu u_{j-1} + (1 - \mu)u_j). \quad (77)$$

Pour évaluer l'influence sur la solution numérique de ce décentrage, on détermine l'équation équivalente fournie par le schéma (76) pour $g(u) = -au(1 - u)$. Ce résultat sera à comparer à l'équation équivalente (73) du schéma (77).

Après développement du terme source, le schéma numérique (75) s'écrit:

$$\begin{aligned} u_t + \frac{\Delta t}{2} u_{tt} + \frac{\Delta t^2}{6} u_{ttt} + O(\Delta t^3) = & -cu_x + c \frac{\Delta x}{2} u_{xx} - c \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^3) \\ & -s(u) + s'(u)c\Delta t u_x - s'(u)c\Delta t \frac{\Delta x}{2} u_{xx} \\ & -s''(u)c\Delta t \frac{\Delta x}{2} u_x^2 + O(\text{Ordre } 3) \end{aligned} \quad (78)$$

En utilisant les résultats précédent (le seul terme modifié par rapport à (72) étant le terme en $s''(u)$), on obtient l'équation équivalente au troisième ordre:

$$\begin{aligned}
u_t + cu_x + s(u) = & -s(u)\left(\frac{s'(u)\Delta t}{2} + \frac{\Delta t^2}{3}(s'(u) + \frac{s''(u)s(u)}{4})\right) \\
& + \frac{c\Delta x u_{xx}}{2}\left(1 - \frac{c\Delta t}{\Delta x}\right) \\
& - \frac{c\Delta x \Delta t}{4} s''(u) u_x^2 \left(1 - \frac{c\Delta t}{\Delta x}\right) \\
& - \frac{c\Delta x^2}{6} u_{xxx} \left(1 - 3\frac{c\Delta t}{\Delta x} + 2\frac{c^2 \Delta t^2}{\Delta x^2}\right) \\
& + O[(a\Delta t)^3, \Delta t^3, \Delta x^3, + \text{termes croisés}]
\end{aligned} \tag{79}$$

L'équation (79) montre que ce schéma présente la même diffusion numérique que le schéma à pas fractionnaires. Par contre le terme en u_x^2 change de signe et ce schéma présente alors une erreur dispersive plus faible. Cependant, cette erreur est d'ordre deux et ne devrait donc modifier que très sensiblement les résultats numériques. Nous vérifieront ce point sur le problème de la détonation.

III.3.5 Schémas de type Godunov basés sur la solution du PRG

Les schémas que nous utilisons sont très proches de ceux implémentés dans [10,19] et il n'est pas surprenant de ce fait que nos résultats soient comparables aux leurs. Par contre Ben Artzi [6] ainsi que Bourgade [8,9] ont construit un schéma numérique (précis au second ordre en temps et éventuellement en espace) basé sur la solution du problème de Riemann généralisé (noté PRG par la suite).

Définition du problème de Riemann classique

On considère le problème à valeur initiale suivant:

$$\begin{cases} W_t + F(W)_x = 0 \\ W(x, 0) = \begin{cases} W_L, & x < 0 \\ W_R, & x > 0 \end{cases} \end{cases} \tag{80}$$

Résoudre le problème de Riemann classique, c'est chercher $W(x, t)$ solution de (80).

Si l'on note par p la dimension du vecteur W , alors on sait (sous certaines conditions, en particulier si le système est hyperbolique) qu'il existe une unique solution faible composée de $p + 1$ états constants séparés par des ondes simples. De plus, cette solution vérifie:

$$W(x, t) = W\left(\frac{x}{t}, W_L, W_R\right) = V^0\left(\frac{x}{t}\right)$$

Définition du problème de Riemann généralisé

On considère le problème à valeur initiale suivant:

$$\begin{cases} W_t + F(W)_x = S(W) \\ W(x, 0) = \begin{cases} W_L(x), & x < 0 \\ W_R(x), & x > 0 \end{cases} \end{cases} \quad (81)$$

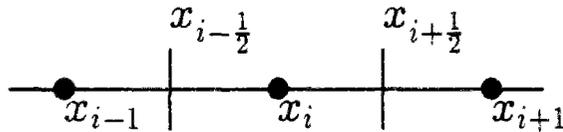
Résoudre le problème de Riemann généralisé, c'est chercher $W(x, t)$ solution de (81). Contrairement au PRC, La solution $W(x, t)$ n'est plus auto-similaire. Mais on peut montrer qu'au voisinage de l'origine, la solution $W(x, t)$ est solution faible unique et qu'elle a la même structure que celle du PRC. On peut donc l'écrire:

$$W(x, t) = V^0\left(\frac{x}{t}\right) + tV^1\left(\frac{x}{t}\right) + \dots + t^k V^k\left(\frac{x}{t}\right) + \dots$$

ou $V^0\left(\frac{x}{t}\right)$ est la solution du PRC correspondant.

Construction du schéma numérique

Soient $x_i = i\Delta x$ les points du maillages, $C_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ la cellule et $t^n = n\Delta t$.



On note W_i^n la moyenne de W sur la cellule C_i à l'instant $n\Delta t$, la solution numérique à l'instant $(n+1)\Delta t$ sera donnée par le schéma de Godunov suivant:

$$W_i^{n+1} - W_i^n = -\frac{\Delta t}{\Delta x} [F(W_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) - F(W_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})] + \Delta t S(W_i^{n+\frac{1}{2}}),$$

avec

$$W_{i+1/2}^{n+1/2} = W_{i+1/2}^n + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial W}{\partial t} \right]_{i+1/2}^n$$

Dans cette dernière expression, $W_{i+\frac{1}{2}}^n$ est la solution du PRC en $x_{i+1/2}$ et $\left[\frac{\partial W}{\partial t} \right]_{i+1/2}^n$ est solution au premier ordre du PRG.

Pour calculer le terme source S , on pose simplement $W_i^{n+1/2} = \frac{1}{2}(W_{i-1/2}^{n+1/2} + W_{i+1/2}^{n+1/2})$

Pour les équations d'Euler réactives, la construction d'un tel schéma est assez complexe et très technique. Aussi pour simplifier, on va construire ce schéma pour une équation scalaire d'advection avec terme source.

III.3.6 Solution du PRG et schéma numérique pour l'équation modèle

On considère l'équation modèle suivante avec $c > 0$:

$$u_t + cu_x = g(u)$$

Pour avoir une solution précise au second ordre en espace, on suppose que la solution varie linéairement sur chaque cellule C_j . Soit P_i^n le gradient constant sur la cellule. Pour chaque bord de cellule $i + 1/2$, la solution du PRG s'écrit:

$$u(x, t) = u_i^n + \frac{\Delta x}{2} P_i^n + P_i^n t \left(\frac{x}{t} - c \right) + \Delta t g \left(u_i^n + \frac{\Delta x}{2} P_i^n \right)$$

Alors, on a:

$$u_{i+1/2}^n = u(0, 0) = u_i^n + \frac{\Delta x}{2} P_i^n$$

$$u_{i+1/2}^{n+1/2} = u(0, 0) + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right]_{0,0} = u_i^n + \frac{\Delta x}{2} P_i^n + \frac{\Delta t}{2} (-c P_i^n + g(u_i^n + \frac{\Delta x}{2} P_i^n))$$

Ce schéma est à comparer à ceux définis par (58-59) pour le schéma couplé et par (61-62) pour le schéma à pas fractionnaires. En fait, cette étude montre qu'en l'absence de terme source la résolution de l'équation $u_t + cu_x = 0$ par le schéma utilisant la solution du PRG conduit au même schéma numérique que la méthode MUSCL. A noter aussi que le schéma ainsi construit réalise naturellement un décentrage du terme source. Mais contrairement au schéma à pas fractionnaires, le paramètre de décentrage vaut $1/2$.

III.4 RESULTATS NUMERIQUES POUR UNE DETONATION DE CHAPMAN-JOUGUET

III.4.1 Présentation du cas test

Comme nous le verrons plus loin, le modèle non linéaire qui a servi de base à la détermination des équations équivalentes ne peut pas être utilisé pour faire une comparaison des différents schémas numériques. Aussi, pour effectuer cette comparaison, on choisit le cas test de détonation de Chapman-Jouguet correspondant à la décomposition de l'ozone. Ce cas test est présenté dans [6]. Le modèle de combustion pris pour ce calcul est le modèle à température d'ignition. Les différentes constantes apparaissant dans les équations de fermeture sont (pour le système adimensionné par rapport aux unités CGS):

$$\gamma = 1.4, \quad Q = 0.5196 \cdot 10^{10}, \quad \mathcal{K} = 0.5825 \cdot 10^{10}, \quad T_i = 0.1155 \cdot 10^{10}.$$

Notons x_0 l'abscisse de la discontinuité initiale. Les conditions initiales, prises constantes de part et d'autre de cette discontinuité, définissent une détonation de Chapman-Jouguet:

$$(\rho, u, p, Y) = \begin{cases} (\rho_0, 0, p_0, 1) & \text{pour } x > x_0, \\ (\rho_{CJ}, u_{CJ}, p_{CJ}, 0) & \text{pour } x < x_0. \end{cases}$$

où $\rho_0 = 1.201 \cdot 10^{-3}$, $p_0 = 8.321 \cdot 10^5$ et $\rho_{CJ} = 1.945 \cdot 10^{-3}$, $u_{CJ} = 4.162 \cdot 10^4$, $p_{CJ} = 6.270 \cdot 10^6$. Dans la théorie de Chapman-Jouguet, la vitesse du front de détonation est alors de $D_{CJ} = 1.088 \cdot 10^5$. La largeur de la zone de réaction est de l'ordre de $5 \cdot 10^{-5}$ cm. La valeur du pic en pression est de $p_{ZND} \simeq 11.9 \cdot 10^6$ (cette valeur a été obtenue par le calcul numérique).

Nos différents calculs ont été effectués sur un maillage équidistant de 100 points; on note Δx le pas spatial du maillage. On prend $x_0 = 80\Delta x$. Pour suivre le front de détonation durant le calcul (celui-ci se déplace de la gauche vers la droite, c'est à dire des gaz brûlés vers les gaz frais), on élimine le point le plus à gauche que l'on ajoute à droite de façon à garder le front de détonation à l'abscisse x_0 initialement choisi.

Tous les calculs de détonation présentés dans cette partie et la suivante ont été réalisés avec le flux numérique de Roe.

III.4.2 Comparaison des schémas

Dans un premier temps on prend $\Delta x = 5 \cdot 10^{-6}$, on a approximativement 10 points dans la zone de réaction. Contrairement à Ben-Artzi qui ne présente des résultats que pour un pas de temps, on souhaite déterminer l'influence du pas de temps sur la solution obtenue. On note μ le CFL Euler et ν le CFL chimique. Pour ce cas test, aucune différence notable sur la vitesse de propagation du front de détonation n'a été constatée; la valeur trouvée est très proche de la valeur prédite par la théorie de Chapman-Jouguet. Par contre, sur le pic en pression on observe des différences notables qui caractérisent en fait la diffusion numérique du schéma.

Notons par:

- SC le schéma couplé (57),
- PF le schéma à pas fractionnaires (60),
- SCD le schéma couplé utilisant un décentrage du terme source suivant le CFL convectif par point (76),
- SPE le schéma à pas fractionnaires résolvant le terme source par une solution exponentielle (64).

On a représenté dans les tableaux ci-dessous, la moyenne temporelle du pic de pression obtenue pour les différents schémas à l'état stationnaire. Les oscillations des variables que l'on observe dans la zone de réaction sont au plus de l'ordre de 5% pour la pression et justifient la notation de "valeur moyenne". Ces variations s'estompent si l'on prend un plus grand nombre de points dans la zone de réaction, c'est à dire si l'on baisse le CFL chimique.

μ	ν	SC	PF	SCD	SPE
0.1	0.026	8.14	8.08	8.12	8.09
0.3	0.08	8.59	8.39	8.59	8.44
0.5	0.134	9.02	8.67	9.02	8.75
0.7	0.187	9.54	9.06	9.55	9.15
0.9	0.24	10.3	9.48	10.2	9.60

Comparaison des schémas numériques précis à l'ordre 1 pour différents pas de temps.
Valeur du pic de pression $\times 10^{-6}$ pour les différents schémas

μ	ν	SC	PF	SCD	SPE
0.1	0.026	9.03	9.02	9.06	9.02
0.3	0.08	9.15	9.16	9.30	9.16
0.5	0.134	9.40	9.34	9.65	9.34
0.7	0.187	9.60	9.57	10.4	9.57
0.9	0.24	9.87	9.87	10.6	9.86

Comparaison des schémas numériques précis à l'ordre 2 pour différents pas de temps.
Valeur du pic de pression $\times 10^{-6}$ pour les différents schémas.

L'analyse de ces résultats numériques montre qu'à l'ordre deux, mis à part le schéma SCD les différents schémas sont équivalents. On met aussi en évidence comme le montrent les équations équivalentes que la diffusion numérique est inversement proportionnelle au CFL Euler. On a représenté figure III.1 la solution obtenue à l'ordre deux pour le schéma couplé et pour $\mu = .7$. Les oscillations qui apparaissent sont dues aux variations des variables dans la zones de réaction. Elles se rencontrent sur tous les schémas et sont proportionnelles au CFL chimique. On retrouve dans les résultats présentés par Ben-Artzi des oscillations similaires qu'il attribue à des problèmes de conditions aux limites sur le bord du domaine. Des calculs effectués dans des domaines de grande taille ne confirment pas cette explication.

En ce qui concerne le schéma SCD, on constate que les résultats qu'il donne pour les petits pas de temps sont très proches de ceux fournis par le schéma SC. En fait, la faible valeur du CFL convectif justifie ce résultat. Pour des pas de temps plus grands, les différences s'accroissent. Bien que donnant les meilleurs résultats sur ce cas test, puisque plus proches de la solution ZND, ce schéma s'est avéré moins bon que le schéma SC pour le calcul d'une instabilité.

Les résultats à l'ordre 1 présentent quant à eux plusieurs particularités qui méritent d'être discutées.

Diffusion numérique du schéma couplé

On constate que le schéma couplé d'ordre 1 est moins diffusif que le schéma d'ordre deux. L'analyse des différents termes dans l'équation équivalente de ce schéma (équation (69))

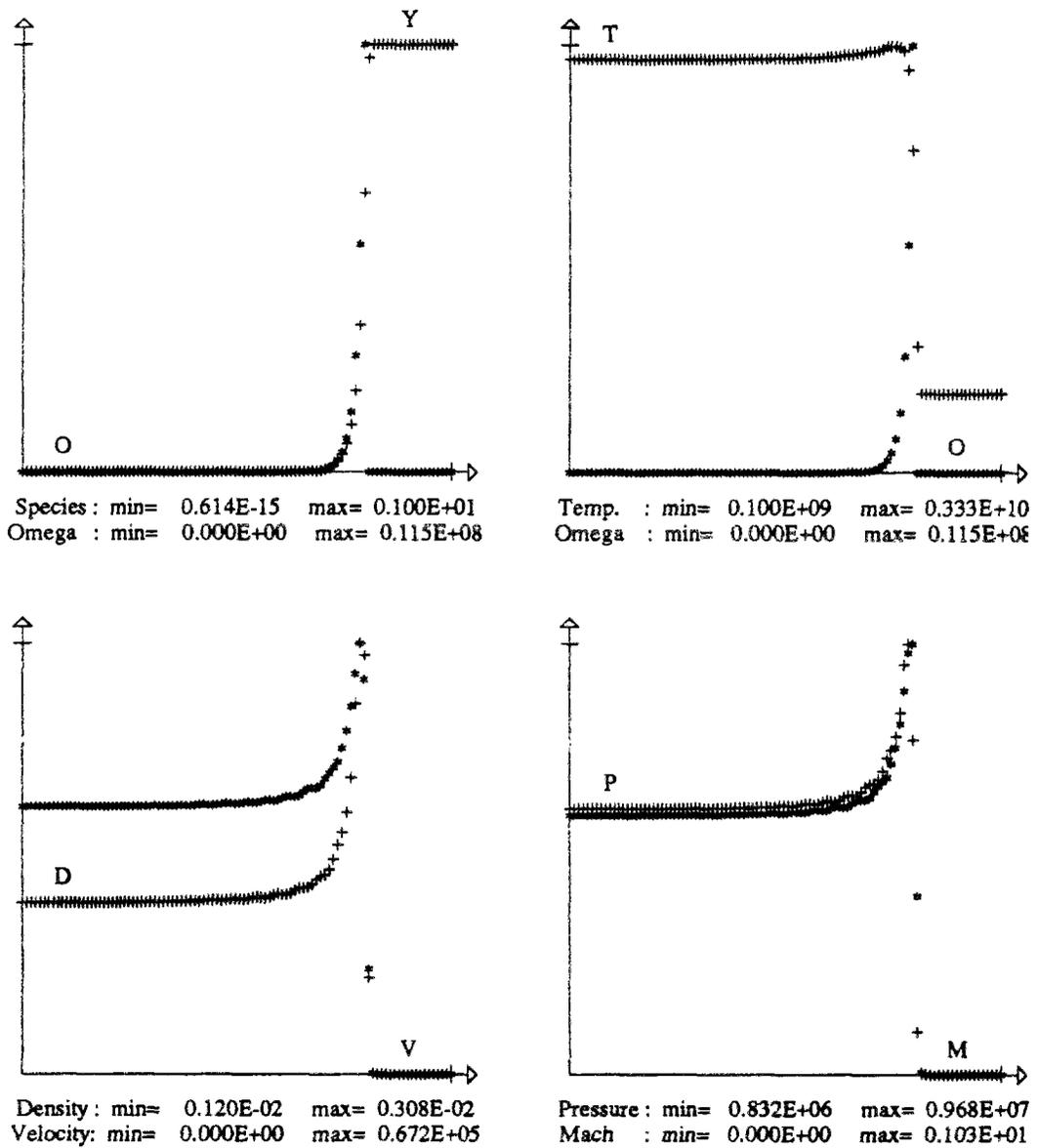


Figure III.1 : Solution obtenue par le schéma SC à l'ordre 2 pour $\mu = .7$

montre la présence de deux termes diffusifs d'ordre 1.

$$-cu_x \Delta t s'(u) + \frac{c\Delta t}{2} u_{xx} \left(1 - \frac{c\Delta t}{\Delta x}\right).$$

En fait le premier de ces deux termes qui est proportionnel au CFL chimique, a pour effet de réduire la largeur de la zone de réaction. Ce même terme devient prépondérant pour des valeurs de $\mu = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$ proche de 1 et justifie les résultats obtenus. A l'ordre deux, ce terme disparaît et on retrouve des résultats "standards". Pour valider cette hypothèse, il suffit de tracer la différence de la pression en fonction de ν pour le schéma SC et le schéma PF. Le tracé, non présenté ici, met en évidence une évolution linéaire (i.e proportionnelle à ν) comme le laisse prévoir l'analyse à partir des équations équivalentes.

Comportement du schéma SCD

Pour ce schéma, on peut globalement faire les mêmes remarques qu'à l'ordre deux. Une version a été implémenté (à l'ordre 1) en utilisant un décentrage constant. Dans ce cas et conformément à l'analyse à partir des équations équivalentes, on obtient des résultats comparables à ceux du schéma PF.

Schémas à pas fractionnaires: Traitement du terme source

La comparaison schéma PF - schéma SPE met en évidence que ce dernier donne à l'ordre 1 de meilleurs résultats alors qu'à l'ordre deux les solutions obtenues sont comparables. Ce résultat provient du fait que la résolution du terme source par une solution du type exponentiel est d'ordre infini tandis que la résolution par le schéma PF est d'ordre 1. Pour mieux expliciter ceci, comparons les solutions obtenues sur une équation modèle.

Considérons l'intégration de l'équation $u_t = -\lambda u$, équation qui correspond à la deuxième étape du schéma à pas fractionnaires.

La résolution par une solution exacte de type exponentiel fournit:

$$u_i^{n+1} = u_i^n \exp(-a\Delta t).$$

Pour $a\Delta t$ petit, comme c'est le cas dans notre expérience numérique, on obtient après développement limité:

$$u_i^{n+1} = u_i^n \left(1 - a\Delta t + \frac{a^2 \Delta t^2}{2}\right) + O(a\Delta t)^3$$

La résolution par le schéma explicite d'ordre 1 conduit à:

$$u_i^{n+1} = u_i^n (1 - a\Delta t).$$

Considérons maintenant le schéma d'ordre deux obtenu par prédicteur correcteur. La solution s'écrit:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a\Delta t u_i^n \left(1 - \frac{a\Delta t}{2}\right),$$

on constate que cette dernière équation est identique à celle obtenue par résolution exacte (à l'ordre deux). Il n'est donc pas surprenant qu'à l'ordre 1 le schéma SPE soit supérieur au schéma PF et qu'à l'ordre deux ces mêmes schémas donnent des résultats comparables puisque le CFL chimique reste petit.

Pour un modèle de combustion à énergie d'activation finie, pour lequel $f(T)$ évolue au cours du temps, montrons que le schéma à pas fractionnaires PF d'ordre deux est préférable au schéma SPE. Pour cela, on considère le modèle non linéaire $u_t = -auf(u)$ avec $f(u) = 1 - u$. La résolution par le schéma SPE conduit au résultat suivant (à l'ordre 2):

$$u_i^{n+1} = u_i^n \left(1 - a\Delta t + \frac{a^2 \Delta t^2}{2}\right) + a\Delta t u_i^n (1 - a\Delta t) + (u_i^n)^2 \frac{a^2 \Delta t^2}{2}$$

On peut alors montrer que le schéma à pas fractionnaires d'ordre deux donne le même résultat (à l'ordre deux) que la résolution exacte:

$$u_i^{n+1} = u_i^n \left(1 - a\Delta t + \frac{a^2 \Delta t^2}{2}\right) + a\Delta t u_i^n \left(1 - \frac{3}{2}a\Delta t\right) + (u_i^n)^2 a^2 \Delta t^2.$$

Par utilisation du schéma SPE on commet une erreur d'ordre deux. Ce calcul très simple valide pour une approche par pas fractionnaires le schéma (65). Bien évidemment ces calculs ne sont valables que dans la limite où le CFL chimique est petit.

III.4.3 Analyse des solutions non physiques

Pour le cas test précédent, où le nombre de points dans la zone de réaction est de l'ordre de 10, les résultats que l'on obtient sont tout à fait conformes à ceux de Ben-Artzi [6] ou à ceux de Colella et al [19] (qui utilisent un schéma de Godunov du second ordre pour la partie Euler et une résolution exacte pour le terme source). Si on réduit le nombre de points dans la zone de réaction, on obtient des solutions non physiques constituées d'un choc purement Euler suivi d'un choc réactif dont la vitesse peut atteindre une maille par itération. Pour $\Delta x = 5 \cdot 10^{-5}$, c'est à dire pour un pas spatial de l'ordre de la largeur de la zone de réaction, on a réalisé deux calculs avec le schéma SPE pour deux valeurs différentes du pas de temps. Le premier pour $\mu = 0.4$, conduit à une solution non physique avec un choc réactif dont la vitesse correspond à la traversée d'une maille en deux itérations. Le second pour $\mu = 0.6$ donne le même type de solution mais la vitesse du choc réactif est d'une maille par itération. On a représenté figure III.2 ci-après, la solution que l'on obtient pour le second cas.

Quelque soient les pas de temps considérés et pour tous les schémas, on obtient le même genre de solution. Simplement la vitesse du choc réactif dépend du pas de temps considéré et cette vitesse n'excède jamais la vitesse d'une maille par itération. Pour des pas spatiaux très peu différents de celui que nous avons utilisé, les auteurs précités obtiennent aussi ce genre de solution.

En fait ces solutions non physiques apparaissent toujours lorsque le nombre de points dans la zone de réaction est voisin de ou inférieur à 1. Dans ce cas le schéma introduit une

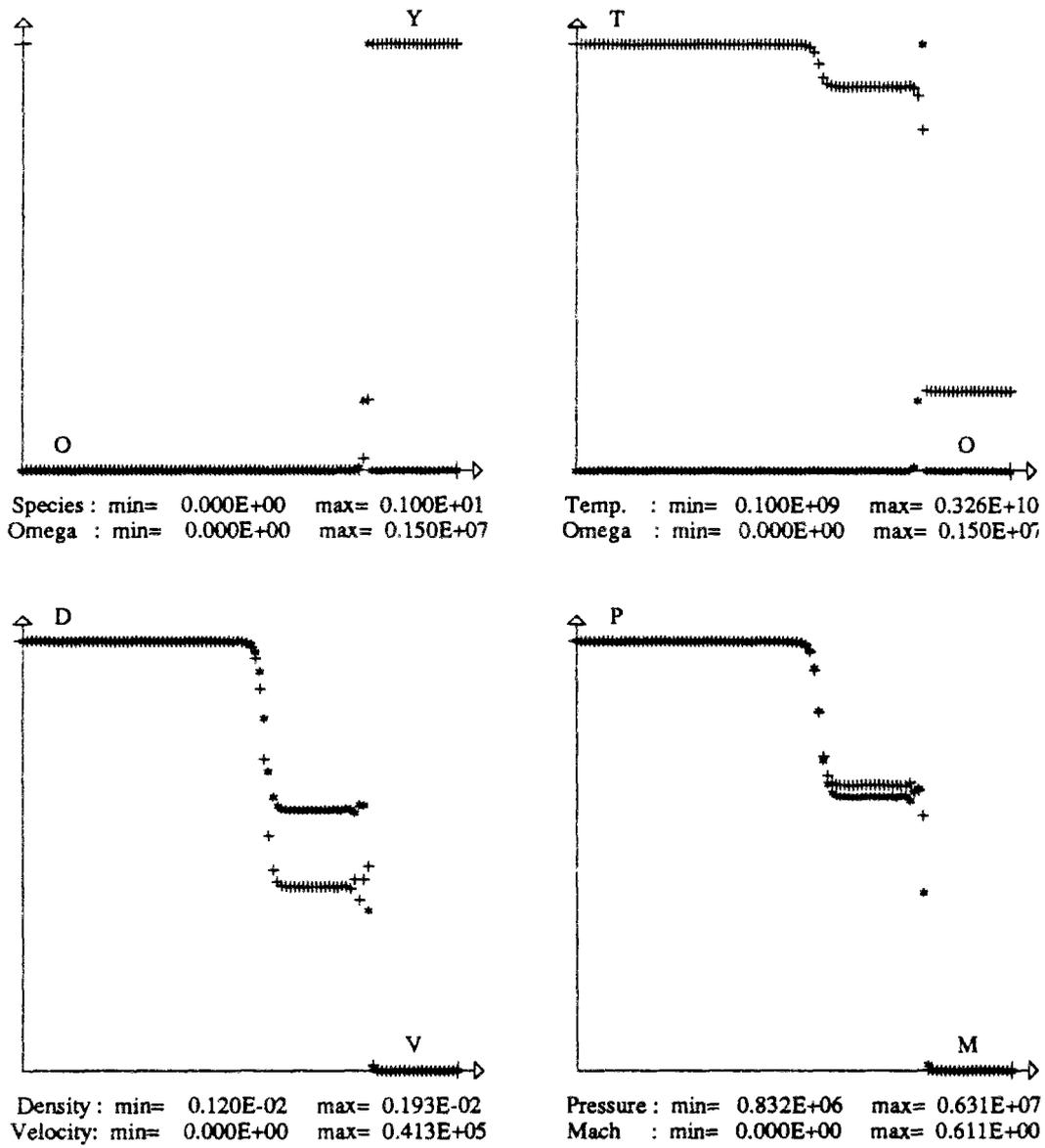


Figure III.2 : Solution obtenue par le schéma SPE à l'ordre 2 pour $\mu = .6$, $\nu = 1.6$. Vitesse du front = vitesse de maille

diffusion numérique très importante. Or la détonation faible est une solution physique des équations de Navier-Stokes pour des paramètres de diffusion importants [71]. Il semble bien que les solutions que l'on obtient soient une combinaison de ces deux phénomènes et pour une raison que nous allons expliciter le choc réactif est instable et se convecte alors à une vitesse fautive. Ceci semble aussi confirmé par les résultats de Colella et al [19] qui présentent un résultat obtenu par la méthode RCM (Random Choice Method) pour lequel on prédit bien le pic de détonation (puisque cette méthode est très peu diffusive).

Intéressons nous maintenant au choc réactif. Pour cela on reprend le modèle non linéaire qui a servi à établir les équations équivalentes. Ce modèle est parfaitement adapté pour l'étude du choc réactif qui nous intéresse. On considère dans cette partie les deux schémas explicites notés SC et PF. Pour comparer la vitesse de flamme fournie par ces deux schémas, nous présentons les résultats numériques issus de deux calculs. La condition initiale est définie par:

$$u(x, 0) = 0 \text{ pour } x < x_0 \text{ et } u(x, 0) = 1 \text{ sinon.}$$

On prend $c = 1$ et on impose dans chacune des expériences le rapport ν/μ (qui traduit la raideur du problème). Les résultats sont précis à l'ordre 2 en temps et en espace. Dans les tableaux ci-dessous, on a représenté en plus de la vitesse due au terme source ($V^S = \int_D s(u) dx$), le produit de la vitesse du front par le CFL Euler. Ce dernier terme représente la portion de la maille parcourue pendant un pas de temps par le fluide.

μ	ν	V_{sc}^S	V_{pf}^S	$\Delta t/\Delta x(1 + V_{sc}^S)$	$\Delta t/\Delta x(1 + V_{sc}^S)$
0.1	0.01	0.218	0.219	0.122	0.122
0.3	0.03	0.202	0.205	0.360	0.361
0.5	0.05	0.176	0.183	0.588	0.591
0.7	0.07	0.429	0.429	1	1
0.9	0.09	0.112	0.111	1	1
0.95	0.095	0.047	0.052	.99	1

Vitesse de flamme obtenue par le schéma couplé et par le schéma à pas fractionnaires pour $\mu/\nu = 10$

μ	ν	V_{sc}^S	V_{pf}^S	$\Delta t/\Delta x(c + V_{sc}^S)$	$\Delta t/\Delta x(1 + V_{sc}^S)$
0.1	0.001	0.046	0.046	0.104	0.104
0.5	0.005	0.04	0.04	0.52	0.52
0.9	0.009	0.112	0.111	1	1

Vitesse de flamme obtenue par le schéma couplé et par le schéma à pas fractionnaires pour $\mu/\nu = 100$

On constate que pour des valeurs de μ importantes, c'est à dire lorsque la diffusion numérique du schéma est réduite, la vitesse du front peut atteindre la vitesse d'une maille par itération; pour μ proche de l'unité ceci reste vrai, même si l'on réduit la valeur de

ν . Par contre cette vitesse n'excède jamais la vitesse d'une maille par itération. Lorsque ce phénomène se produit (voir figure ci-dessous), on observe la bifurcation d'une solution instable vers une solution stable.

Ce type de comportement est tout à fait conforme à celui que nous avons rencontré sur le modèle complet. Le modèle que nous utilisons, associé à une solution initiale avec choc permet de justifier la présence de ces solutions dont la vitesse de propagation est d'une maille par itération.

Montrons tout d'abord que la solution de l'équation $u_t + cu_x = -au(1 - u)$ avec comme condition initiale $u(x, 0) = 0$ si $x < x_0$ et $u(x, 0) = 1$ sinon et vérifiant $V = c$ est instable. On note $u_0(x) = u(x, 0)$, il est immédiat que la solution qui nous intéresse s'écrit $u(x, t) = u_0(x - ct)$ (la condition initiale est convectée à la vitesse c). Pour étudier la stabilité linéaire, on perturbe la solution u_0 :

$$u(x, t) = u_0(x - ct) + \epsilon \hat{u}(x) \exp(\lambda t),$$

où ϵ est un petit paramètre. On cherche alors une fonction \hat{u} bornée en x et le complexe λ . Le signe de la partie réelle de λ permet de déterminer la stabilité; si $\mathcal{R}(\lambda) > 0$ la perturbation croît de façon exponentielle en fonction du temps et la solution u_0 est instable. Si par contre on trouve $\mathcal{R}(\lambda)$ négatif, la perturbation est atténuée et la solution est stable. L'équation différentielle à résoudre devient (on néglige les termes en ϵ^2):

$$c\hat{u}_x(x) = [-\lambda - a(1 - 2u_0(x - ct))]\hat{u}(x)$$

Cette équation s'intègre directement.

Pour $x < ct$, $\hat{u}(x) = \alpha_1 \exp(-\frac{\lambda+a}{c}x)$. La solution ainsi définie est bornée en $-\infty$ si $\mathcal{R}(\lambda) < -a$. Pour $x > ct$, $\hat{u}(x) = \alpha_2 \exp(-\frac{\lambda-a}{c}x)$. La solution ainsi définie est bornée en $+\infty$ si $\mathcal{R}(\lambda) > a$. On voit que la solution \hat{u} avec $\alpha_1 = 0$ et $\mathcal{R}(\lambda) > a$ est bornée en x et assure une croissance exponentielle en temps. Par conséquent, la solution u_0 est instable.

Montrons maintenant que toutes les solutions pseudo-stationnaires de $u_t + cu_x = -au(1 - u)$ sont instables. On cherche dans un premier temps ces solutions sous la forme $u(x, t) = u(x + kt) = u(y)$. L'intégration directe donne:

$$u(y) = \frac{K \exp(\frac{-a}{k+c}y)}{1 + K \exp(\frac{-a}{k+c}y)},$$

avec K réel positif. Pour montrer que ces solutions sont instables, on effectue tout d'abord le changement de variable $y = x + kt$ et $\tau = t$ (on se place dans un repère associé au front). On cherche alors \hat{u} et λ telle que:

$$u(y, \tau) = u(y) + \epsilon \hat{u}(y) \exp(\lambda \tau).$$

L'équation différentielle à résoudre est:

$$(k + c)\hat{u}(y) = [-\lambda - a(1 - 2u(y))]\hat{u}(y).$$

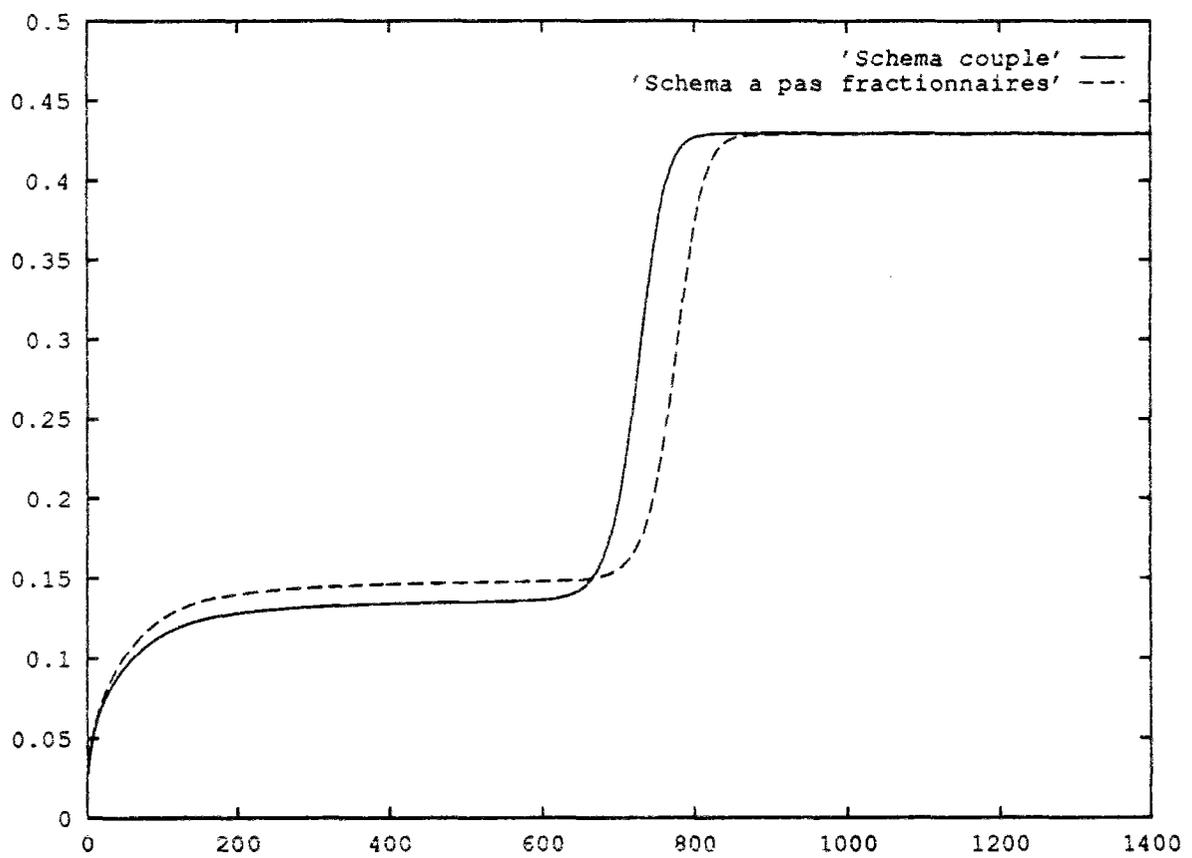


Figure III.3 : Evolution de la vitesse de flamme pour $\mu = 0.7$ et $\nu = 0.07$ en fonction du nombre d'itérations.

Après intégration, on obtient

$$\hat{u}(y) = \alpha \exp\left[\frac{-\lambda}{k+c}y - \frac{a}{k+c}y - 2\text{Log}\left(1 + K\exp\left(\frac{-a}{k+c}y\right)\right)\right].$$

En fait la seule solution physiquement acceptable impose $k + c < 0$, c'est à dire que la convection ne peut pas se faire (pour c et a positifs) avec augmentation de la variable u . La fonction \hat{u} s'écrit:

Pour $y \rightarrow -\infty$:

$$\hat{u}(y) \simeq \alpha \exp\left[-\frac{\lambda+a}{k+c}y\right].$$

Pour $y \rightarrow +\infty$:

$$\hat{u}(y) \simeq \alpha \exp\left[-\frac{\lambda-a}{k+c}y\right].$$

Il est immédiat que la solution $\hat{u}(y)$ sera bornée pour $-a < \mathcal{R}(\lambda) < a$. La présence de $\mathcal{R}(\lambda) > 0$ dans cette famille de solution permet de conclure, il n'existe pas de solution pseudo-stationnaire solution de l'équation $u_t + cu_x = -au(1-u)$.

L'étude précédente montre qu'en l'absence de diffusion, il n'existe pas de solution physiquement stable se déplaçant à vitesse constante (bornée). Cela signifie que le front de détonation discret va avoir tendance à se déplacer avec la plus grande vitesse numériquement possible.

Pour conclure, montrons maintenant que pour l'équation considérée, les schémas explicites ne peuvent pas fournir une vitesse de flamme supérieure à la vitesse d'une maille par itération.

Schéma à pas fractionnaires:

On considère donc l'équation modèle avec c et a positifs:

$$u_t + cu_x = -au(1-u),$$

avec la condition initiale: $u(x,0) = 0$ si $x < x_0$ et $u(x,0) = 1$ sinon. On obtient pour la solution discrétisée (on pose $\nu = a\Delta t$ et $\mu = c\Delta t/\Delta x$):

$$\begin{aligned} u_i^* &= u_i^n + \mu(u_{i-1}^n - u_i^n), \\ u_i^{n+1} &= u_i^*(1 - \nu(1 - u_i^*)), \end{aligned}$$

avec la condition initiale:

$$u_i^0 = 0 \text{ si } i < i_0 \text{ et } u_i^0 = 1 \text{ sinon.}$$

Une condition suffisante pour que la vitesse de flamme soit inférieure à la vitesse d'une maille par itération s'écrit alors (compte tenu des signes de c et a):

$$\forall i, u_i^{n+1} \geq u_{i-1}^n \tag{82}$$

Tout en restant dans le domaine de stabilité, u_i^{n+1} sera minimum pour $\nu = 1$, le minimum de la solution à l'étape $n + 1$ s'écrit:

$$u_i^{n+1} = [(1 - \mu)u_i^n + \mu u_{i-1}^n]^2$$

Montrons maintenant par récurrence que la relation (82) est toujours vérifiée.

On vérifie que pour $n = 0$ on a bien $[(1 - \mu)u_i^0 + \mu u_{i-1}^0]^2 \geq u_{i-1}^0$, on suppose alors cette relation vraie à l'ordre n , démontrons qu'elle reste vraie à l'ordre $n + 1$.

$$u_i^{n+2} = [(1 - \mu)u_i^{n+1} + \mu u_{i-1}^{n+1}]^2.$$

Après majoration, compte tenu de l'hypothèse de récurrence:

$$u_i^{n+2} \geq [(1 - \mu)u_{i-1}^n + \mu u_{i-2}^n]^2 = u_{i-1}^{n+1},$$

ce qui achève la démonstration.

Schéma couplé:

Avec les mêmes hypothèses que précédemment, la solution à l'étape $n + 1$ s'écrit:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \mu(u_{i-1}^n - u_i^n) - \nu u_i^n(1 - u_i^n),$$

cette solution sera minimum pour ν maximum, c'est à dire pour $\nu = 1 - \mu$ (voir analyse de stabilité). La solution s'écrit alors après simplification:

$$u_i^{n+1} = (1 - \mu)(u_i^n)^2 + \mu u_{i-1}^n$$

la relation (82), traduisant que la vitesse du front est inférieure à la vitesse d'une maille par itération, s'écrit simplement $(u_i^n)^2 \geq u_{i-1}^n$. On vérifie que cette dernière relation est vraie pour $n = 0$, on la suppose vraie à l'ordre n . Montrons qu'elle est aussi vraie à l'ordre $n + 1$.

$$(u_i^{n+1})^2 = [(1 - \mu)(u_i^n)^2 + \mu u_{i-1}^n]^2,$$

On utilise la relation de récurrence:

$$(u_i^{n+1})^2 \geq (u_{i-1}^n)^2 \geq (1 - \mu)(u_{i-1}^n)^2 + \mu u_{i-2}^n = u_{i-1}^{n+1},$$

et donc de même que pour le schéma à pas fractionnaires, le schéma couplé ne peut pas donner une vitesse de front supérieure à la vitesse d'une maille par itération.

Remarques:

Lorsque la bifurcation numérique s'observe, elle ne se déplace pas forcément à la vitesse d'une maille par itération (comme c'est le cas pour le modèle complet), dans certains cas on a observé des solutions pour lesquelles la traversée d'une maille se fait en un nombre entier d'itérations. Ces solutions numériquement stables sont dues à la diffusion numérique du schéma. Simplement et pour conclure la vitesse limite, d'une maille par itération, s'obtient nécessairement si le CFL convectif est supérieur à 0.5; puisqu'alors la convection seule déplace le front d'une demi-maille (ce qui apparaît clairement sur les résultats numériques présentés ci-dessus).

III.4.4 Conclusions

Cette première étude numérique montre que pour obtenir des solutions physiques et précises, il est nécessaire d'avoir un grand nombre de point dans la zone de réaction. Le calcul précédent, qui comporte 10 points dans la zone de réaction, permet d'obtenir en moyenne la bonne vitesse du front de détonation à 1 ou 2%. Par contre en ce qui concerne la pression, où plus exactement toutes les variables qui présentent un pic, la valeur moyenne obtenue est à peu près 20% plus faibles que la valeur exacte. Même si on se limite à 10 points dans la zone de réaction, le pas de temps chimique est moins contraignant que le pas de temps Euler et à l'ordre deux tous les schémas que l'on a considérés donnent des solutions équivalentes. Les résultats obtenus à l'ordre 1 mettent en évidence des différences beaucoup plus importantes. Par utilisation des équations équivalentes, on a pu en partie justifier ces différences et mieux comprendre le couplage entre la convection et la chimie.

III.5 ETUDE NUMERIQUE DES ONDES DE DETONATIONS INSTABLES

III.5.1 Introduction

L'étude précédente portait sur un cas test de détonation stable. On souhaite maintenant étudier un problème légèrement différent portant sur un cas test de détonation instable. Compte tenu des résultats précédents, on se limite dans cette partie au schéma explicite couplé d'ordre 1 et 2.

III.5.2 Présentation du cas test

Le cas test que nous utilisons ici est celui utilisé par Bourlioux et al [10]. Il correspond à une détonation pilotée pour laquelle le degré de pilotage $f = 1.6$ (rappelons à ce sujet que $f = (D/D_{CJ})^2$, où D est la vitesse du front de détonation). Dans ce type de détonation, l'état du fluide dans les gaz brûlés conditionne la valeur de la vitesse D . Le modèle de combustion utilisé est le modèle d'Arrhenius. Les différentes constantes apparaissant dans les équations de fermeture valent:

$$\gamma = 1.2, \epsilon_a = 50, Q = 50, \mathcal{K} = 231.16$$

Le préfacteur d'Arrhénius \mathcal{K} est déterminé de façon que la demi largeur de réaction $L_{1/2}$ soit égale à 1 (i.e $L_{1/2}$ est la distance nécessaire pour que la fraction massique des gaz frais passe de 1 à 0.5). Le demi temps de réaction est alors de $t_{1/2} = 0.891$. L'état du fluide dans les gaz frais est:

$$(\rho, u, p, Y) = (1, 0, 1, 1)$$

On choisit alors comme condition initiale la solution ZND correspondante. Cette solution est présentée au chapitre 1 figure I.6.

La valeur du pic en pression est alors de $p = 67.35$ (la pression des gaz brûlés fournie par la théorie de Chapman-Jouguet est de $p = 54.35$). En suivant l'analyse de stabilité linéaire d'Erpenbeck qui est rappelée dans [10], on montre que cette solution ZND possède un mode complexe instable. Cette instabilité se manifeste par une oscillation périodique des variables autour de la solution ZND. Le maximum de la pression est alors voisin de $p = 101$, soit un accroissement de la pression de 50%.

III.5.3 Résultats numériques

On choisit pour cette étude le schéma couplé et on présente les résultats à l'ordre 2 pour trois pas spatiaux. On prendra en effet $\Delta x = L_{1/2}/2$, $\Delta x = L_{1/2}/5$ et enfin $\Delta x = L_{1/2}/10$.

On présente la solution jusqu'au temps $T = 50$. Le maillage le plus fin comporte alors près de 5000 points tandis que le plus grossier comporte 1000 points. Enfin on définit le pas de temps tel que le nombre de Courant (CFL Euler) soit de 0.5.

On présente aussi deux résultats à l'ordre 1 (un sur le maillage grossier et un sur le maillage moyen) avec un nombre de courant de 0.9; ceci afin de mesurer l'influence des termes antidiffusifs qui apparaissent dans le schéma couplé d'ordre 1.

Les résultats à l'ordre deux sont présentés figure III.4. Sur le maillage grossier ($\Delta x = L_{1/2}/2$), le schéma ne capte pas d'instabilité et la faible valeur de la pression obtenue traduit que la diffusion numérique du schéma est trop importante. Pour le maillage intermédiaire ($\Delta x = L_{1/2}/5$) on obtient bien une instabilité mais elle est considérablement atténuée puisque la pression maximale obtenue n'est que de 70 alors que l'on devrait obtenir une valeur voisine de 100. Le calcul sur le maillage le plus fin, c'est à dire avec 10 points dans la demi largeur de réaction, est très satisfaisant. On observe bien une instabilité périodique, la valeur de la pression ($p=95$) est très proche de la valeur attendue; l'écart n'est que de 5%.

Le même calcul effectué à l'ordre 1 est présenté figure III.5. La solution sur le maillage fin, bien que ne décelant pas d'instabilité, est moins diffusée que celle obtenue à l'ordre deux. En effet la faible diffusion numérique de ce schéma permet d'obtenir une pression très proche de celle prévue par la théorie ZND. Par contre sur le maillage intermédiaire, et contrairement au calcul à l'ordre deux, on ne capte pas d'instabilité. Ici encore, on retrouve une pression voisine de p_{ZND} . Le calcul sur maillage fin, non présenté ici, donne une solution semblable à celle obtenue pour l'ordre deux, mais avec un niveau de pression considérablement atténué.

Cette comparaison entre l'ordre 1 et l'ordre 2 met en évidence que la capture de l'instabilité ne dépend pas uniquement de l'erreur de diffusion du schéma numérique. L'erreur dispersive semble jouer un rôle essentiel dans la formation de cette instabilité. Cette remarque est confirmée si l'on effectue une comparaison entre nos résultats (à l'ordre deux) et ceux présentés dans [10] qui utilisent un schéma d'ordre trois (méthode PPM: piecewise-parabolic method). Sur le maillage grossier les résultats sont comparables. Par contre pour le maillage fin, les résultats qu'ils présentent sont légèrement meilleurs que les nôtres.

III.5.4 Conclusions

Cette étude sur un cas test de détonation instable met en évidence que l'utilisation d'un maillage fin associé à un schéma numérique d'ordre élevé semblent constituer le minimum pour le calcul de ce type d'écoulement. Bien évidemment, les résultats que l'on présente auraient pu être améliorés par utilisation de limiteurs moins diffusifs pour les calculs à l'ordre deux, mais cela ne devrait pas changer les conclusions précédentes.

Le calcul monodimensionnel à 5000 points ne peut bien évidemment pas s'étendre tel quel à un calcul bi- ou tri- dimensionnel, cela conduirait à des temps de calcul inacceptables. Une procédure de raffinement local du maillage semble alors la meilleure solution comme cela est fait par Bourlioux et al [10]. En plus de cette adaptation, ils utilisent une méthode de capture du front de détonation. Les travaux présentés dans ce chapitre se poursuivent actuellement pour résoudre ces différents problèmes.

III.6 CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Le travail présenté dans ce chapitre constitue les premières études de détonation à L'INRIA. En plus d'une meilleure compréhension du phénomène physique (voir chapitre 1), on s'est intéressé aux problèmes numériques qui apparaissent dans le calcul de ce type d'écoulement. On a ainsi pu justifier certains résultats surprenants comme par exemple la présence de solutions non physiques constituées d'un choc se déplaçant à la vitesse du maillage. Cette étude a montré aussi qu'il est nécessaire pour le calcul de ces écoulements de disposer de maillage très fin (à peu près 20 points dans la zone de réaction) qui rendent inévitable l'utilisation de maillage localement raffinés. Dans ces conditions, ce sont les termes convectifs qui limitent le pas de temps et on peut se poser la question de l'intérêt d'un traitement implicite de ces termes. Les études à venir vont surtout porter sur une réduction globale des temps de calcul en introduisant des méthodes d'adaptation dynamique du maillage, cette étape semble en effet essentielle si l'on souhaite faire des calculs bi- ou tridimensionnels.

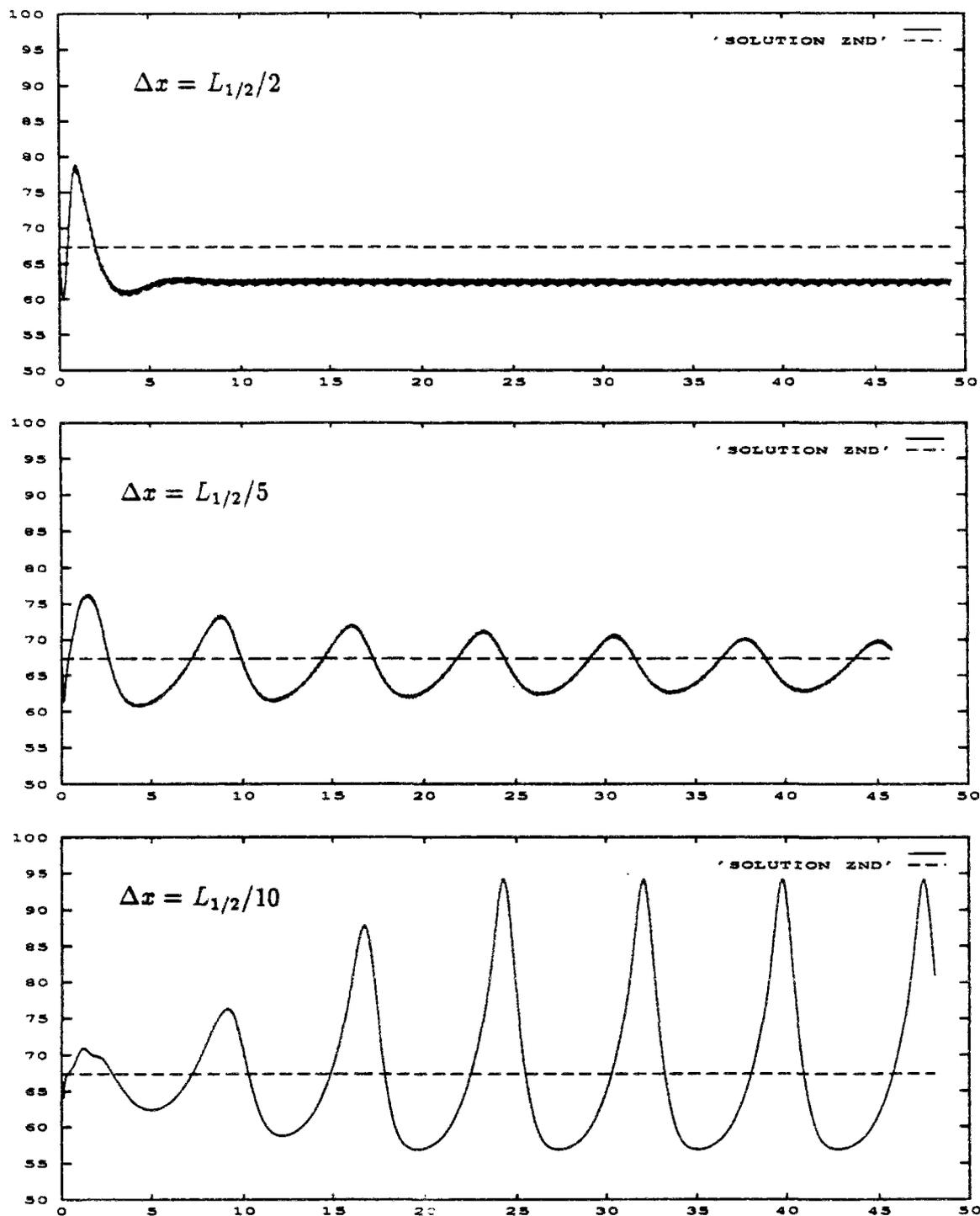


Figure III.4 : Tracé du pic en pression en fonction du temps pour trois maillages différents. Les résultats sont précis à l'ordre deux, $CFL_{Euler} = 0.5$

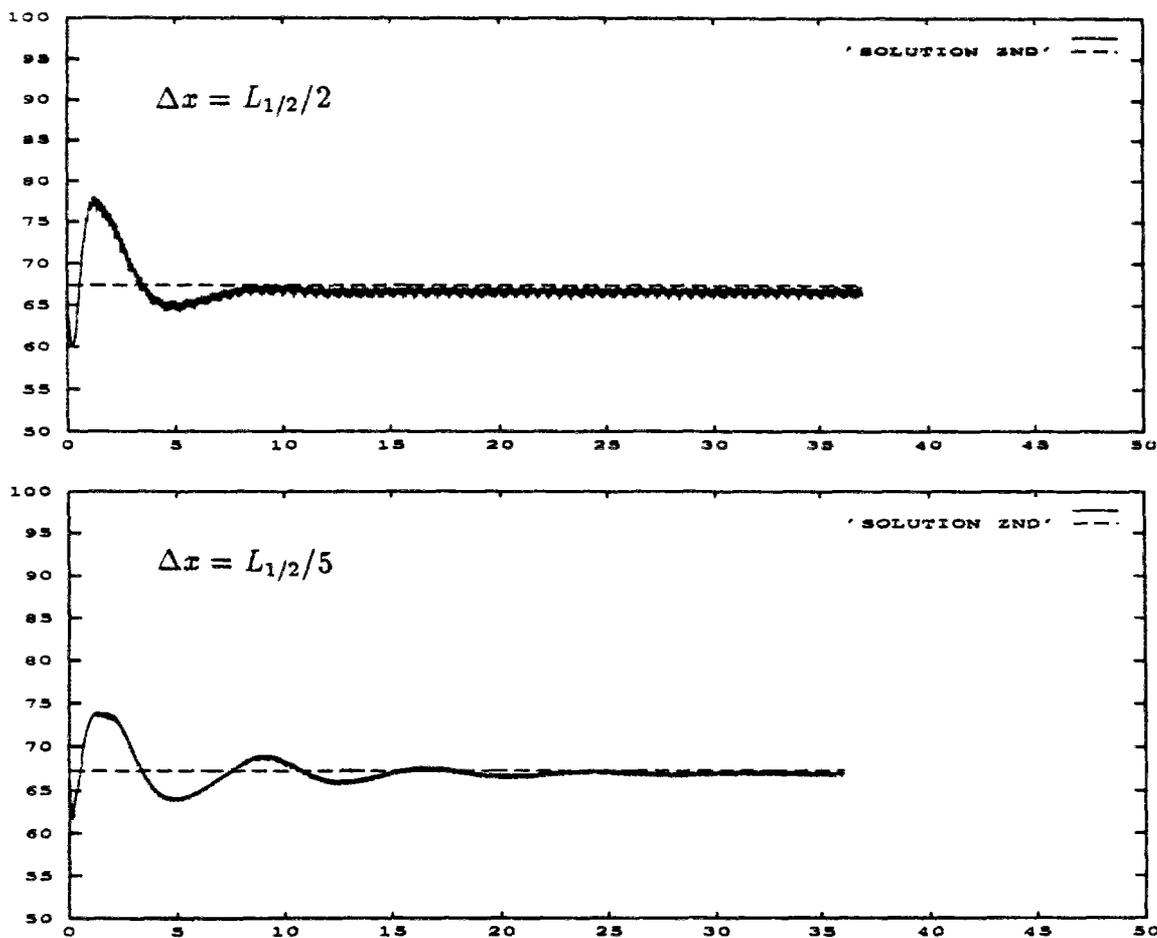


Figure III.5 : Tracé du pic en pression en fonction du temps pour deux maillages différents. Les résultats sont précis à l'ordre un, $CFL_{Euler} = 0.9$

Chapitre IV

ETUDE NUMERIQUE DE L'INTERACTION REACTIVE DE JETS GAZEUX TRANSSONIQUES

IV.1 INTRODUCTION

On s'intéresse dans ce chapitre à l'interaction réactive bidimensionnelle de jets gazeux en écoulement transsonique. Plus précisément, on étudie l'allumage d'un mélange d'hydrogène et d'oxygène à faible température (supposé en *phase gazeuse*) provoqué par un jet chaud. Etant donné que les caractéristiques physiques du jet chaud et des jets froids sont différentes, le système d'équations (3-4) défini au chapitre 1 pris avec trois espèces (une pour le jet chaud, une pour les gaz frais et une pour les gaz brûlés) est parfaitement adapté pour cette étude bidimensionnelle.

Après avoir présenté le système d'équations adimensionné qui servira de base à notre étude, on décrit en détail le schéma numérique utilisé. Etant donné que l'objectif principal est de simuler le processus instationnaire de l'allumage, on utilise un schéma explicite pour l'avancement en temps de la solution numérique.

La discrétisation spatiale est réalisée de façon mixte par volumes finis pour les termes convectifs qui constituent un système hyperbolique et par éléments finis P-1 Galerkin pour les termes diffusifs.

Les termes hyperboliques qui apparaissent dans le membre de gauche du système (3) sont résolus par une formulation décentrée construite par extension au cas multi-espèces des méthodes décentrées basées sur un solveur approché de Riemann pour les équations d'Euler [1,25,33,43]. Comme nous l'avons vu au chapitre 2, différentes approches sont envisageables pour la résolution des termes convectifs (approches appelées (A),(B) et (C)). Compte tenu des résultats obtenus dans cette étude monodimensionnelle nous rejetons définitivement l'approche (A), approche où la convection des espèces est traitée de manière découplée par un schéma Donor cell. On trouvera dans [13] des résultats bidimensionnels utilisant cette

méthode et montrant son inefficacité.

La deuxième approche (B) est construite en considérant le système complet (partie Euler et convection des espèces) comme un système non linéaire des lois de conservation et d'appliquer à ce système complet les méthodes Euler classiques. Mis à part le solveur approché de van Leer [66], les solveurs ainsi construits (Roe [57] ou Osher [52]) ne préservent pas la positivité des espèces (voir chapitre 2 ou [14]).

Aussi, on construit un schéma identique au précédent, mis à part la convection des espèces qui est traitée par un schéma dit "schéma BL" [41] (approche (C)); le schéma ainsi construit vérifie sous une condition de type CFL le principe du maximum.

Pour atteindre l'ordre 2, nous combinons la méthode des volumes finis avec une approche M.U.S.C.L (Monotonic Upstream Schemes for Conservation Laws) introduite par van Leer [68], dont le principe est d'augmenter le degré d'interpolation des solutions sans changer la formulation du flux numérique.

La stabilité des schémas numériques explicites est conditionnée par la détermination du pas de temps. Le calcul de ce pas de temps se fait sur les équations linéarisées et on obtient des critères de stabilité du type C.F.L (Courant Friedrichs Lewy). Pour la recherche d'une solution stationnaire, on peut utiliser une procédure de pas de temps local; on améliore par ce procédé la convergence de la méthode numérique.

Un problème délicat concerne le choix des conditions aux limites sur les frontières sortantes qui peut conduire dans certains cas à des solutions non physiques (dissymétrie, taille des jets non respectée,...). On présente par la suite une étude détaillée pour traiter ce problème. Pour les écoulements multi-espèces qui nous intéressent, on met en évidence que les flux numériques couramment utilisés pour les écoulements régis par les équations d'Euler ne sont plus applicables directement, du moins pour la recherche d'une solution stationnaire. On construit alors différents flux numériques de bords dont l'utilisation dépendra essentiellement de la taille du domaine de calcul.

Ces différents solveurs sont construits sur des maillages triangulaires non structurés, ce qui permet le cas échéant, d'effectuer des calculs sur des géométries complexes ou bien d'avoir recours à une adaptation statique [15] ou dynamique [50] pour capter correctement les chocs ou les zones de réaction. De plus, ces méthodes numériques présentent l'avantage de s'étendre aisément au cas tridimensionnel (voir par exemple [64]). Dans le cadre de ce travail; une procédure d'adaptation dynamique a été implémentée dans le code numérique, on montrera dans la partie concernant les résultats numériques quelques résultats illustrant les avantages de cette méthode.

IV.2 EQUATIONS

On considère un écoulement bidimensionnel réactif comportant 3 espèces A, R, P avec la réaction chimique simple:



A est chimiquement inerte.

On note:

Y_1 : fraction massique de A (produit inerte),

Y_2 : fraction massique de R (réactant),

Y_3 : fraction massique de P (produit de réaction),

avec $Y_1 + Y_2 + Y_3 = 1$.

On néglige les termes visqueux et on suppose que les masses molaires du réactant et du produit de réaction sont les mêmes: $m_2 = m_3$, ainsi que les chaleurs spécifiques à pression constante: $C_{p2} = C_{p3}$.

Par contre le produit inerte A n'a pas les mêmes caractéristiques: soient m_1 et C_{p1} sa masse molaire et sa chaleur spécifique.

Moyennant ces hypothèses, C_p , C_v et γ sont variables et dépendent des fractions massiques. La réaction chimique n'apparaît que sur l'espèce 2 (on ne résout pas d'équation de conservation pour l'espèce 3).

Les équations s'écrivent alors:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y = 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y = 0, \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y = 0, \\ e_t + [u(e + p)]_x + [v(e + p)]_y = \vec{\nabla}(\lambda \vec{\nabla} T) + Q\omega + \sum_{k=1}^{k=3} \vec{\nabla}(\rho D C_p^k T \vec{\nabla} Y_k), \\ (\rho Y_1)_t + (\rho Y_1 u)_x + (\rho Y_1 v)_y = \vec{\nabla}(\rho D \vec{\nabla} Y_1), \\ (\rho Y_2)_t + (\rho Y_2 u)_x + (\rho Y_2 v)_y = \vec{\nabla}(\rho D \vec{\nabla} Y_2) - m_2 \omega. \end{array} \right. \quad (83)$$

Où l'on a utilisé les notations classiques suivantes:

ρ est la masse volumique, u et v les composantes de la vitesse \vec{U} , p la pression du fluide, T est la température et e représente l'énergie totale par unité de volume diminuée de l'énergie de formation des espèces. De plus, λ et D représentent respectivement les coefficients de diffusion thermique et moléculaire et Q est la quantité de chaleur dégagée par unité de mole du réactant. On suppose de plus que les quantités suivantes: λ , ρD , C_p^k et C_v^k sont constantes. Enfin, on a noté ω le taux global de la réaction.

Notons $R = 8.314 J/^\circ K/mole$ la constante des gaz parfaits.

On définit alors les caractéristiques physiques du mélange de gaz parfaits:

$$C_v = \sum_{k=1}^{k=3} Y_k C_v^k \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{\sum_{k=1}^{k=3} \gamma_k Y_k C_v^k}{\sum_{k=1}^{k=3} Y_k C_v^k}.$$

p_k la pression partielle s'exprime en fonction de γ_k et de C_v^k .

$$p_k = Y_k(\gamma_k - 1)C_v^k \rho T = \frac{\rho Y_k R T}{m_k}, \quad C_v^k = \frac{R}{m_k(\gamma_k - 1)}$$

Alors les équations de fermeture du système (83) s'écrivent:

$$\begin{cases} p = (\gamma - 1)\rho C_v T, \\ e = \rho C_v T + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2), \\ \omega = \frac{\mathcal{B}\rho Y_2}{m_2} \exp\left(\frac{-\epsilon_n}{RT}\right), \end{cases} \quad (84)$$

avec \mathcal{B} le préfacteur de la loi d'Arrhenius et ϵ_n énergie d'activation.

A ce système d'équations, on associe des conditions initiales et des conditions limites.

Adimensionnement

D'un point de vue pratique, la résolution d'un tel système se fait sur des équations adimensionnées afin de mettre en évidence les différentes échelles de grandeur. Pour adimensionner ces équations, on introduit des grandeurs de référence (indiquées par $_0$).

ρ_0 : masse volumique

t_0 : temps

l_0 : longueur

$v_0 = \frac{l_0}{t_0}$: vitesse

$p_0 = \rho_0 v_0^2$: pression

$e_0 = p_0$: énergie par unité de volume

T_0 : température

Y_0 : fraction massique

.....etc

Cela revient à poser $\rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}$, $p^* = \frac{p}{p_0}$, (les quantités * étant sans dimension), et à les reporter dans les systèmes (83) et (84).

On obtient alors (on supprime la notation *):

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y = 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y = 0, \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y = 0, \\ e_t + [u(e+p)]_x + [v(e+p)]_y = D_T \Delta T + \mathcal{Q}\Omega + D_{TY} \sum_{k=1}^{k=3} \vec{\nabla} \cdot (C_p^k T \vec{\nabla} Y_k), \\ (\rho Y_1)_t + (\rho Y_1 u)_x + (\rho Y_1 v)_y = D_Y \Delta Y_1, \\ (\rho Y_2)_t + (\rho Y_2 u)_x + (\rho Y_2 v)_y = D_Y \Delta Y_2 - \Omega. \end{array} \right. \quad (85)$$

Avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} p = \frac{(\gamma - 1)\rho C_v T}{Ma^2(\gamma_2 - 1)\gamma_2 C_{v2}}, \\ e = \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) + \frac{p}{\gamma - 1}, \\ \Omega = \mathcal{A}\rho Y_2 \exp\left(\frac{-\varepsilon_a}{T}\right) \end{array} \right. \quad (86)$$

et:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_T = \frac{1}{Ma^2 \tilde{P}R (\gamma_2 - 1) Y_0}, \\ D_{TY} = \frac{\tilde{L}e \tilde{P}R Ma^2 (\gamma_2 - 1) C_{p2}}{1}, \\ D_Y = \frac{1}{\tilde{L}e \tilde{P}R}. \end{array} \right. \quad (87)$$

γ et C_v sont les mêmes que ceux définis précédemment.

Les paramètres adimensionnés sont les suivants:

$\tilde{L}e = \frac{\lambda}{\rho D C_{p2}}$: nombre de Lewis, rapport du coefficient de diffusion thermique sur le coefficient de diffusion moléculaire.

$\tilde{P}R = \frac{l_0 u_0 \rho_0 C_{p2}}{\lambda}$: pour un fluide visqueux, $\tilde{P}R$ serait le produit du nombre de Prandtl

$Pr = \frac{C_{p2} \mu}{\lambda}$ par le nombre de Reynolds $Re = \frac{l_0 u_0 \rho_0}{\mu}$.

$Ma = \frac{u_0}{[(\gamma_2 - 1) C_{p2} T_0]^{\frac{1}{2}}}$: nombre de Mach.

$Q = \frac{QY_0}{m_2 u_0^2}$: facteur d'augmentation de chaleur.

$\varepsilon_a = \frac{\varepsilon_n}{RT_0}$: énergie d'activation adimensionnée.

$A = \mathcal{B}t_0$: préfacteur d'Arrhenius adimensionné.

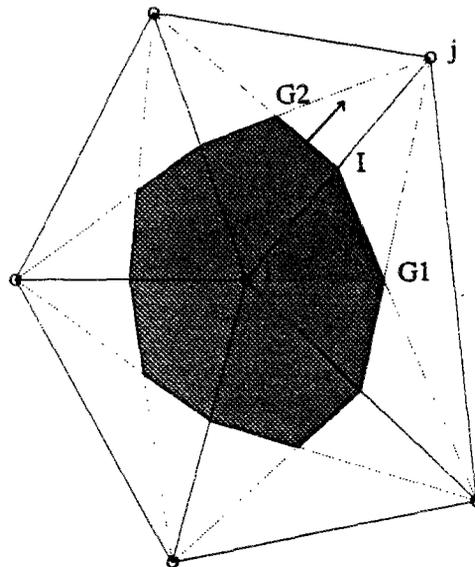
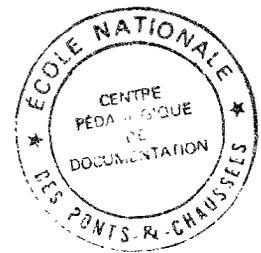
La réaction chimique n'apparaît, dans le système d'équations considéré, que sur l'espèce 2 (espèce réactante). C'est pourquoi on a réalisé l'adimensionnement en utilisant les caractéristiques physiques de cette espèce: $m_2, C_{p2}, \gamma_2, \dots$

IV.3 DISCRETISATION SPATIALE

IV.3.1 Formulation variationnelle

Avant de détailler le schéma, on réécrit les systèmes (85-87) sous la forme suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 W_t + F(W)_x + G(W)_y = P(W)_x + Q(W)_y + S(W) \\
 \\
 W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \\ \rho Y_1 \\ \rho Y_2 \end{pmatrix}, \quad F(W) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(e+p) \\ \rho u Y_1 \\ \rho u Y_2 \end{pmatrix}, \quad G(W) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(e+p) \\ \rho v Y_1 \\ \rho v Y_2 \end{pmatrix}, \\
 \\
 P(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ D_T T_x + D_{TY} \sum_{k=1}^{k=3} C_p^k T(Y_k)_x \\ D_Y(Y_1)_x \\ D_Y(Y_2)_x \end{pmatrix}, \quad Q(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ D_T T_y + D_{TY} \sum_{k=1}^{k=3} C_p^k T(Y_k)_y \\ D_Y(Y_1)_y \\ D_Y(Y_2)_y \end{pmatrix}, \\
 \\
 S(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ Q\Omega \\ 0 \\ -\Omega \end{pmatrix}.
 \end{array} \right. \quad (88)$$

Figure IV.1 : Volume de controle C_i 

Soit \mathcal{D} le domaine de calcul, Γ sa frontière et $\vec{n} = (n_x, n_y)$ la normale unitaire sortante sur Γ . La discrétisation est du type volumes finis avec des cellules construites à partir d'éléments finis triangulaires.

Cette construction consiste à définir une subdivision \mathcal{T}_h du domaine \mathcal{D} par des triangles et pour chaque nœud S_i à définir une cellule de controle C_i construite en joignant successivement les centres de gravité des triangles contenant le nœud S_i aux milieux des segments (S_i, S_j) issus de S_i (voir figure IV.1). On note ∂C_i la frontière de C_i et $\vec{\nu}_i = (\nu_{ix}, \nu_{iy})$ la normale extérieure sur ∂C_i .

On intègre alors le système d'équations (88) sur le domaine \mathcal{D} en utilisant une formulation variationnelle.

$$\iint_{C_i} W_i dx dy + \iint_{C_i} \left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} \right) dx dy = \iint_{C_i} \left(\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} + S \right) dx dy.$$

En utilisant la formule de Green, on obtient:

$$\iint_{C_i} W_i dx dy + \int_{\partial C_i} (F \nu_{ix} + G \nu_{iy}) d\sigma = \int_{\partial C_i} (P \nu_{ix} + Q \nu_{iy}) d\sigma + \iint_{C_i} S dx dy,$$

où $d\sigma$ représente l'élément de longueur sur ∂C_i .

Il ne reste plus qu'à évaluer chaque terme de cette équation. On note $W^n = W(x, y, t^n)$ et W_i la valeur au nœud i de W^n , t^n représente le temps à la $n^{\text{ième}}$ itération.

IV.3.2 Terme temporel et terme source

Le terme de dérivée temporelle et le terme source sont supposés constants sur la cellule de contrôle C_i , l'intégration est alors immédiate:

$$\iint_{C_i} W_i dx dy = W_i^i \text{aire}(C_i)$$

$$\iint_{C_i} S(W_i^n) dx dy = S(W_i^n) \text{aire}(C_i)$$

IV.3.3 Termes convectifs

On s'intéresse maintenant à l'approximation des termes convectifs du système (88), soit:

$$\int_{\partial C_i} (F v_{ix} + G v_{iy}) d\sigma, \quad (89)$$

avec la pression p donnée par (87).

Le système ainsi défini est un système hyperbolique non linéaire de lois de conservation. Pour tout vecteur $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^2$, la matrice $H_{(\alpha, \beta)} = \alpha \frac{\partial F}{\partial W} + \beta \frac{\partial G}{\partial W}$ possède $3 + K$ valeurs propres réelles (où K représente le nombre d'espèces considérées):

$$\begin{cases} \lambda_1 = \alpha u + \beta v - \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} c, \\ \lambda_k = \alpha u + \beta v, \forall k = 2, \dots, K+2, \\ \lambda_{K+3} = \alpha u + \beta v + \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} c, \end{cases}$$

où $c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$ est la vitesse locale du son; de plus la matrice H est diagonalisable et tous ces vecteurs propres sont réels.

On a les relations suivantes:

$$H = T \Lambda T^{-1} \text{ et } |H| = T |\Lambda| T^{-1},$$

avec $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i)$ matrice diagonale des valeurs propres et $|\Lambda| = \text{diag}(|\lambda_i|)$.

La matrice T est la matrice des vecteurs propres de H . On utilise ces différentes propriétés pour définir un solveur approché de Riemann afin de discrétiser spatialement le système (89).

Solveur approché de Roe

On définit la fonction de flux numérique décentré de Roe par:

$$\Phi(W_L, W_R, \vec{\nu}) = \frac{1}{2} [\mathcal{F}_\nu(W_L) + \mathcal{F}_\nu(W_R)] + \frac{1}{2} |\tilde{H}_\nu| (W_L - W_R). \quad (90)$$

avec $\mathcal{F}_\nu = \nu_x F(W) + \nu_y G(W)$. Ici $\tilde{H}_\nu = \tilde{H}_\nu(W_L, W_R)$ est une matrice diagonalisable vérifiant la propriété de Roe:

$$\mathcal{F}_\nu(W_L) - \mathcal{F}_\nu(W_R) = \tilde{H}_\nu(W_L, W_R)(W_R - W_L).$$

La construction de la matrice \tilde{H}_ν se construit de la même façon que pour le cas monodimensionnel (voir [1] ou bien dans [25]). La fonction de flux numérique ainsi construite utilise un solveur approché de Riemann basé sur une linéarisation des flux. Cependant, on montre dans le chapitre 2 que le schéma ainsi construit ne vérifie pas la positivité des espèces, ce qui peut être gênant dans certains cas (notamment en présence de combustion).

On construit donc un nouveau schéma numérique identique en tout point au précédent mis à part la convection des espèces qui est traitée par un schéma dit "schéma BL" (voir [41]). Ce schéma est construit en se basant sur la solution exacte du problème de Riemann pour les écoulements multi-espèces. Notons Φ_1 la première composante du flux numérique Φ (cette composante correspond à la convection de la masse volumique). En remarquant, sur le problème discret, que le terme de convection de l'espèce Y_k s'écrit $(\rho \vec{U}) \times Y_k$; on construit la composante Φ_k du flux numérique correspondant à la convection de l'espèce k de la manière suivante:

$$\Phi_k(W_L, W_R, \vec{\nu}) = \Phi_1(W_L, W_R, \vec{\nu}) \times \begin{cases} Y_{kL} & \text{si } \Phi_1(W_L, W_R, \vec{\nu}) > 0, \\ Y_{kR} & \text{sinon.} \end{cases}$$

En ce qui concerne la construction des autres solveurs (solveurs de Osher et de van Leer), la démarche reste la même et on renvoie au chapitre 2 où ces solveurs sont présentés pour des écoulements monodimensionnels.

Remarque:

Pour remédier au caractère non "entropique" du flux de Roe au voisinage immédiat des points soniques, on utilise une correction entropique. On renvoie à Harten [32] pour plus de détail sur cette correction.

Précision spatiale de la solution

Avant de déterminer l'intégrale des termes convectifs, on réécrit ces derniers sous la forme:

$$\int_{\partial C_i} (F\nu_{ix} + G\nu_{iy})d\sigma = \sum_{j \in \mathcal{K}(i)} \int_{\partial C_{ij}} (F\nu_{ix} + G\nu_{iy})d\sigma + TB,$$

où $\mathcal{K}(i)$ représente l'ensemble des sommets S_j voisin du sommet S_i et où $\partial C_{ij} = \partial C_i \cap \partial C_j$. TB représente les termes de bord.

Alors, en définissant le vecteur $\vec{\nu}_{ij} = (\nu_{ij}^x, \nu_{ij}^y)$ par:

$$\nu_{ij}^x = \int_{\partial C_{ij}} \nu_i^x, \quad \nu_{ij}^y = \int_{\partial C_{ij}} \nu_i^y,$$

on obtient une approximation précise au premier ordre pour les termes convectifs par:

$$\int_{\partial C_i} (F\nu_{ix} + G\nu_{iy})d\sigma = \sum_{j \in \mathcal{K}(i)} \Phi(W_i, W_j, \vec{\nu}_{ij}) + TB. \quad (91)$$

Pour réduire la diffusion numérique, nous utilisons une approximation précise au second ordre obtenue par une interpolation linéaire des variables sur chaque cellule C_i (méthode M.U.S.C.L introduite par van Leer [68]). Dans ce cas, (91) s'écrit:

$$\int_{\partial C_i} (F\nu_{ix} + G\nu_{iy})d\sigma = \sum_{j \in \mathcal{K}(i)} \Phi(W_{ij}, W_{ji}, \vec{\nu}_{ij}) + TB,$$

où on utilise la même fonction de flux numérique Φ , mais où W_{ij} (resp. W_{ji}) est une approximation du second ordre de W à l'interface ∂C_{ij} à l'intérieur de la cellule C_i (resp. à l'intérieur de la cellule C_j). Pour construire les quantités W_{ij} et W_{ji} , on définit tout d'abord une approximation du gradient de W au noeud S_i par les formules suivantes:

$$\begin{cases} W_x(i) = \frac{1}{\text{aire}(\mathcal{T}_i)} \iint_{\mathcal{T}_i} \frac{\partial W}{\partial x} dx dy, \\ W_y(i) = \frac{1}{\text{aire}(\mathcal{T}_i)} \iint_{\mathcal{T}_i} \frac{\partial W}{\partial y} dx dy, \end{cases}$$

où \mathcal{T}_i représente l'ensemble des triangles ayant pour sommet S_i . Les intégrands $\frac{\partial W}{\partial x}$ et $\frac{\partial W}{\partial y}$ sont les dérivées de l'interpolée classique P-1 Lagrange de la variable W . On définit alors W_{ij} et W_{ji} par:

$$\begin{cases} W_{ij} = W_i + \frac{1}{2} \vec{\nabla} W(i) \cdot S_i \vec{S}_j, \\ W_{ji} = W_j + \frac{1}{2} \vec{\nabla} W(j) \cdot S_j \vec{S}_i. \end{cases}$$

En fait, l'approximation du second ordre ainsi définie peut produire des résultats oscillatoires [26], et donc elle n'est pas employée directement sous cette forme. On utilise alors un schéma du type TVD en limitant les valeurs extrapolées W_{ij} et W_{ji} (voir [26] pour plus de détails). L'introduction de tels limiteurs peut affecter la précision d'ordre deux du schéma. Cependant ces limiteurs n'interviennent que lorsque apparaissent des oscillations, c'est à dire près des chocs ou des discontinuités. Pour augmenter la précision, il est nécessaire d'augmenter le nombre de points par raffinement local.

Dans la pratique et compte tenu des résultats obtenus au chapitre 2, l'interpolation et la limitation s'effectuent sur les variables physiques. Ce choix semble en effet être le meilleur du point de vue qualité/coût. De plus, il permet lorsque l'on utilise l'approche (C) ou "schéma BL" de conserver la positivité des fractions massiques.

IV.3.4 Termes diffusifs

Il ne reste plus qu'à traiter maintenant l'approximation des termes diffusifs présents dans le système (88), soit:

$$\int_{\partial C_i} (P\nu_{ix} + Q\nu_{iy})d\sigma.$$

De par la définition de P et de Q donnée dans (88), l'intégrale précédente se ramène au calcul des quantités suivantes:

$$\int_{\partial C_i} \vec{\nabla} T \cdot \vec{\nu}_i d\sigma, \quad \int_{\partial C_i} \vec{\nabla} Y_k \cdot \vec{\nu}_i d\sigma, \quad \text{et} \quad \int_{\partial C_i} T \vec{\nabla} Y_k \cdot \vec{\nu}_i d\sigma. \quad (92)$$

Pour évaluer ces termes, on suppose que les intégrands sont constants par triangle. Plus précisément, on considère que sur chaque triangle τ de sommets $S_j (1 \leq j \leq 3)$, on a:

$$\nabla T|_\tau = \sum_{j=1}^{j=3} T_j \nabla \phi_j, \quad \nabla Y_k|_\tau = \sum_{j=1}^{j=3} Y_{kj} \nabla \phi_j,$$

avec ϕ_j la fonction de base P-1 éléments finis associée au noeud S_j et, pour le dernier terme de (92):

$$T|_\tau = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^{j=3} T_j.$$

On obtient alors pour la discrétisation des termes diffusifs:

$$\int_{\partial C_i} (P\nu_{ix} + Q\nu_{iy})d\sigma = \sum_{\tau \in \mathcal{T}(i)} \begin{pmatrix} \bar{P}_\tau \\ \bar{Q}_\tau \end{pmatrix} \cdot \int_{\partial C_i \cap \tau} \vec{\nu}_i + TB,$$

où P_τ et Q_τ sont les valeurs constantes de P et Q sur le triangle τ . On peut montrer qu'une discrétisation par éléments finis classiques des termes diffusifs donne un résultat identique (voir [31]).

IV.4 DISCRETISATION TEMPORELLE

Etant donné que notre objectif principal est de simuler le processus instationnaire de l'alumage, nous utilisons un schéma d'Euler explicite pour l'avancement en temps de la solution numérique.

Le passage à l'ordre deux spatial par interpolation des variables couplé à un schéma Euler explicite d'ordre 1 est inconditionnellement instable. Par contre, on peut montrer sur un modèle simple de convection pure que le schéma temporel à prédicteur correcteur est stable sous une condition de type CFL et de plus que la solution obtenue est précise à l'ordre 2 en temps et en espace. En présence des termes diffusifs et du terme source, la discrétisation temporelle choisie rend la solution d'ordre 1 en temps.

IV.4.1 Partie Euler

Soit à discrétiser:

$$W_t(\text{aire}C_i) + \sum_{j \in \mathcal{K}(i)} \Phi_{ij}(W_{ij}, W_{ji}, \vec{\nu}_{ij}) = 0.$$

Le schéma temporel utilisé pour la partie Euler (sans diffusion et sans terme source) appartient à la classe des schémas à 2 pas avec une étape de prédiction et une étape de correction.

Notons Δt^n le pas de temps variable, $t^n = \sum_1^n \Delta t^n$ le temps à la $n^{\text{ème}}$ itération et $W_i^n = W(S_i(x, y), t^n)$.

1. Prédiction

Le prédicteur est calculé en variables physiques ($\tilde{W} = (\rho, u, v, p, Y_k)$) à l'instant $n + \frac{1}{2}$ en utilisant la forme quasi-linéaire des équations d'euler:

$$\tilde{W}_i^{n+\frac{1}{2}} = \tilde{W}_i^n - \frac{\Delta t}{2} (\tilde{A}_i \tilde{W}_x(i) + \tilde{B}_i \tilde{W}_y(i)),$$

\tilde{A} et \tilde{B} sont les matrices jacobiennes de $F(W)$ et de $G(W)$ écrites en variables physiques. $\tilde{W}_x(i)$ et $\tilde{W}_y(i)$ sont les dérivées définies précédemment (approximations du gradient de \tilde{W} au nœud S_i). On a donc utilisé l'interpolation linéaire de \tilde{W} sur C_i à l'instant t^n pour déterminer sa valeur à l'instant $t^{n+\frac{1}{2}}$.

2. Correction

On calcule les flux Φ_{ij} avec les valeurs du prédicteur $W^{n+\frac{1}{2}}$ au point I_{ij} après passage en variable conservative. On écrit donc:

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{\text{aire}(C_i)} \sum_{j=1}^{N_i} \Phi_{ij}(W_{ij}^{n+\frac{1}{2}}, W_{ji}^{n+\frac{1}{2}}, \vec{\nu}_{ij}).$$

avec:

$$\begin{cases} W_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = W_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \vec{\nabla} W(i) \cdot S_i \vec{S}_j, \\ W_{ji}^{n+\frac{1}{2}} = W_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \vec{\nabla} W(j) \cdot S_j \vec{S}_i. \end{cases}$$

Dans cette étape de correction, on ne recalcule pas les gradients à l'étape $n + \frac{1}{2}$, ceci pour rendre moins coûteux le calcul.

Lorsque l'on fait de l'ordre 1, les dérivées sont alors nulles. Cela revient à faire:

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{\text{aire}C_i} \sum_{j=1}^{N_i} \Phi_{ij}(W_i^n, W_j^n, \vec{\nu}_{ij}).$$

IV.4.2 Termes de diffusion et terme source

Pour ce, on utilise le schéma d'Euler explicite d'ordre 1, soit:

$$W_t = \frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t}$$

IV.4.3 Stabilité

Le choix d'un schéma explicite entraîne pour des raisons de stabilité une limitation du pas de temps. L'analyse de stabilité sur tout le système non linéaire étant trop complexe, on tire trois conditions de stabilité approximatives en considérant séparément pour un problème monodimensionnel les termes convectifs, les termes diffusifs et le terme réactif. En considérant seulement les termes hyperboliques:

$$W_t + F_x = 0,$$

on obtient la condition de stabilité approchée pour les termes convectifs et acoustiques:

$$\frac{\Delta t}{\Delta h} \max(|U + c|, |U|, |U - c|) \leq 1.$$

Δh est une mesure du pas en espace. $U - c$, U et $U + c$ représentent les valeurs propres de la matrice Jacobienne de $F(W)$.

En ne considérant que les termes diffusifs:

$$e_t = \lambda \Delta T = \lambda \Delta \left[\frac{e}{\rho C_v} - \frac{1}{2}(u^2 + v^2) \right],$$

$$(\rho Y_k)_t = (\rho D) \Delta Y_k,$$

on obtient la condition de stabilité diffusive:

$$\frac{2\Delta t}{\Delta h^2} \max\left\{ \frac{\lambda}{\rho C_v}, \frac{(\rho D_Y)}{\rho} \right\} \leq 1.$$

Enfin, la considération du terme réactif seul:

$$(\rho Y_2)_t = -\mathcal{A} \rho Y_2 \exp\left(\frac{-\epsilon_a}{T}\right),$$

donne:

$$\Delta t \max_i \left[\mathcal{A} \exp\left(\frac{-\epsilon_a}{T}\right) \right] \leq 1, \quad (93)$$

On choisit alors le pas de temps comme étant le minimum de ces différents pas de temps calculés sur tout le domaine de calcul. Cette procédure est appelée par la suite "Calcul du

pas de temps global". Pour la recherche d'une solution stationnaire, la procédure ainsi définie peut donner des temps de calcul très longs. Ceci est dû au fait que pour certains calculs, la discrétisation choisie comportera des mailles dont la taille peut varier dans un rapport de 1 à 10^6 . On définit alors une procédure de "Calcul de pas de temps local" où le pas de temps est défini par sommet. Bien évidemment cette procédure donne une solution instationnaire non physique.

IV.5 CONDITIONS AUX LIMITES

Soit Γ la frontière du domaine de calcul et \vec{n} la normale sortante unitaire de Γ . On suppose que Γ se décompose en deux parties $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_\infty$ sur lesquelles s'appliquent les conditions aux limites. Γ_0 représente les bords glissants (i.e. les parois matérielles du domaine) et Γ_∞ représente les frontières entrantes et sortantes.

Dans les schémas que l'on utilise, on ne force pas la valeur d'une variable sur la frontière mais on applique une formulation faible. Dans ces conditions, le traitement des conditions aux limites se fait simplement en modifiant les flux (définis à partir de (91)) pour tous les bords de cellules ∂C_i vérifiant $\partial C_i \cap \Gamma \neq \emptyset$.

IV.5.1 Sur Γ_0 : traitement des bords glissants

Pour tout sommet $S_i \in \Gamma_0$, la condition de glissement $\vec{v} \cdot \vec{n} = 0$ à la paroi imposée faiblement donne:

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} (Fn_x + Gn_y) d\sigma = \begin{pmatrix} 0 \\ \int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} pn_x d\sigma \\ \int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} pn_y d\sigma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (94)$$

L'intégrale de pression qui apparaît dans (94) est calculée en supposant la pression constante sur $\partial C_i \cap \Gamma_0$. Elle s'écrit alors:

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} pn_x d\sigma = p_i \int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} n_x d\sigma, \quad \int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} pn_y d\sigma = p_i \int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} n_y d\sigma.$$

En ce qui concerne l'intégration des termes diffusifs, on suppose que la paroi est acrobatique et non catalytique (i.e. $\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = 0$ et $\vec{\nabla} Y_k \cdot \vec{n} = 0$). Dans ces conditions on montre simplement que:

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_0} (Pn_x + Qn_y) d\sigma = 0.$$

IV.5.2 Sur Γ_∞ : traitement des bords sortants

Pour les problèmes que l'on considère, les entrées sont supersoniques. Toutes les caractéristiques sont entrantes, les flux numériques définis à partir de (91) pour tous les bords de cellules ∂C_i restent valables sans aucune modification. Cela revient en fait à forcer les valeurs en entrée du domaine. On ne s'intéresse donc qu'au calcul des flux pour les frontières sortantes.

Pour les termes diffusifs, on suppose que les frontières de sorties sont suffisamment éloignées des injecteurs (voir figure IV.5), on peut donc supposer que les relations $\vec{\nabla}T \cdot \vec{n} = 0$ et $\vec{\nabla}Y_k \cdot \vec{n} = 0$ restent valables. Par conséquent, l'intégrale de bord des termes diffusifs s'annule.

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_\infty} (Pn_x + Qn_y) d\sigma = 0.$$

Pour évaluer les flux convectifs sur $\partial C_i \cap \Gamma_\infty$, on utilise de nouveau une décomposition de flux. La difficulté réside ici dans le fait que sur la frontière Γ_∞ l'écoulement peut être subsonique ou supersonique. On définit tout d'abord "une solution à l'infini" notée W_∞ et on pose $\vec{n}_i = \int_{\partial C_i \cap \Gamma_\infty} \vec{n}$. On construit alors une fonction de flux numérique $\hat{\Phi}$ en accord avec (91):

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_\infty} (Fn_x + Gn_y) d\sigma = \hat{\Phi}(W_i, W_\infty, \vec{n}_i). \quad (95)$$

Ce traitement des conditions aux limites est inspiré de l'aérodynamique externe où W_∞ est constant.

IV.5.3 Détermination de la fonction de flux numérique $\hat{\Phi}$

On s'intéresse maintenant à la détermination de la fonction de flux numérique intervenant dans (95). Le domaine occupé par le fluide est a priori infini, il apparaît nécessaire pour des raisons pratiques de tronquer ce domaine. Le problème revient alors à déterminer une fonction de flux numérique de bord compatible avec le domaine de calcul considéré.

Les troncatures de domaine que nous envisageons sont de deux types que nous qualifierons de proches et d'éloignées. Dans le premier cas, seul le processus d'allumage, qui apparaît près des entrées nous intéresse, alors lors que dans le second on s'intéresse en plus à la structure interne des jets détendus (c'est à dire que le domaine de calcul doit être suffisamment grand pour capter les chocs, les discontinuités de contact, etc ...).

Pour les types de problèmes que nous avons à résoudre, le traitement des conditions aux limites sur les bords sortants est un problème très difficile. De plus, par rapport au cas Euler mono-espèce, il vient se greffer une difficulté supplémentaire liée aux caractéristiques physiques différentes des espèces considérées. Les flux numériques $\hat{\Phi}$ que l'on considère sont des flux de type Steger et Warming, ces flux sont couramment utilisés pour les écoulements régis par les équations d'Euler et présentent l'avantage d'être très simple à implémenter. On va à partir de constatations numériques, dont certaines peuvent s'expliquer mathématiquement sur des

cas simples, justifier les différents choix adoptés par la suite pour l'extension de ces flux au cas multi-espèces.

Le flux de Steger et Warming

Le premier flux envisageable est le flux de "Steger et Warming" (voir [61]), il s'écrit de la manière suivante:

$$\hat{\Phi}(W_i, W_\infty, \vec{n}_i) = H_{n_i}^+(W_i)W_i + H_{n_i}^-(W_\infty)W_\infty, \quad (96)$$

où H_n représente la matrice Jacobienne définie précédemment. Ce flux donne dans le cas linéaire un problème stationnaire discret bien posé. Pour les écoulements sans espèces régis par les équations d'Euler, ce flux donne en général de bons résultats, du moins si les frontières Γ_∞ sont suffisamment éloignées.

1. Convection des espèces

De même que pour les flux numériques utilisés à l'intérieur du domaine de calcul, la partie correspondant à la convection des espèces peut être traitée soit en utilisant l'approche (B) (en considérant tout le système comme un système non linéaire des lois de conservation) soit par utilisation du schéma BL ou approche (C). En fait, pour les écoulements multi-espèces même à γ et C_v constants, ce flux utilisé avec l'approche (B) peut bloquer les espèces sur les bords sortants. Par contre, l'utilisation de l'approche (C) supprime ce problème.

Pour illustrer ce point on a simulé dans une chambre de taille moyenne (104×240 mm) la détente d'un jet supersonique où les caractéristiques physiques de l'espèce introduite sont différentes de celles initialement au repos dans la chambre. Les conditions initiales et aux limites sont les suivantes):

$$\text{Jet : } \begin{cases} \rho = 1.85 \text{ kg/m}^3 \\ u = 0 \text{ m/s} \\ v = -980 \text{ m/s} \\ p = 14.6 \cdot 10^5 \text{ Pa} \\ M = 1 \\ \gamma = 1.22 \\ m = 23 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mole} \end{cases} \quad W_0(x, y) = W_\infty : \begin{cases} \rho_\infty = 0.2 \text{ kg/m}^3 \\ u_\infty = 0 \text{ m/s} \\ v_\infty = 0 \text{ m/s} \\ p = 1. \cdot 10^5 \text{ Pa} \\ \gamma = 1.4 \\ m = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mole} \end{cases} \quad (97)$$

Afin de préserver une solution instationnaire physique sur les bords du domaine de calcul, on choisit la solution à l'infini W_∞ égale à la solution initiale dans la chambre $W_0(x, y)$. Le flux numérique utilisé à l'intérieur du domaine est le flux de van Leer, la précision spatiale est d'ordre 2. On utilise une procédure de pas de temps local. Le maillage utilisé est relativement grossier (voir figure IV.2), il comporte 3081 points.

On a représenté figure IV.3 (resp. figure IV.4) les lignes isoespèces et isomach obtenues en utilisant sur Γ_∞ le flux de Steger et Warming (resp. le flux de Steger et Warming où la

convection des espèces est traitée par le schéma BL). On constate figure IV.3 que l'espèce qui devrait être évacuée, puisque le champ de vitesse est sortant, reste bloquée sur la frontière.

Pour comprendre ce qui se passe, considérons une discontinuité de contact stationnaire monodimensionnelle où seule l'espèce est variable. C'est à dire que toutes les variables hydrodynamiques sont constantes de part et d'autre de cette discontinuité. Si nous notons par W_1 et W_2 les états en question, on a:

$$\rho_1 = \rho_2, u_1 = u_2 = 0, p_1 = p_2, \gamma_1 \neq \gamma_2 \text{ et } Y_1 \neq Y_2$$

On prend pour simplifier $Y_1 = 1, Y_2 = 0$. On note c_1 et c_2 les vitesses locales du son. Le flux à l'interface doit en toute logique être nul puis que l'on a un équilibre hydrodynamique. Calculons ce flux par utilisation du flux numérique de Steger et Warming; on note Φ_1 le flux de densité et Φ_4 le flux d'espèce. On obtient alors:

$$\Phi_1 = \frac{\rho_1 c_1}{2\gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2}{2\gamma_2}$$

$$\Phi_4 = \frac{\rho_1 Y_1 c_1}{2\gamma_1} - \frac{\rho_2 Y_2 c_2}{2\gamma_2}$$

Ce qui après simplification s'écrit:

$$\Phi_1 = \frac{\sqrt{\rho p}}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\gamma_1}} - \frac{1}{\sqrt{\gamma_2}} \right)$$

$$\Phi_4 = \frac{\sqrt{\rho p}}{2} \frac{1}{\sqrt{\gamma_1}}$$

La solution exacte de ce problème impose $\Phi_1 = \Phi_4 = 0$, on constate que ce flux ne vérifie pas ces conditions, même si $\gamma_1 = \gamma_2$ car alors $\Phi_4 \neq 0$.

Supposons comme c'est le cas dans notre expérience numérique que $\gamma_1 < \gamma_2$. Alors $\Phi_4 > \Phi_1 > 0$ et on montre aisément qu'après la première itération on a $Y_1 < 1$. On fait rentrer dans le domaine de l'espèce 2. Ce flux ne traite donc pas correctement la convection de l'espèce. Il apparaît immédiat par un raisonnement identique que ce problème disparaît par utilisation du schéma BL puisqu'alors, Φ_1 étant positif on a: $\Phi_4 = Y_1 \Phi_1$ et donc après la première itération $Y_1 = 1$.

Remarque:

Le flux numérique de Steger et Warming avec le schéma BL, pour le cas considéré ci-dessus d'une discontinuité de contact stationnaire, donne une solution exacte uniquement lorsque $\gamma_1 = \gamma_2$; dans le cas contraire la solution est fautive mais la convection des espèces se fait correctement (c'est à dire en accord avec le signe de Φ_1).

En conclusion, l'utilisation du flux (96) ne pourra se faire que si la convection des espèces est traitée par le schéma BL et ceci quelque soit la taille du maillage considéré.

2. Comportement du flux de Steger et Warming en frontière proche

Pour étudier le comportement de ce flux numérique en frontières proches, on reprend le cas test défini dans [13] qui consiste en l'interaction non réactive de deux jets gazeux. Le maillage utilisé est représenté figure IV.5, il comporte 3322 points et ses dimensions sont de 50 par 65.6 mm alors que les entrées sont respectivement de 2.9 et 5.6 mm. Les conditions initiales et aux limites sont les suivantes:

$$\text{Jet 1: } \begin{cases} \rho = 1.67 \text{ kg/m}^3 \\ u = 769 \text{ m/s} \\ v = -769 \text{ m/s} \\ p = 11.7 \cdot 10^5 \text{ Pa} \\ M = 1.1 \\ \gamma = 1.23 \\ m = 22.7 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mole} \end{cases} \quad \text{Jet 2: } \begin{cases} \rho = 0.51 \text{ kg/m}^3 \\ u = 0 \text{ m/s} \\ v = -799 \text{ m/s} \\ p = 0.81 \cdot 10^5 \text{ Pa} \\ M = 1.7 \\ \gamma = 1.4 \\ m = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mole} \end{cases} \quad (98)$$

$$W_0(x, y) = W_\infty : \begin{cases} \rho = 0.2 \text{ kg/m}^3 \\ u_\infty = 0 \text{ m/s} \\ v_\infty = 0 \text{ m/s} \\ p = 0.5 \cdot 10^5 \text{ Pa} \\ \gamma = 1.4 \\ m = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mole} \end{cases} \quad (99)$$

Les lignes isomach à l'état stationnaire sont représentées figure IV.6, elles mettent en évidence une solution fortement polluée sur les bords sortants, le flux de Steger et Warming (96) s'avère donc peu précis en frontière proche. En fait cela s'explique en partie par le fait que ce flux n'est pas valide en écoulement supersonique (i.e. lorsque l'état W_i est supersonique, on perd la consistence $\hat{\Phi}(W_i, W_\infty, \vec{n}_i) \neq \mathcal{F}_n(W_i)$) si W_∞ n'est pas aussi supersonique. Pour remédier à cet inconvénient, on construit un flux entièrement décentré sur la solution à l'intérieur du domaine (voir section suivante).

En conclusion, on utilisera ce flux qui est relativement robuste lorsque la solution sur les frontières "infinies" est subsonique. On montrera par la suite comment, au détriment de la précision, on peut rendre une solution subsonique sur un bord éloigné.

Maillage grossier à 3081 points de dimension 104 - 240

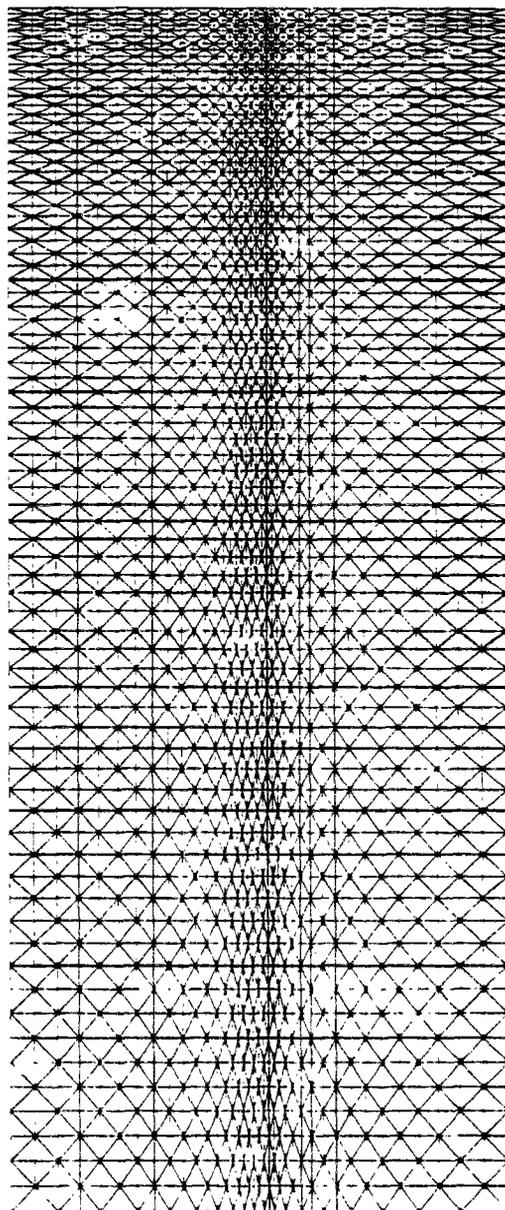


Figure IV.2 : Représentation totale du maillage

Détente d'un jet supersonique à γ variable dans une chambre ouverte

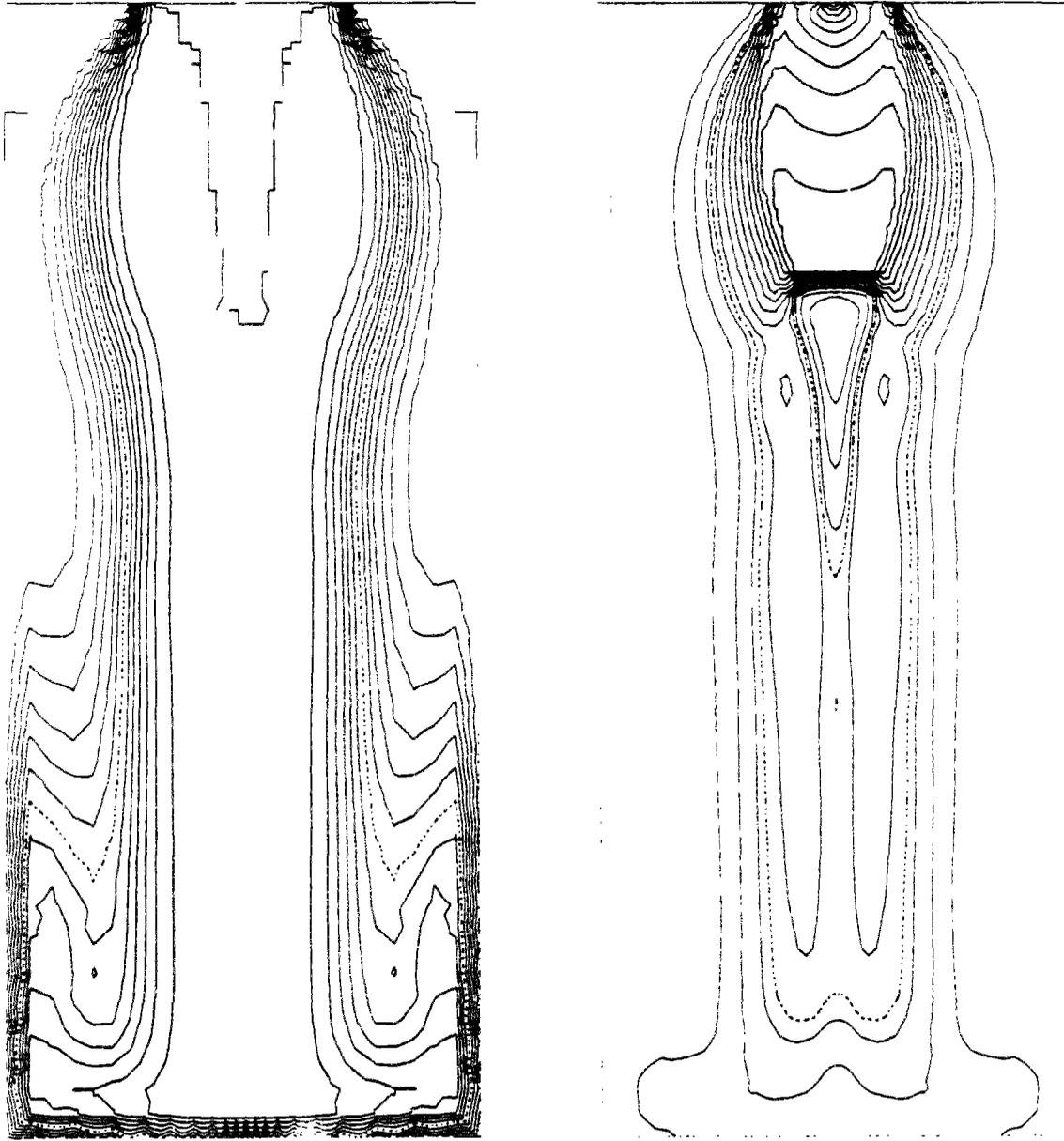


Figure IV.3 : Lignes Isoespèce 1 et Isomach obtenues avec le flux de Steger et Warming

Détente d'un jet supersonique à γ variable dans une chambre ouverte

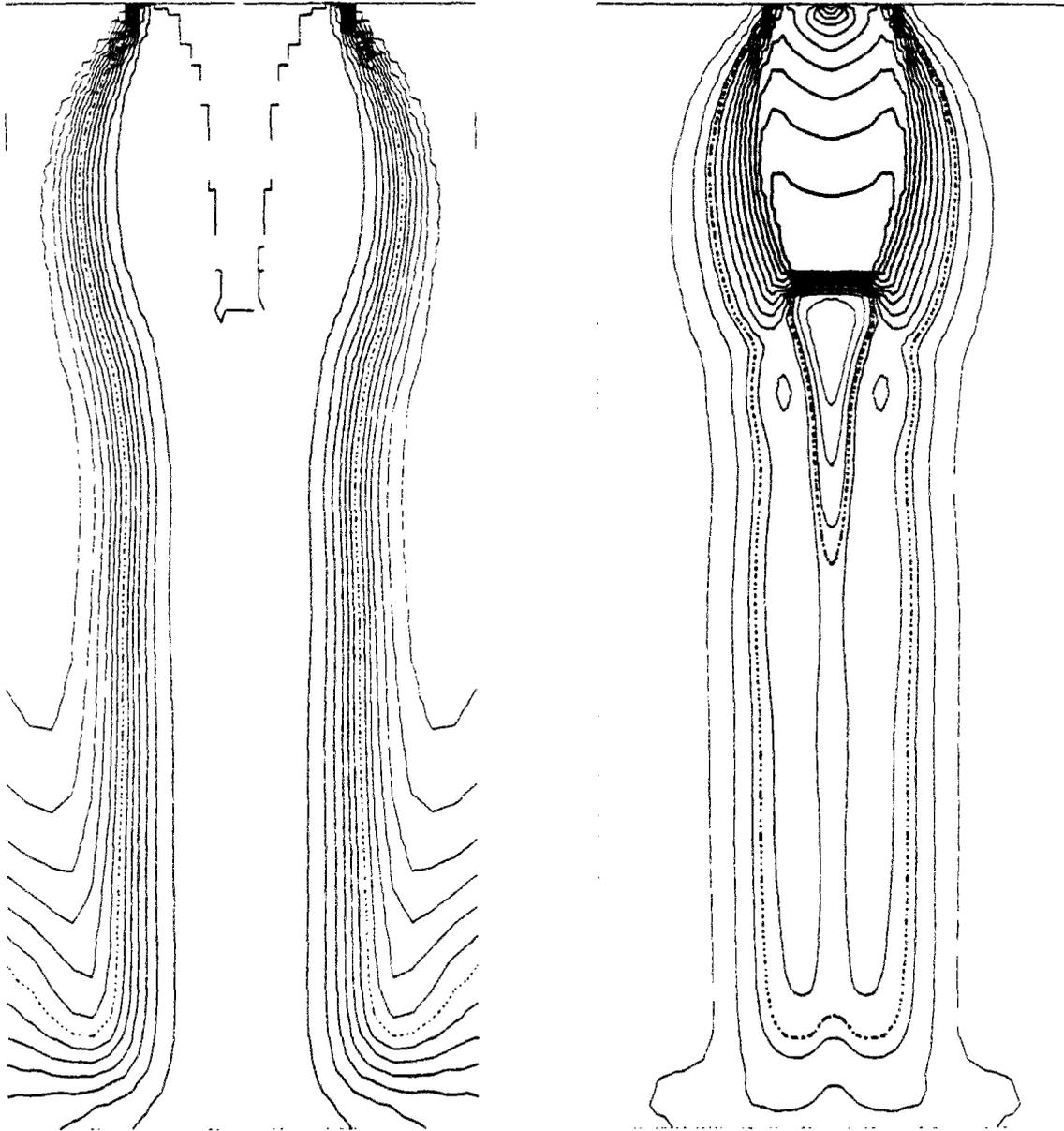


Figure IV.4 : Lignes Isoespèces Isomach obtenues avec le flux de Steger et Warming & schéma BL

Maillage de 3322 points de dimension 50 - 65.6

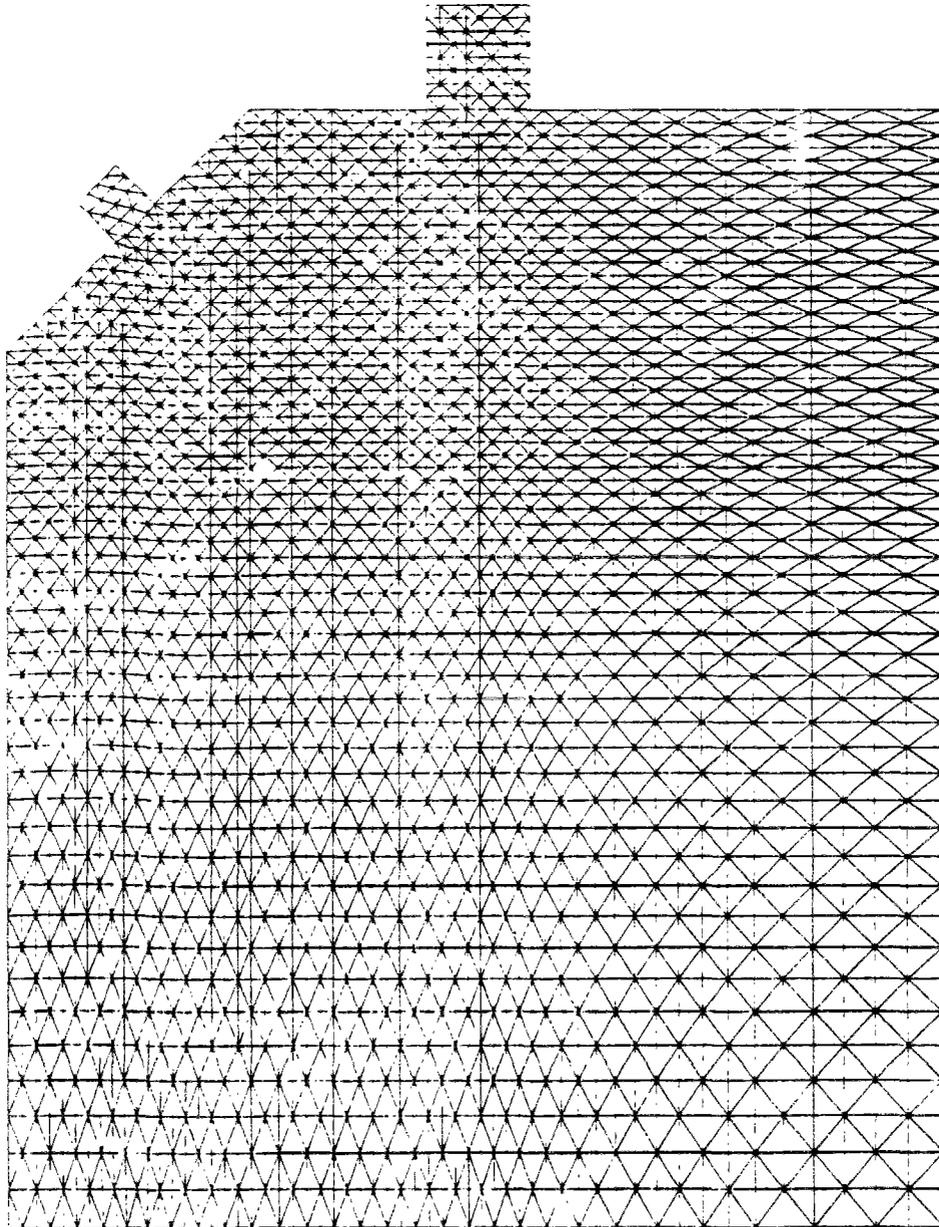


Figure IV.5 : Représentation totale du maillage

Interaction non réactive de deux jets en frontière proche dans une chambre ouverte
15 isovaleurs $\min=0.2 \cdot 10^{-3}$, $\max=4.295$, isoref=1

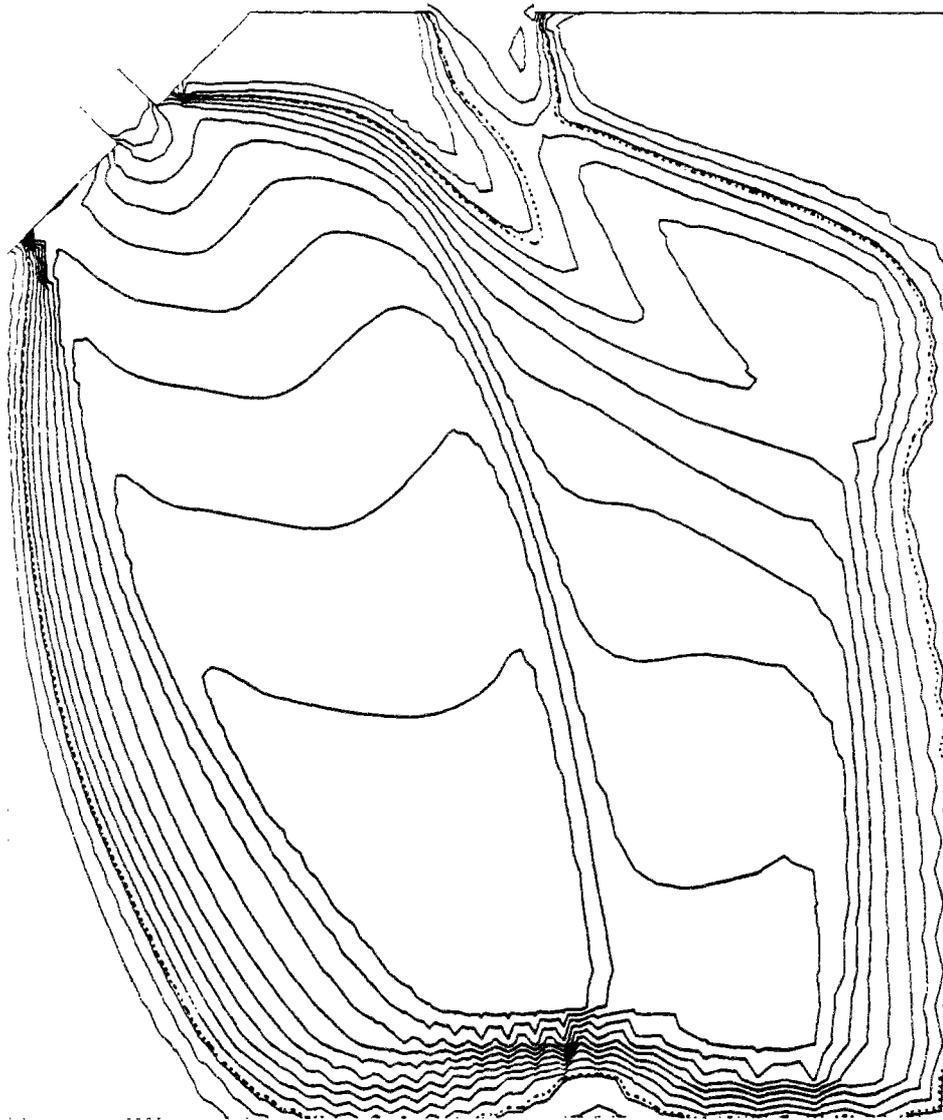


Figure IV.6 : Lignes Isomach obtenues avec le flux de Steger et Warming

Le flux de Steger et Warming modifié

Pour préserver l'éventuel caractère supersonique de la solution sur le bord du domaine, on peut envisager un flux numérique pour lequel le décentrage se fait uniquement sur la solution à l'intérieur du domaine de calcul W_i , ce flux dit flux de Steger et Warming modifié s'écrit:

$$\hat{\Phi}(W_i, W_\infty, \vec{n}_i) = H_{\vec{n}_i}^+(W_i)W_i + H_{\vec{n}_i}^-(W_i)W_\infty, \quad (100)$$

On constate alors que la façon dont on traite la convection des espèces (par un schéma BL ou non), ne modifie que très faiblement les résultats numériques. Cependant, en pratique proche l'utilisation de ce flux avec l'approche (B) s'est avéré plus robuste qu'avec l'approche (C) ou schéma BL. Malheureusement, aucune justification mathématique satisfaisante n'a pu être trouvée pour ce comportement.

1. Influence des termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$ dans la matrice Jacobienne H

Pour les écoulements multi-espèces à γ et C_v variables, le vecteur $H_{\vec{n}}^-(W_i)W_\infty$ comporte des termes du type $\frac{\partial \gamma}{\partial W_i}$ qui, pour les cas tests considérés, conduisent à des solutions non physiques. De ce fait, l'utilisation du flux (100) ne peut se faire que si on annule ces termes (par contre, on peut montrer que ces termes donnent une contribution nulle pour le flux (96)). Pour illustrer ce point, on a repris le même exemple que précédemment (détente d'un jet transsonique dans la chambre ouverte (97)). Le flux numérique de bord utilisé pour cette expérience est donc le flux de Steger et Warming modifié (100).

On présente figure IV.7-a (resp. figure IV.7-b) les résultats numériques obtenus en prenant en compte les termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$ dans la matrice Jacobienne H (resp. en annulant les termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$ dans la matrice Jacobienne H).

On constate que la solution obtenue en prenant en compte ces dérivées est non physique. Pour comprendre ce comportement, on effectue une étude mathématique simplifiée monodimensionnelle du même type que celle réalisée précédemment. Cette analyse met en évidence (pour les valeurs numériques de γ et C_v considérées) que la présence des termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$ dans la matrice Jacobienne H a pour effet de modifier le signe des flux numériques. On considère donc une discontinuité de contact stationnaire séparant deux fluides différents. Si nous notons par W_1 et W_2 les états en question, on a:

$$\rho_1 = \rho_2, \quad u_1 = u_2 = 0, \quad p_1 = p_2, \quad \gamma_1 \neq \gamma_2, \quad C_v^1 \neq C_v^2 \text{ et } Y_1 \neq Y_2$$

On prend pour simplifier $Y_1 = 1$, $Y_2 = 0$. On note c_1 la vitesse locale du son pour l'état W_1 . Pour l'application numérique, on choisit les valeurs de γ et C_v suivantes: $\gamma_1 = 1.22$, $\gamma_2 = 1.4$, $C_v^1 = 1890$ et $C_v^2 = 6130$. On calcule alors le flux donné par (100), on note respectivement

Φ_1, Φ_2 , et Φ_3 les flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Si on prend en compte les termes dérivés, le calcul direct donne:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 = \frac{p}{2c} \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2 - 1} - \frac{C_v^2 \gamma_2 - \gamma_1}{C_v^1 \gamma_1 - 1} \right) \simeq -2.2 \frac{p}{2c} \\ \Phi_2 = p + \frac{p}{2} \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_2 - 1} + \frac{C_v^2 \gamma_2 - \gamma_1}{C_v^1 \gamma_1 - 1} \right) \simeq p + 2.2 \frac{p}{2} \\ \Phi_3 = \frac{pc}{2(\gamma_1 - 1)} \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2 - 1} - \frac{C_v^2 \gamma_2 - \gamma_1}{C_v^1 \gamma_1 - 1} \right) \simeq -2.2 \frac{pc}{2(\gamma_1 - 1)} \end{array} \right.$$

Si maintenant on supprime les termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$, on obtient:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 = \frac{p}{2c} \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2 - 1} \right) \simeq 0.5 \frac{p}{2c} \\ \Phi_2 = p + \frac{p}{2} \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_2 - 1} \right) \simeq p - 0.5 \frac{p}{2} \\ \Phi_3 = \frac{pc}{2(\gamma_1 - 1)} \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2 - 1} \right) \simeq 0.5 \frac{pc}{2(\gamma_1 - 1)} \end{array} \right. \quad (101)$$

Cette analyse, bien que très simplifiée permet cependant d'expliquer les grandes différences observées dans les résultats numériques. En effet, on observe que les flux sont de signes opposés et qu'en module ils sont presque six fois plus importants lorsque l'on prend en compte les termes dérivés, alors que la solution exacte impose $\Phi = (0, p, 0)$. On reviendra un peu plus loin sur ces résultats pour expliquer les différences observées en frontières éloignées entre le flux de Steger et Warming (96) et le flux de Steger et Warming modifié (100).

Quoi qu'il en soit, il ressort de cette étude que l'utilisation du flux (100) ne peut se faire que si l'on néglige dans la matrice Jacobienne les dérivées de γ .

La figure IV.7-b met en évidence que la solution obtenue est fortement diffusée, en effet on constate entre autre, que la sortie aval située dans l'axe du jet est subsonique. Pour mettre en évidence si ce problème provient du flux numérique de van Leer, on réalise la même expérience en utilisant à l'intérieur du domaine le flux numérique de Roe. La solution obtenue figure IV.8 met en évidence une solution un peu moins "polluée" sur la frontière, mais fortement dissymétrique. En fait, l'importante diffusion du flux de van Leer permet dans l'expérience précédente de "tuer" les dissymétries qui proviennent du mauvais traitement des conditions aux limites. On notera aussi qu'aucun comportement de ce type n'a été observé par utilisation sur le bord du domaine du flux de Steger et Warming non modifié (96).

2. Comportement du flux de Steger et Warming modifié en frontière proche

On reprend ici le cas de l'interaction non réactive de deux jets gazeux (98)-(99), les lignes isomach présentées figure IV.9 font apparaître comme cela était prévisible une nette amélioration de la solution numérique, cependant on observe encore notamment sur le bord inférieur droit un choc d'origine numérique. La mauvaise qualité de la solution obtenue peut en partie s'expliquer par le fait que l'état W_∞ que l'on s'impose constant et faiblement est très éloigné de l'état effectivement présent sur le bord du domaine. L'idée, pour éviter ceci, est alors de remplacer le champ W_∞ du flux (100) par une moyenne entre l'état W_i effectivement présent sur le bord du domaine et l'état W_∞ que l'on s'impose à l'infini. On obtient alors le flux suivant:

$$\hat{\Phi}(W_i, W_\infty, \vec{n}_i) = H_n^+(W_i)W_i + H_n^-(W_i)[\beta W_i + (1 - \beta)W_\infty], \quad (102)$$

où β est un paramètre à déterminer compris entre 0 et 1 (voir l'annexe en fin de chapitre ou ce flux est étudié plus en détail sur une équation scalaire monodimensionnelle). On choisit en accord avec l'étude réalisée dans l'annexe de prendre $\beta = 0.7$ et on applique le flux (102) pour le cas test de l'interaction de deux jets en frontière proche. La solution ainsi obtenue est présentée figure IV.10. Le choc bloqué du précédent calcul (correspondant en fait au cas $\beta = 0$) a complètement été convecté en dehors du domaine de calcul; à noter aussi que ce flux n'affecte que très faiblement la solution dans les zones très subsoniques. La solution ainsi obtenue est indéniablement d'une qualité supérieure. On confirme par cet exemple l'aptitude du flux (102) à améliorer les résultats numériques pour ce cas test.

Sur cette géométrie, différents calculs avec et sans combustion ont été réalisés. On a aussi étudié l'influence d'une adaptation statique sur la solution stationnaire par raffinement local du maillage. Afin de limiter dans cette thèse le nombre déjà important de résultats numériques, on renvoie à [13] ou [15] pour plus de détails concernant ces résultats.

Détente d'un jet supersonique à γ variable dans une chambre ouverte

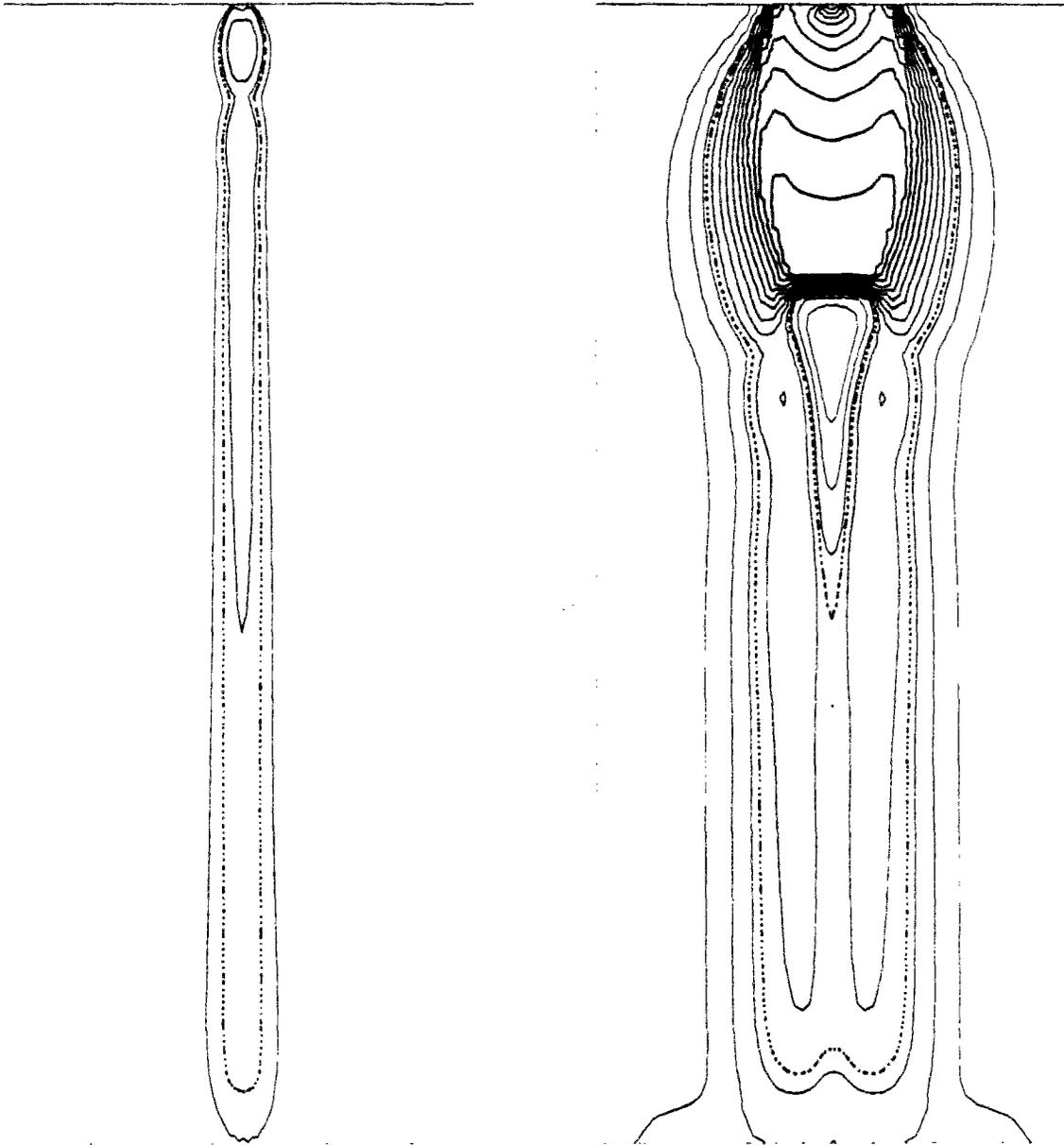


Figure IV.7 : Lignes Isomach obtenues avec et sans les termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$ dans la matrice Jacobienne H

Détente d'un jet supersonique à γ variable dans une chambre ouverte

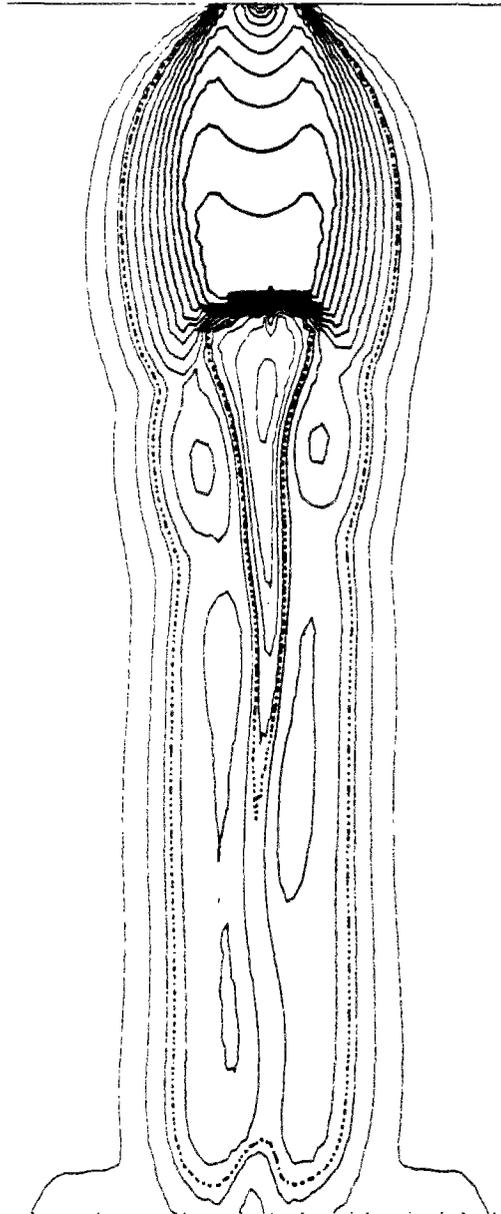


Figure IV.8 : Lignes Isomach obtenus avec le flux numérique de Roe

Interaction non réactive de deux jets en frontière proche dans une chambre ouverte
15 isovaleurs min= $0.15 \cdot 10^{-1}$, max=4.30, isoref=1



Figure IV.9 : Lignes Isomach obtenues avec le flux de Steger et Warming modifié

Interaction non réactive de deux jets en frontière proche dans une chambre ouverte
15 isovaleurs min= $0.41 \cdot 10^{-2}$, max=4.31, isoref=1

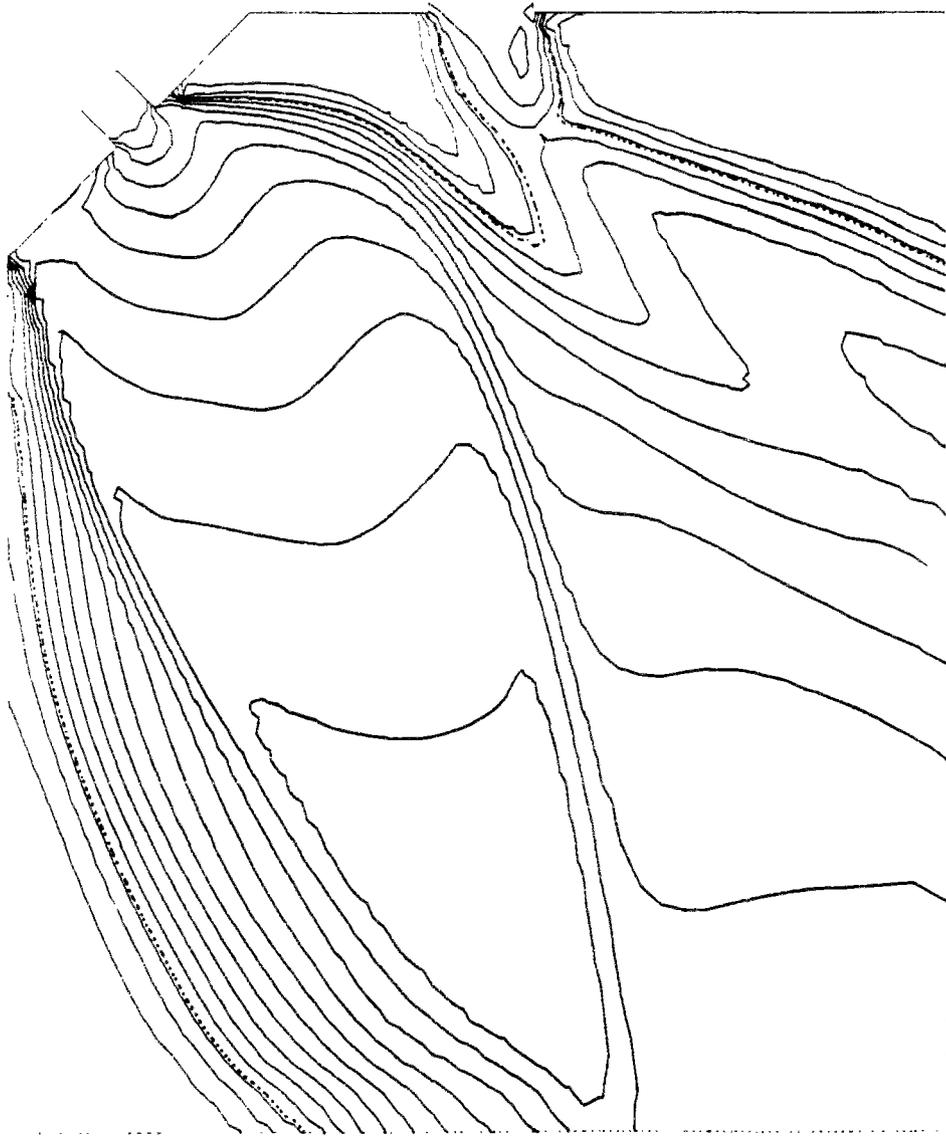


Figure IV.10 : Lignes Isomach obtenues avec le β -flux de Steger et Warming, $\beta = 0.7$

3. Comparaison en frontière éloignée des flux numériques de bord

Pour les cas tests présentés par la suite, on souhaite connaître parfaitement la structure des jets détendus. Pour cette raison et compte tenu des résultats obtenus sur des domaines de taille moyenne avec le flux de Steger et Warming et surtout avec le flux de Steger et Warming modifié (dissymétrie du jet), on envisage des maillages de grande taille. Pour limiter le nombre de points et donc les temps de calculs, on construit des maillages dont la taille des mailles va croissant. La diffusion numérique qui en découle sera sur le bord fortement subsonique même en écoulement non visqueux. On va donc maintenant étudier le comportement des deux flux envisagés sur ce type de maillage.

Le domaine de calcul que l'on utilise est de grande taille avec de grandes mailles près des bords sortants. Sur le maillage ainsi défini qui comporte 3640 points (voir figure IV.11), on étudie la détente du jet chaud seul. Les conditions initiales et aux limites ainsi que les quantités d'adimensionnement sont définies dans la section suivante. Les solutions que l'on présente ont été obtenues avec le flux numérique de van Leer, elles sont précises au premier ordre. Le nombre de CFL est égal à 0.7, on utilise une procédure de pas de temps local.

Pour mesurer la convergence des solutions vers l'état stationnaire, on définit un résidu normalisé à partir du flux de la densité:

$$res^{n+1}(\rho) = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} (\Phi_{\rho}^{n+1} - \Phi_{\rho}^n)^2 \right]^{\frac{1}{2}},$$

avec :

N le nombre de points du maillage,

ρ la densité du fluide.

Φ_{ρ}^n la composante de la densité du flux numérique à l'instant n .

Le résidu présenté est normalisé par le résidu à la première itération temporelle, on obtient alors:

$$residu^{n+1}(\rho) = \log_{10} \frac{res^{n+1}(\rho)}{res^1(\rho)}$$

Pour mettre en évidence les éventuels problèmes de bord dus aux conditions aux limites, on calcule deux résidus. Le premier prend en compte tous les points du maillage tandis que le deuxième nommé "Résidu localisé" est défini sur une partie de la chambre proche des entrées. La taille du domaine de calcul est en variable adimensionnée de 10000 par 10000, Le résidu localisé est quant à lui défini sur un domaine de dimension 300 par 400.

On a présenté figure IV.12-a (resp. figure IV.12-b) les courbes de convergence obtenues avec le flux de Steger et Warming (96) (resp. avec le flux de Steger et Warming modifié (100)). Ces résultats mettent en évidence l'inaptitude du deuxième flux à capter la solution stationnaire pour le maillage considéré. De plus, l'analyse de la solution près des bords fait apparaître que certaines variables prennent des valeurs fausses. Ce résultat peut en partie s'expliquer par l'étude sur une discontinuité stationnaire monodimensionnelle. En effet, cette étude est parfaitement adaptée ici puisque du fait de la taille du domaine de calcul et compte

tenu de la diffusion numérique, on peut supposer que la vitesse du fluide sur le bord est négligeable. Si on refait le calcul (101) pour le flux de Steger et Warming, on obtient:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 = \frac{p}{2c} \left(1 - \frac{\sqrt{\gamma_1}}{\sqrt{\gamma_2}}\right) \simeq 0.07 \frac{p}{2c} \\ \Phi_2 = p \\ \Phi_3 = \frac{pc}{2(\gamma_1 - 1)} \left(1 - \frac{\sqrt{\gamma_2} \gamma_1 - 1}{\sqrt{\gamma_1} \gamma_2 - 1}\right) \simeq 0.41 \frac{pc}{2(\gamma_1 - 1)} \end{array} \right.$$

Alors que pour les deux flux considérés le flux d'énergie Φ_3 est sensiblement identique, on constate que le flux de masse Φ_1 et surtout le flux de quantité de mouvement Φ_2 prennent des valeurs différentes, dans le cas du flux de Steger et Warming modifié le signe de $\Phi_2 - p$ montre que l'on fait entrer dans le domaine de la quantité de mouvement. Là encore cette étude bien que simplifiée à l'extrême permet de comprendre les comportements numériques observés sur les bords du domaine de calcul.

Par contre, près des entrées et comme le montre les courbes de résidu localisé les solutions sont pratiquement identiques. Dorénavant, pour les cas test à venir tous en éloigné, seul le flux de Steger et Warming sera utilisé. On trouvera figure IV.13 les lignes isomachs obtenues avec ce flux, le nombre de Mach maximal est de 3.90.

Maillage 3640 points de dimension 10000-10000

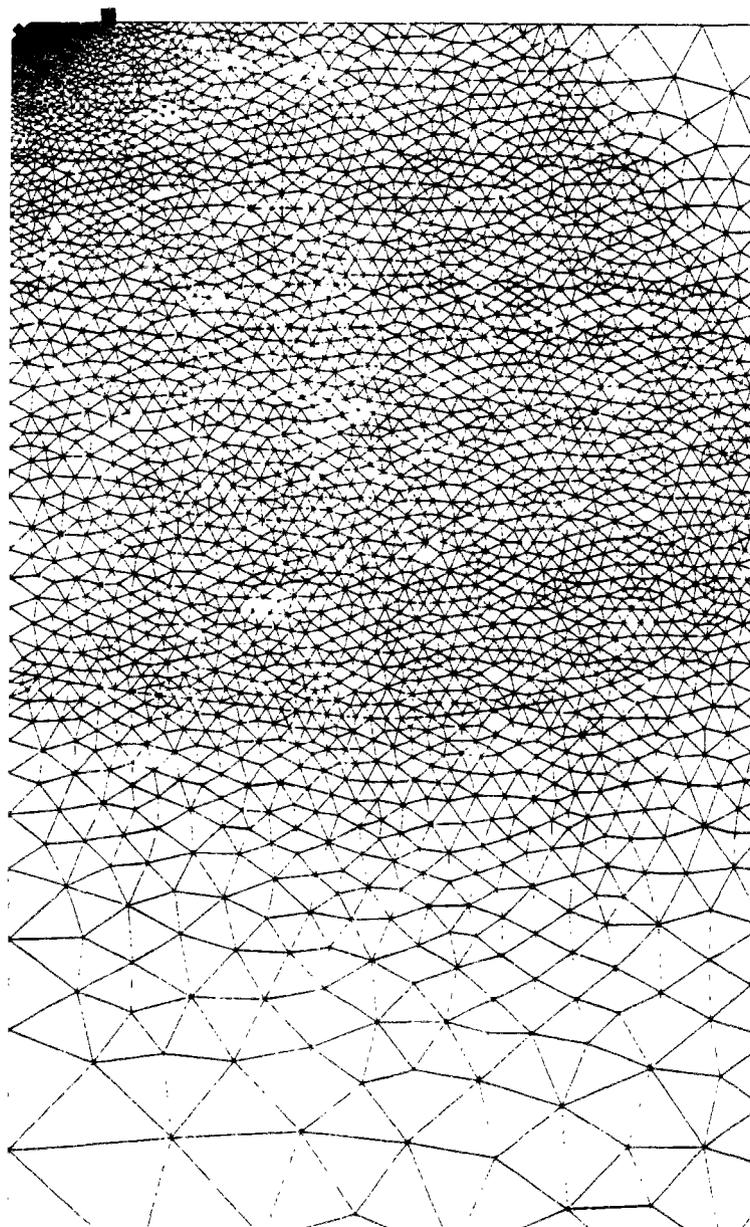


Figure IV.11 : Représentation partielle du maillage (300-471)

Détente du jet d'ergol - Comparaison des conditions aux limites

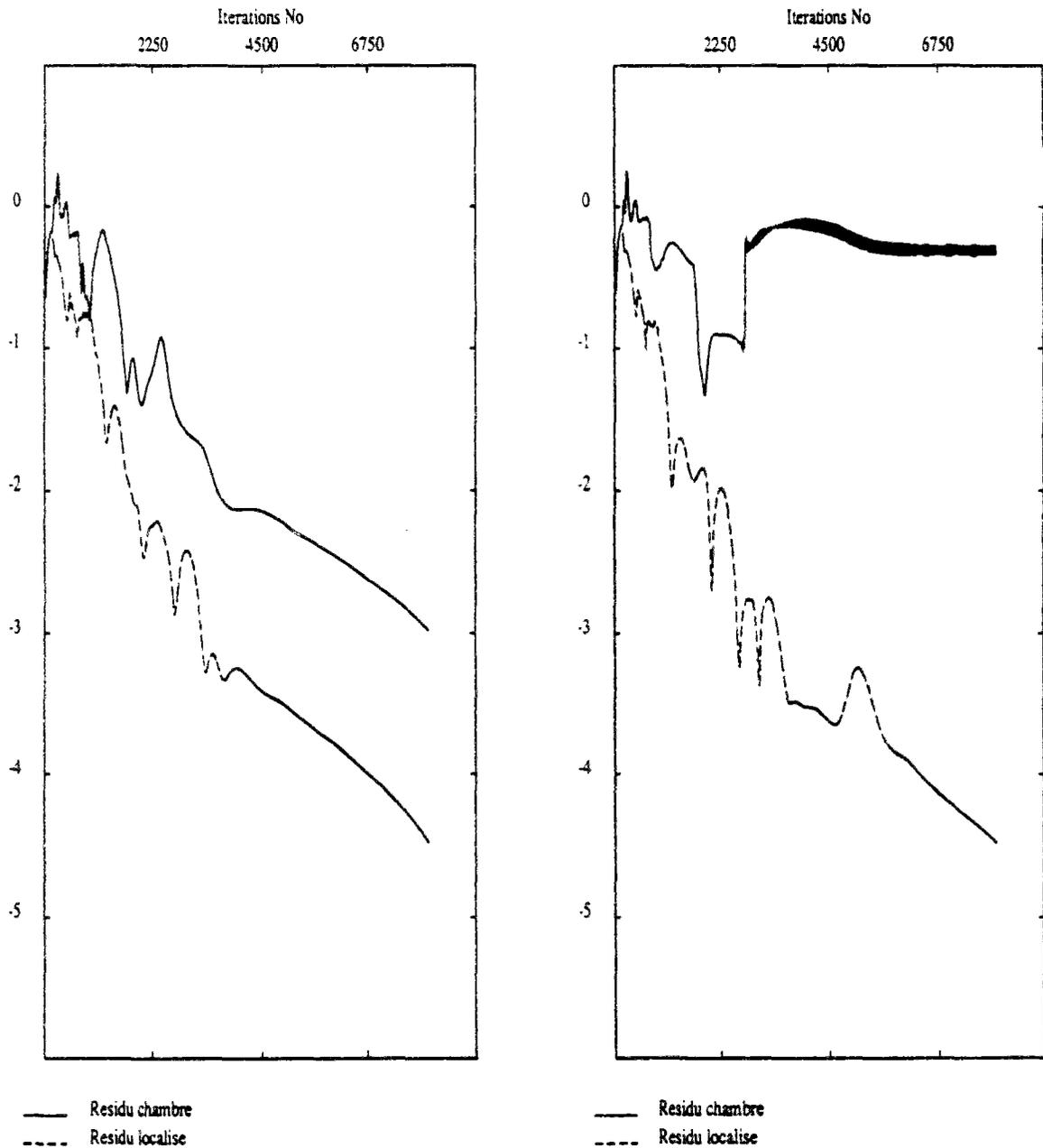


Figure IV.12 : Courbes de convergence obtenues avec les flux de SW (gauche) et de SWM (droite)

Détente du jet 1 - Flux de van Leer ordre 1
15 isovaleurs min= $2.4 \cdot 10^{-3}$, max=3.9, isoref=1

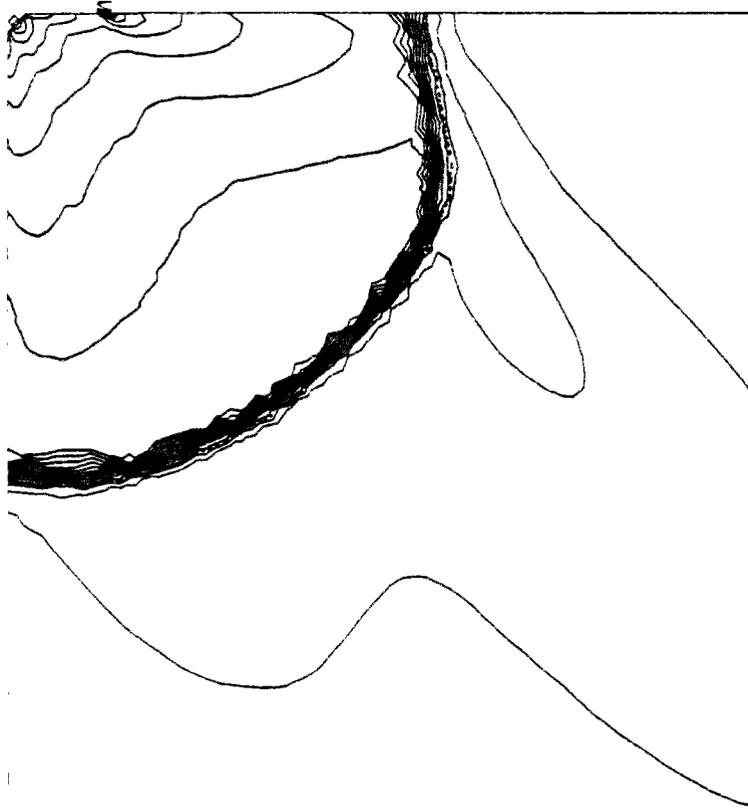


Figure IV.13 : Lignes Isomach obtenues sur le maillage à 3640 points

IV.5.4 Conclusions

Il ressort de cette étude sur le traitement des conditions limites que le choix du flux numérique de bord n'est pas quelque chose de parfaitement défini et d'immuable. En effet, il apparaît clairement que ce choix est intimement lié d'une part au problème physique (cas mono ou multi-espèces, caractéristiques de ces mêmes espèces identiques ou variables) et d'autre part aux conditions initiales et aux limites que l'on s'impose (raideur du problème). L'analyse mathématique sur les flux de bord est très complexe, on a simplement pu dans certains cas et en simplifiant considérablement le problème, justifier quelques résultats numériques. Quoiqu'il en soit, on a pu déterminer pour les problèmes considérés (en frontière proche ou en frontière éloigné) des flux numériques qui préservent une solution physique sur les frontières et qui de plus se sont avérés relativement robustes:

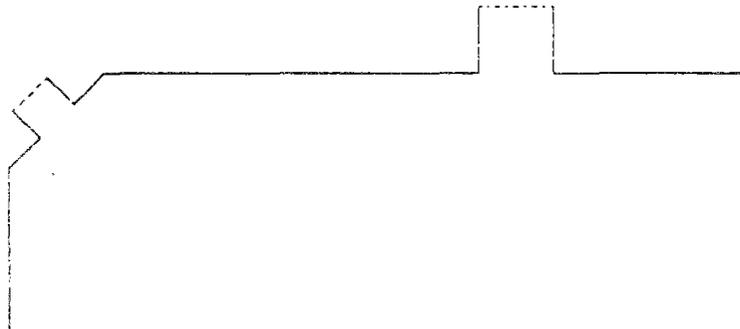
Pour les frontières éloignées on retiendra le flux de Steger et Warming pour lequel la convection des espèces se fait avec le schéma BL.

Pour les frontière proche, on utilisera le flux de Steger et Warming modifié utilisant le β -schéma et pour lequel on supprimera les termes $\frac{\partial \gamma}{\partial W}$.

IV.6 PROBLEME PHYSIQUE A RESOUDRE

IV.6.1 Introduction

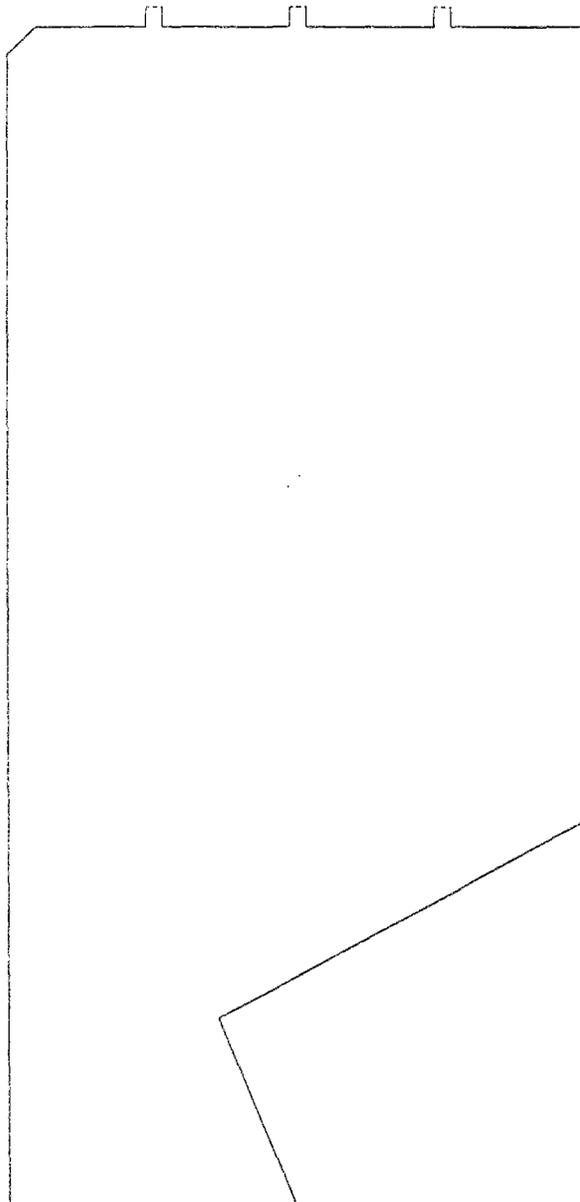
Le problème physique que l'on souhaite résoudre est l'interaction réactive de deux jets gazeux en écoulement transsonique. Principalement, deux géométries ont été utilisées. La première ne comporte qu'un seul injecteur et l'étude se limite donc à l'interaction de deux jets gazeux. Les caractéristiques géométriques sont présentées ci-après. Le diamètre de l'injecteur (jet froid) est de $5.6mm$ alors que celui du jet chaud est de $3.6mm$. La distance de l'injecteur à l'axe de symétrie est de $38mm$.



Géométrie simplifiée à 1 injecteur

La deuxième géométrie étudiée, plus proche de la réalité, conserve le rapport des sections réelles. Elle comporte trois injecteurs ainsi qu'un col, (voir figure ci-dessous).

Le diamètre du jet chaud (toujours positionné au même endroit n'est plus que de 0.1mm dans cette configuration (sa petite taille ne lui permet pas d'être vue sur la figure), alors que le diamètre des injecteurs est de 4.3mm . On peut déjà prévoir du fait des rapports des diamètres d'injections ($d_i/d_j = 43$) que ce cas test sera numériquement très difficile. Le rayon de la chambre est de 150mm , alors qu'au col il est de 54.1mm . La distance à partir de l'axe de symétrie des différents injecteurs est respectivement de $38, 75$ et 112mm .



Géométrie à 3 injecteurs avec col

IV.6.2 Caractéristiques physiques

Pour chacun des jets, les données sont les suivantes:

Grandeurs physiques	JET CHAUD	JET FROID
Pression (Pa)	$14.6 \cdot 10^5$	$1.2 \cdot 10^5$
Température ($^{\circ}K$)	2181	54.2
Vitesse (m/s)	98	431
Masse volumique (Kg/m^3)	1.	0.92
Nombre de Mach	1	1.0
Masse molaire (Kg/Mole)	$23 \cdot 10^{-3}$	$3.4 \cdot 10^{-3}$
Gamma	1.22	1.4

On choisit comme grandeur de référence:

$$Y_0 = 1, \quad l_0 = 0.001, \quad u_0 = 10, \quad \rho_0 = 1, \quad T_0 = 10.$$

(Toutes ces grandeurs sont données en unité S.I)

Dans la chambre, la pression initiale est choisie égale à $p_c = 0.5 \cdot 10^5 Pa$ tandis que la température est de $T_c = 100 \text{ }^{\circ}K$.

Aux frontières avalées, on a utilisé pour les conditions aux limites un état "à l'infini" donné par:

$$u_{\infty} = v_{\infty} = 0, \quad p_{\infty} = p_c \quad \text{et} \quad T_{\infty} = T_c.$$

Les autres paramètres propres à la diffusion et à la combustion sont présentés ci-dessous:

Le nombre de Lewis est pris égal à 1 tandis que le coefficient de diffusion thermique $\lambda = 135 J/m/s/^{\circ}K$. Le coefficient de diffusion moléculaire est alors connu.

Pour la flamme, on utilise les résultats issus de l'analyse asymptotiques (voir [53,39] où le chapitre 1). La température des gaz réactants est estimée à $T_u = 72 \text{ }^{\circ}K$. Pour une chaleur de réaction de $Q = 7300 kJ/kg$ la température des gaz brûlés vaut $T_b = 925 \text{ }^{\circ}K$ alors que pour la vitesse et l'épaisseur de flamme on a: $V_f = 53 m/s$ et $L_f = 0.93 mm$. Le problème est entièrement déterminé. On a regroupé dans le tableau suivant les paramètres physiques de la flamme (en variables adimensionnées):

T_u	T_b	ρ_u	Le	PR	ϵ_a	Y_u	Qh	$Arrh$	L_f	V_f
7.2	92.5	0.315	1	0.63	80	1	$2.14 \cdot 10^6$	55	0.93	5.3

IV.7 RESULTATS NUMERIQUES

IV.7.1 Détente d'un jet supersonique

On considère ici la détente d'un seul jet transsonique (nombre de Mach de 1.1, diamètre de l'injecteur 2 mm) dans une chambre ouverte rectangulaire. Les conditions initiales et aux limites sont en variables adimensionnées:

$$\text{Jet : } \begin{cases} \rho = 1.67 \\ u = 0 \\ v = -108 \\ p = 11700 \\ M = 1.1 \end{cases}$$

$$W_0(x, y) : \begin{cases} \rho_0 = 0.14 \\ u_0 = 0 \\ v_0 = 0 \\ p_0 = 1000 \end{cases} \quad W_\infty : \begin{cases} \rho_\infty = 0.14 \\ u_\infty = 0 \\ v_\infty = 0 \\ p_\infty = 1000 \end{cases}$$

Les caractéristiques physiques du jet et du fluide initialement dans la chambre sont identiques. La solution (représentée figure IV.15 au temps $t = 3 \text{ ms}$) est obtenue en utilisant une procédure de pas de temps global avec un flux numérique de Roe. Elle est précise au second ordre en espace et a nécessité 45000 itérations temporelles (temps CPU sur CRAY: 1h45mn). Le taille du domaine de calcul est de 2000×2000 , soit en variables dimensionnées $2m \times 2m$). Le maillage ainsi construit comporte 9387 points principalement situés dans l'axe du jet (voir figure IV.14 ou est présentée une vue partielle de ce maillage).

Le nombre de Mach maximal est de 4.72 tandis que la vitesse maximale est de $2190m/s$. La largeur du jet en entrée est de $2mm$, dans sa zone la plus large, elle est de $50mm$ (ce qui fait un rapport entre la taille du domaine de calcul et celle du jet de 40). Cet exemple tout à fait classique montre le bon comportement du code numérique. En effet, on retrouve sur la solution figure IV.15 (lignes isentropiques et lignes isomach), les chocs incidents et réfléchis, le choc droit ainsi que les lignes de glissement. On notera aussi la présence de la poche subsonique. Dans la zone en amont des chocs on vérifie bien que l'entropie est constante. Notons aussi que sur le choc incident, la déviation entropique est très faible. Ceci s'explique simplement par le fait que contrairement au choc droit (où la déviation entropique est importante) le saut de vitesse normal au choc est plus faible.

Maillage 9387 points de dimension 2000 - 2000

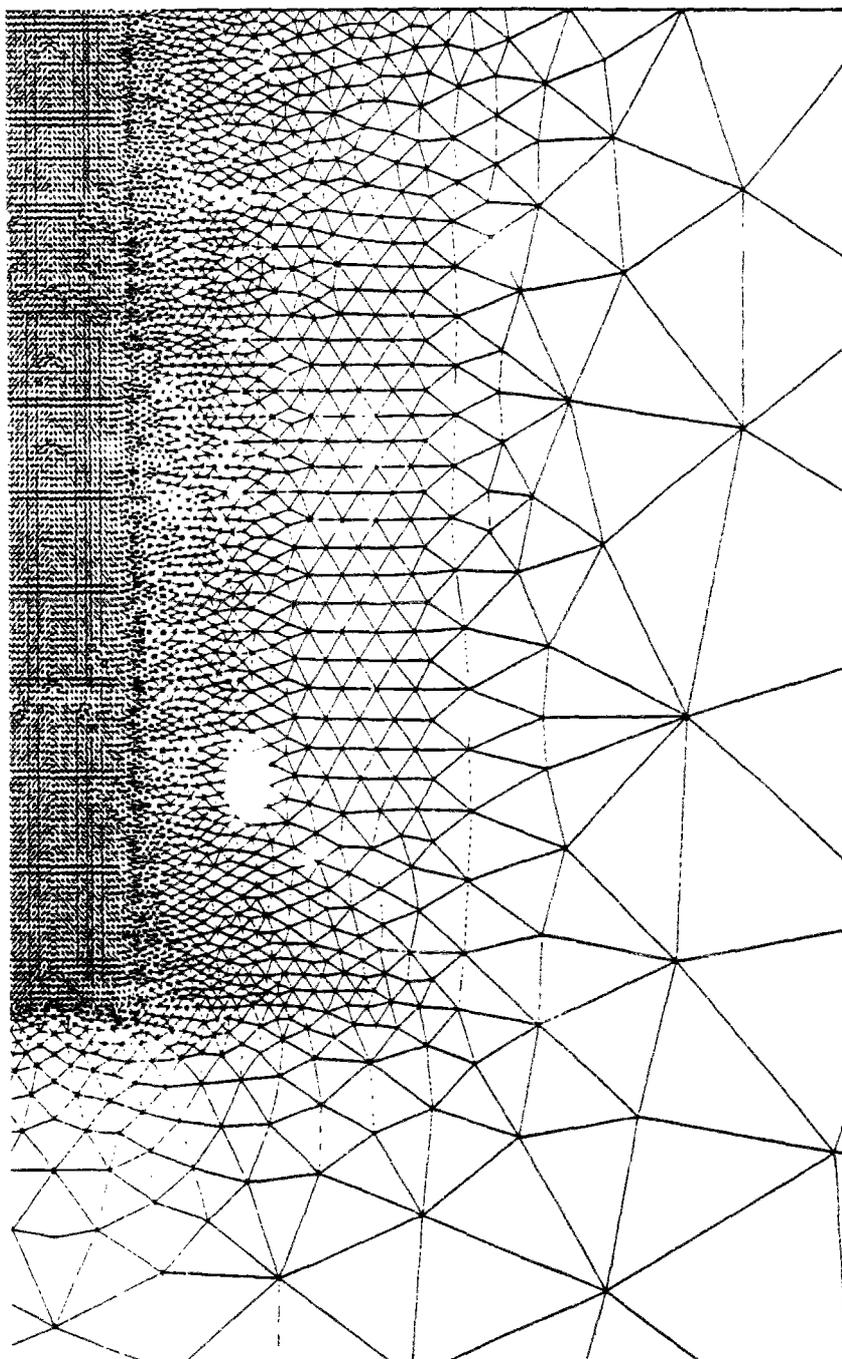


Figure IV.14 : Représentation partielle du maillage symétrique (120 - 250)

Détente d'un jet supersonique à γ constant dans une chambre ouverte

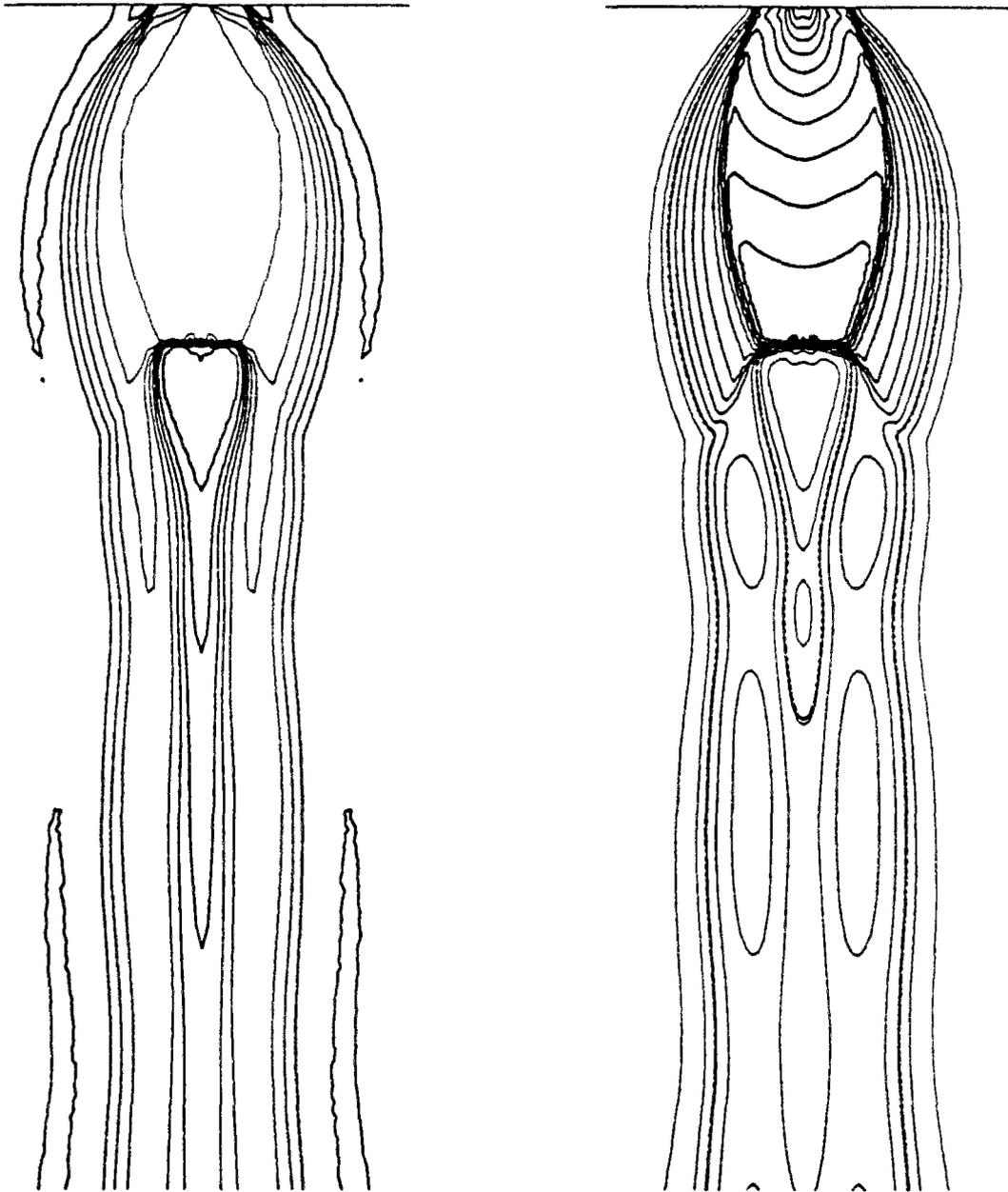


Figure IV.15 : Lignes Isentropiques et Isomach

IV.7.2 Interaction réactive de deux jets gazeux

On s'intéresse maintenant aux cas tests d'interaction de jets. Tous les résultats présentés par la suite sont précis au second ordre et ont été obtenus par utilisation du flux numérique de Roe avec une procédure de pas de temps local. L'expérience numérique a montré que les zones de discontinuité de contact à très faible nombre de Mach, qui sont visibles sur les figures présentés, sont supprimées par diffusion lorsque l'on utilise le flux numérique de van Leer.

1. Détente du jet allumeur

Dans un premier temps, on se propose d'analyser la détente du jet allumeur (nommé par la suite jet 1) en écoulement Euler pur (i.e sans diffusion moléculaires et sans diffusion thermique).

On prend pour cette expérience et celles à suivre les conditions définies dans la section IV.6 (Problème physique à résoudre).

Tous les dessins présentés sont à l'échelle $\frac{1}{3}$, une simple mesure à la règle permet de mesurer entre autres la position des différents chocs (1 mm dessin = 3 mm réel).

On a représenté figures IV.16 et IV.17 les lignes isoespèce 1 et isomach.

Pour cette expérience, on est parti d'une solution convergée à l'ordre 1 (8000 itérations temporelles avec un nombre de CFL de 0.7, le résidu étant de 10^{-4}) suivi d'un calcul à l'ordre 2 (4000 itérations temporelles au même nombre de CFL, baisse de deux décades du résidu). Le temps CPU total sur CONVEX C2 est de 2h10mn (1h6mn pour l'ordre 1 et 1h4mn pour l'ordre 2).

On obtient une solution dissymétrique. Cette dissymétrie est due d'une part à la présence de l'injecteur et d'autre part à la non symétrie de la tête de chambre. On peut découper le choc stationnaire en trois parties, deux où le choc est fortement oblique (parties inférieure gauche et supérieure droite) et une où le choc est pratiquement droit. L'analyse du champ de température fait apparaître derrière le choc oblique une discontinuité de contact (continuité des pressions et des vitesses) qui correspond à la séparation entre l'espèce injectée et l'espèce initialement au repos.

Détente du jet 1 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min= $0.16 \cdot 10^{-4}$, max=1, isoref=0.5

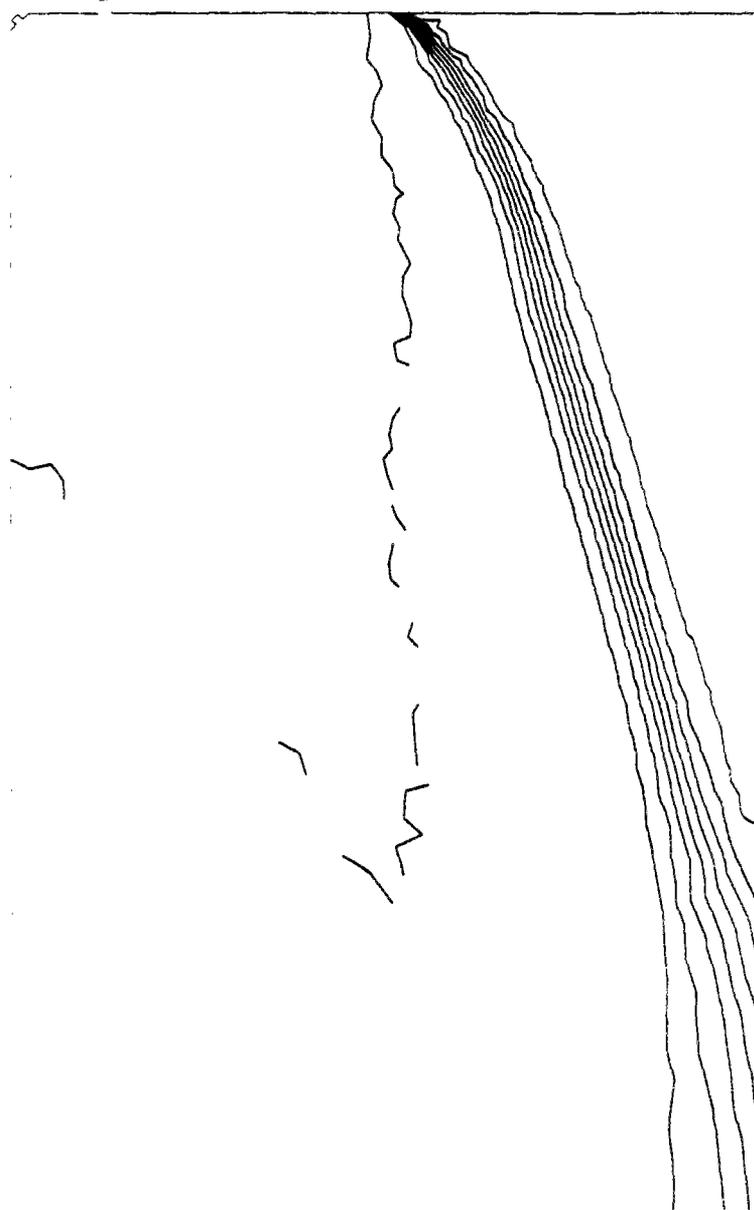


Figure IV.16 : Lignes Isoespèce 1 - Calcul sans diffusion

Détente du jet 1 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min= $1.7 \cdot 10^{-2}$, max=4.86, isoref=1



Figure IV.17 : Lignes Isomach - Calcul sans diffusion

2. Interaction non réactive des deux jets

On étudie maintenant l'interaction non réactive du jet allumeur (jet 1) et du jet injecteur (jet 2). On prend en compte pour cette expérience les diffusions moléculaires et thermique. Là encore, le calcul s'est déroulé en deux phases (une phase Euler à l'ordre 1 suivie d'une phase à l'ordre 2 prenant en compte les termes diffusifs). La présence du jet 2 entraîne comme le laisse apparaître les temps de calcul sur CONVEX C2 une meilleure convergence.

-Calcul ordre 1 Euler, 8000 itérations avec un nombre de CFL=0.7, résidu de $6.7 \cdot 10^{-5}$, temps CPU: 1h6mn.

-Calcul ordre 2 Euler et diffusion, 5000 itérations avec un nombre du CFL diffusif =0.2, baisse du résidu de 3 décades, temps CPU: 1h30mn.

On a représenté figures IV.18 et IV.19 les lignes isoespèce 1 et isomach.

La présence de la diffusion se fait clairement sentir (choc plus épais, diffusion importante des espèces) et rend plus difficile l'analyse physique des résultats, notamment pour la recherche des discontinuités de contact. La zone de recirculation apparaît ici nettement (figure IV.18); La structure du choc stationnaire est quant à elle fortement modifiée (en forme et en position). On notera la présence d'un choc près de l'injecteur dû à l'interaction directe des jets 1 et 2. Le nombre de Mach maximal passe de 4.86 (calcul précédent) à 4.39; en fait cette baisse est principalement due à la diffusion. La superposition du champ de température (non présenté ici) et les lignes isoespèces permet de localiser la zone où la combustion va avoir lieu. C'est l'objet de la partie qui suit.

Détente des jets 1 et 2 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min=0, max=1, isoref=0.5

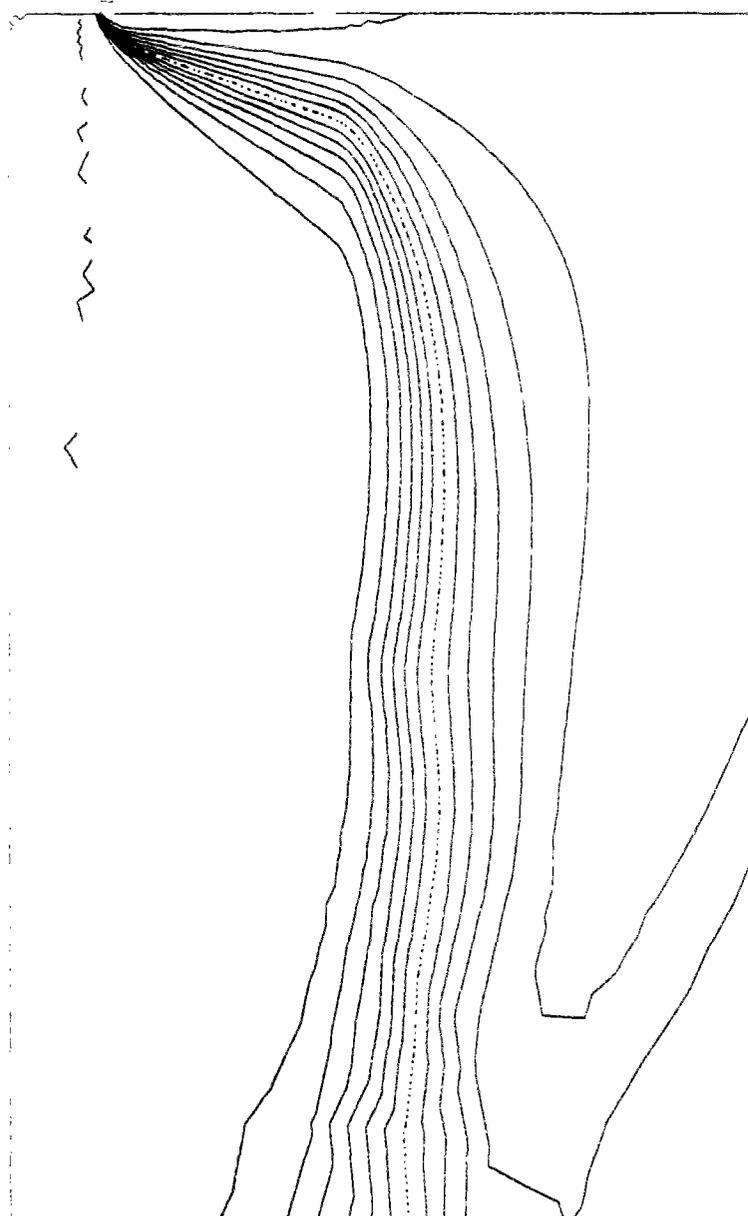


Figure IV.18 : Lignes Isoespèce 1 - Calcul avec diffusion

Détente des jets 1 et 2 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min= 10^{-3} , max=4.39, isoref=1

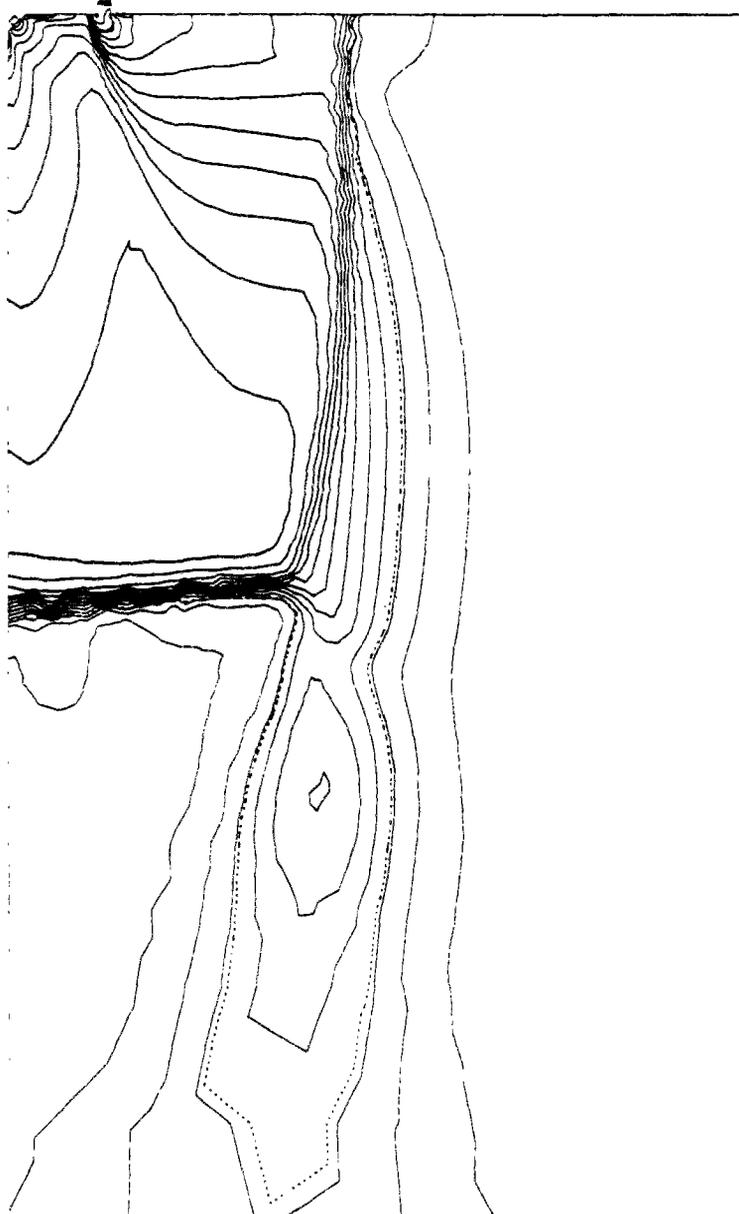


Figure IV.19 : Lignes Isomach - Calcul avec diffusion

3. Interaction réactive des deux jets

On part pour cette expérience de la solution précédente et à $t=0$ on active le processus de combustion. On choisit pour cette expérience de ne présenter que la solution stationnaire.

On a représenté figure IV.20 les lignes isomach et figure IV.21 le champ de température. On trouvera figure IV.22 un agrandissement du terme de réaction Ω et des isoespèces Y_2 .

Comme le laissaient prévoir les résultats précédents, la zone de combustion se trouve localisée autour de l'injecteur. Le processus de combustion apparaît clairement sur les lignes isomach et sur le champ de température. A noter aussi que le maillage n'est pas suffisamment fin pour capter correctement la flamme et ceci malgré le nombre de Zeldovich relativement petit. On remarquera cependant que la température des gaz brûlés est assez proche de celle prévue par l'étude asymptotique valable pour les flammes isobares (voir chapitre 1); ceci peut être rapproché du fait que dans la zone où $\Omega \neq 0$ l'écoulement est subsonique (on avait déjà remarqué ce phénomène dans de précédents calculs).

Combustion du jet 2 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min= $0.2 \cdot 10^{-2}$, max=4.30, isoref=1



Figure IV.20 : Lignes Isomach - Calcul avec combustion

Combustion du jet 2 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min=5.41, max=218, isoref=100

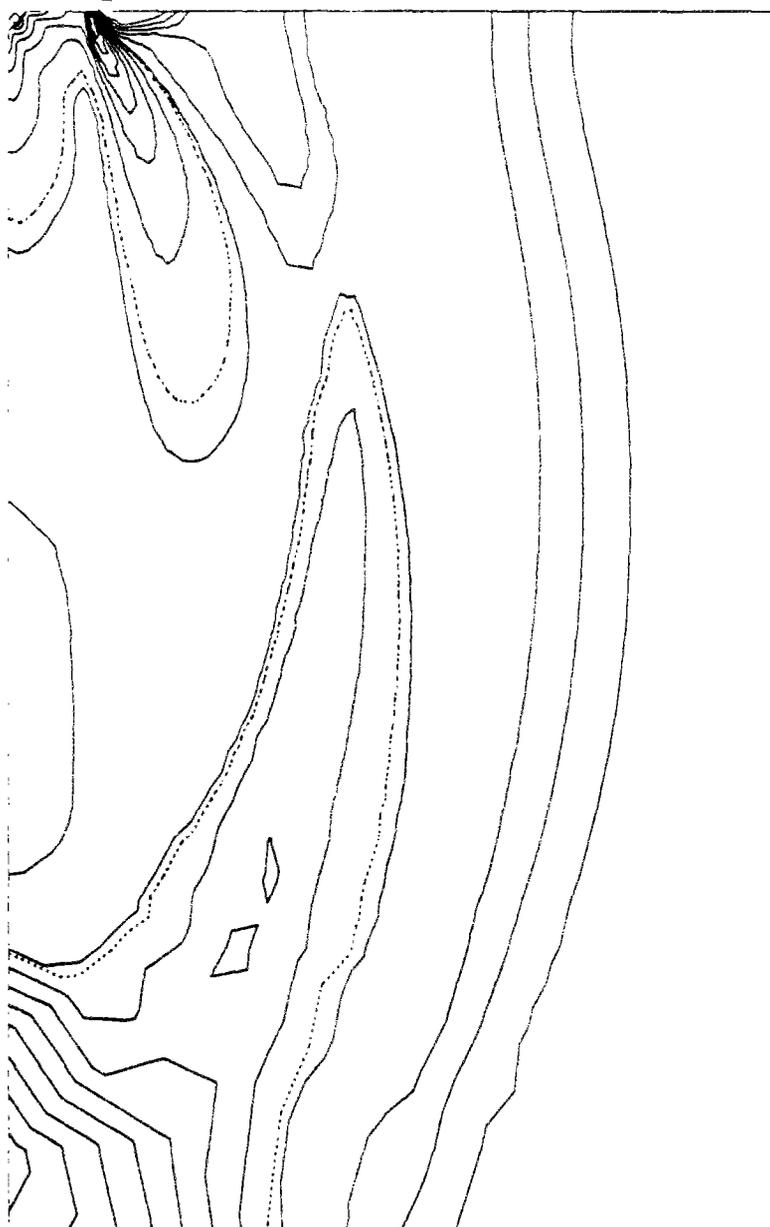
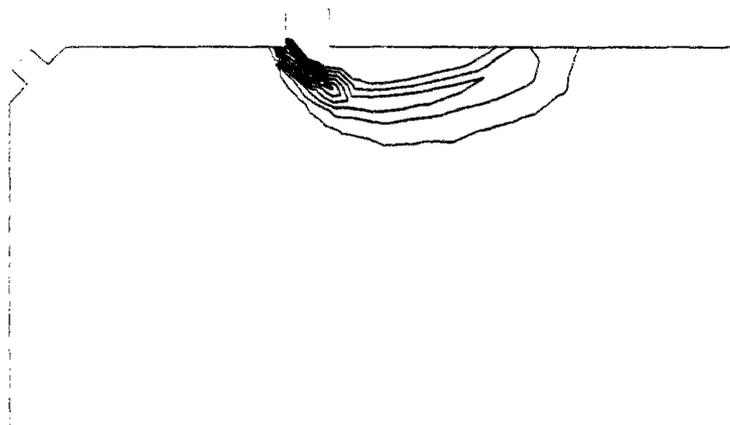


Figure IV.21 : Lignes Isotherme - Calcul avec combustion

Combustion du jet 2 - Flux de Roe ordre 2

10 isovaleurs min=0, max=1.46, isoref=1



10 isovaleurs min=0, max=1, isoref=0.5

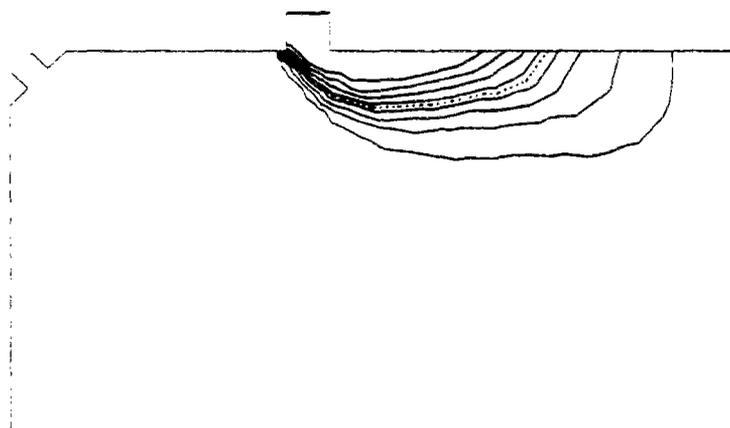


Figure IV.22 : Lignes Isoomega et Isoespèce 2 - Calcul avec combustion

IV.7.3 Interaction des jets sur la géométrie à 3 injecteurs

Les conditions d'injection sur cette géométrie sont les mêmes que celles utilisées dans les calculs précédents. Le maillage utilisé est là encore relativement grossier (voir figure IV.23), il comporte 2333 points. Tous les dessins présentés par la suite sont, sauf mention spéciale, à l'échelle $\frac{2}{5}$. Tous les résultats numériques présentés dans cette partie sont précis au second ordre et ont été obtenus par utilisation du flux numérique de Roe. Comme nous l'avons évoqué lors de la présentation de la géométrie, le faible diamètre du jet chaud (0.1 mm) conduit à des disparités importantes en termes de taille de maille. Ceci est d'autant plus vrai que, pour des raisons de précision (détente du jet chaud symétrique), il apparaît nécessaire de mailler assez finement au voisinage de cette entrée. De ce fait, l'obtention d'une solution instationnaire (par utilisation d'une procédure de pas de temps global) est impossible à obtenir (temps de calcul très importants) et ce même en l'absence des termes diffusifs et chimique. On rappelle à ce sujet que tous les résultats présentés dans ce chapitre ont été obtenus par utilisation du pas de temps local (sauf pour le cas test de la détente du jet supersonique). Pour pallier cet inconvénient, différentes méthodes sont actuellement envisageables. La première consiste à utiliser un schéma numérique implicite; toutefois cette solution semble a priori peu satisfaisante car dans le meilleur des cas en écoulement non visqueux les gains ne pourront excéder un facteur 10. De plus même avec des schémas implicites, la présence des termes diffusifs et du terme source limitent de façon sensible le pas de temps. Une deuxième solution consiste en l'utilisation d'une méthode multi-domaine; notre connaissance actuelle sur ces méthodes ne permet pas de dire si elles conduiront à une réduction sensible des temps de calcul. Enfin, la dernière solution envisageable consiste en l'utilisation d'une méthode multigrilles [38]; l'intérêt direct de cette méthode est qu'elle s'adapte parfaitement à la résolution des termes diffusifs, et qu'elle donne des résultats très satisfaisants en écoulement non visqueux.

Maillage 2333 points de dimension 150-500
Représentation à l'échelle 1/3

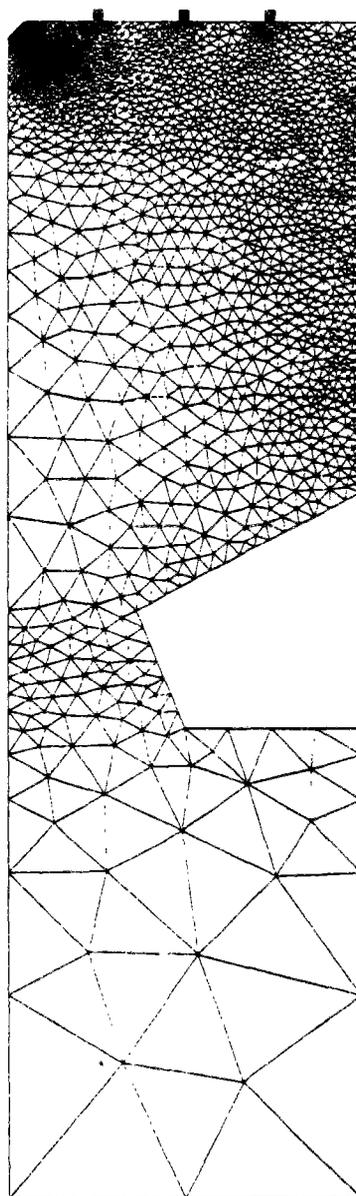


Figure IV.23 : Représentation totale du maillage

1. Détente du jet allumeur

On se propose tout d'abord d'étudier la détente du jet chaud allumeur en écoulement Euler pur. La solution obtenue par une procédure de pas de temps local a nécessité 20000 itérations (nombre de CFL=0.7, le résidu est de 10^{-3} , le temps CPU sur CONVEX-C2 est de 3 heures). On trouvera figure IV.24 les lignes isomach et le champ de vitesse. La détente du jet est très importante et se fait dans une zone très proche de l'entrée. Ceci est tout à fait en accord avec les résultats précédents bien que le maillage utilisé au voisinage de l'entrée ne permette pas la capture des différents chocs. L'analyse des solutions obtenues montre que l'espèce initialement dans la chambre est presque entièrement évacuée; le manque de convergence ainsi que le tourbillon justifie que cette dernière ne soit pas entièrement évacuée. La présence de la zone de recirculation au centre de la chambre entraîne une déviation sensible du jet et tend à rendre uniforme les variables hydrodynamiques (pression $p \simeq 450, 500$, température $T \simeq 200$, densité $\rho \simeq 0.05$). Cette zone tourbillonnaire provient de la vorticité $\nabla\rho \wedge \nabla p$ qui est non nulle. En anticipant sur les résultats à venir, on peut d'ores et déjà prévoir, du fait des valeurs de la température, un allumage correct.

Détente du jet 1
15 isovaleurs

min=0.08, max=263.2

min= $1.3 \cdot 10^{-3}$, max=4.23, isoref=1

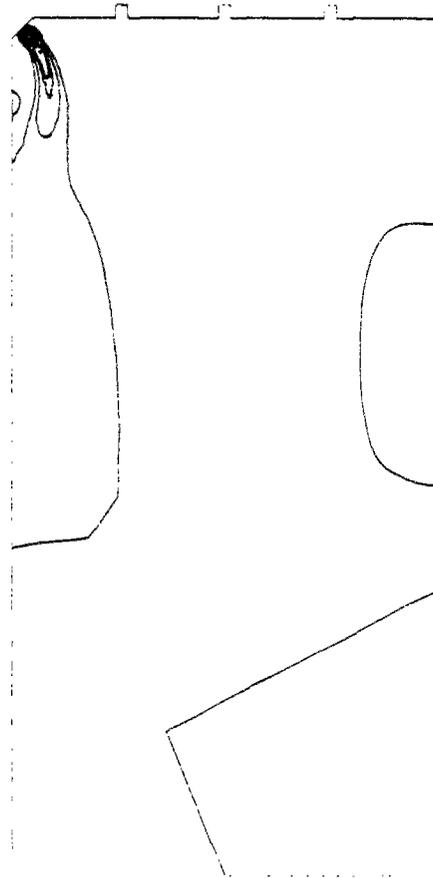
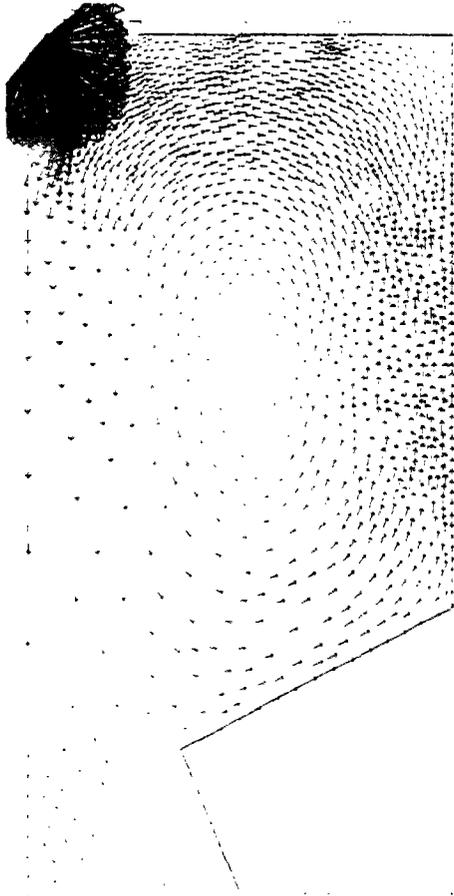


Figure IV.24 : Champ de vitesse et lignes Isomach

2. Interaction non réactive des jets

Toujours sans diffusion thermique et moléculaire, on s'intéresse maintenant à l'interaction entre le jet chaud et les trois jets froids. La situation dans ce cas est beaucoup plus complexe, et il n'a pas été possible d'obtenir une solution stationnaire. On présente la solution obtenue à 12000 itérations bien que celle-ci soit non physique, puisque obtenue par utilisation d'une procédure de pas de temps local. On a représenté les lignes isoespèces 1 et isomach figure IV.25, les champs de vitesse et de température figure IV.26. L'analyse du résidu et des solutions à différents "instants" montrent que l'on a une solution périodique. Cette instabilité qui apparaît directement sur la discontinuité de contact (voir entre autres figure IV.27 où sont représentées les lignes isodensité à deux "instants") est d'origine acoustique liée à la réflexion sur les parois des ondes de pression. Cependant, l'impossibilité pratique d'obtenir une solution physique ne permet pas de vérifier réellement si cette instabilité est physique ou non. Un calcul identique en supprimant l'injecteur le plus proche du jet chaud (non présenté ici) montre que l'on obtient le même comportement: discontinuité de contact instable entre le jet chaud et le deuxième injecteur.

En présence de diffusion (thermique et moléculaire), toujours sans réaction chimique, l'instabilité précédente persiste. Simplement, l'effet de la diffusion a pour conséquence de réduire son amplitude.

Interaction non réactive des jets (3 injecteurs)
15 isovaleurs

min=0. max=1, isoref=0.5

min= $4.3 \cdot 10^{-3}$, max=4.02, isoref=1

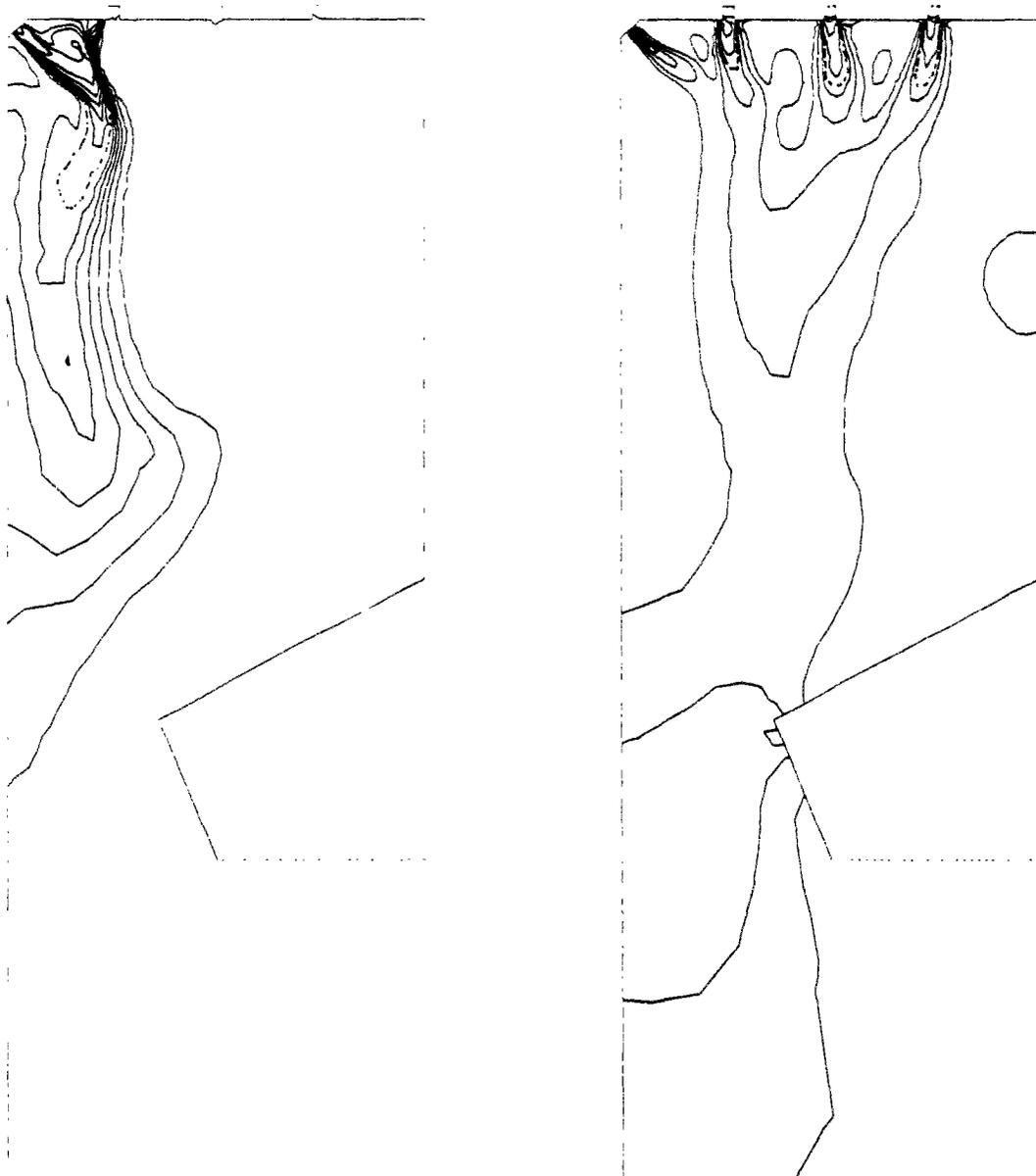


Figure IV.25 : Lignes Isoespèce 1 et Isomach

Interaction non réactive des jets (3 injecteurs)
15 isovaleurs

min=0.47, max=257.3

min=4.01, max=238.2, isoref=100

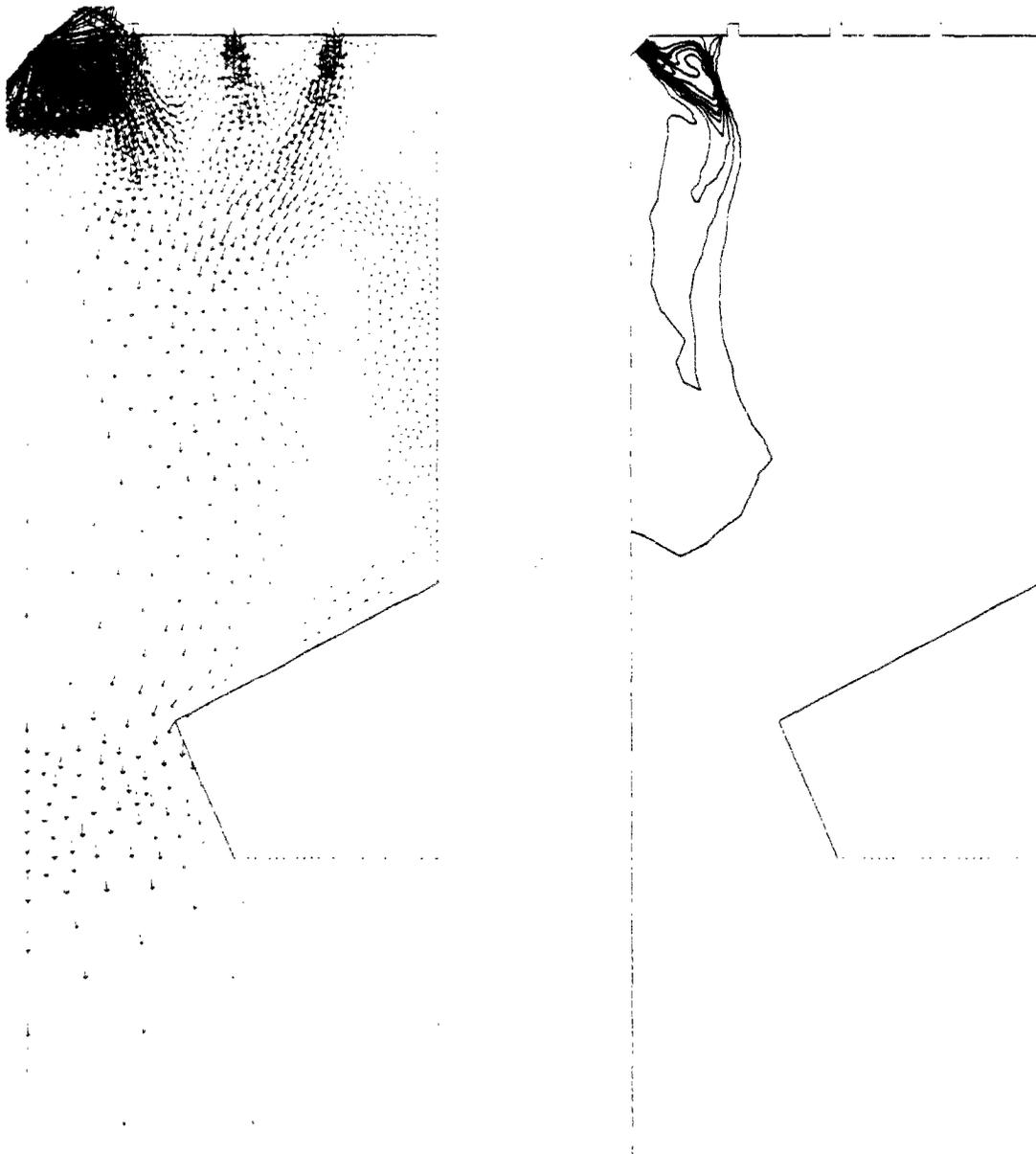


Figure IV.26 : Champ de vitesse et lignes Isotherme

Interaction non réactive des jets (3 injecteurs)
 10 isovaleurs tracées entre 0 et 0.5, isoref=0.25



Figure IV.27 : Champ de densité à 12000 et 12100 itérations

3. Interaction réactive des jets

On s'intéresse dans cette partie à l'interaction reactive avec diffusion des jets. Plus précisément, on considère deux cas tests. Le premier comporte les trois injecteurs (figures IV.28 et IV.29) tandis que le deuxième n'en comporte que deux (figures IV.30 et IV.31). Dans les deux cas, la combustion s'effectue correctement. On retrouve une zone de combustion localisée près des injecteurs. A l'intérieur de la chambre, en amont du col, on a des solutions stationnaires. Cependant, comme le montre le champ de vitesse (figures IV.28 et IV.30) un tourbillon sur la frontière de sortie empêche une convergence globale de la solution. Cette non convergence globale s'explique aussi par le fait que les frontières "à l'infini" sont relativement proches, d'autant plus que l'activation du processus de combustion ainsi que la présence du col donnent une solution sur les bords du domaine très éloignée de la solution W_∞ supposée à l'infini. Ces calculs nécessiteraient d'être effectués sur une géométrie de plus grande taille. On constate figures IV.29 et IV.31 que le terme source Ω est plus faible dans le cas où seulement deux injecteurs sont présents, ceci s'explique simplement par le fait que dans ce cas, la pression et donc la densité est plus faible alors que la température est dans les deux cas sensiblement la même. On remarque aussi que le volume occupé par le réactant et par l'injecteur est plus importante dans le second cas, c'est à dire lorsque la pression est la plus faible.

Comme cela a déjà été dit, les variables hydrodynamiques dans la chambre sont pratiquement constantes (sauf près du jet chaud). Dans le cas où l'on considère trois jets, on obtient:

$$p \simeq 2000, \quad \rho \simeq 0.07, \quad T \simeq 92$$

Lorsque deux jets sont présents, on a:

$$p \simeq 1500, \quad \rho \simeq 0.06, \quad T \simeq 92$$

La baisse de pression est tout à fait normale, puisque globalement l'énergie libérée dans le second cas est réduite. Par contre on retrouve dans la chambre une température égale à la température théorique des gaz brûlés. Par rapport à la solution Euler sans combustion, on remarquera l'accroissement très important de la vitesse des gaz au passage du col. Dans les deux cas, la tuyère est amorcée, le col est sonique.

Interaction réactive avec diffusion des jets (3 injecteurs)
15 isovaleurs

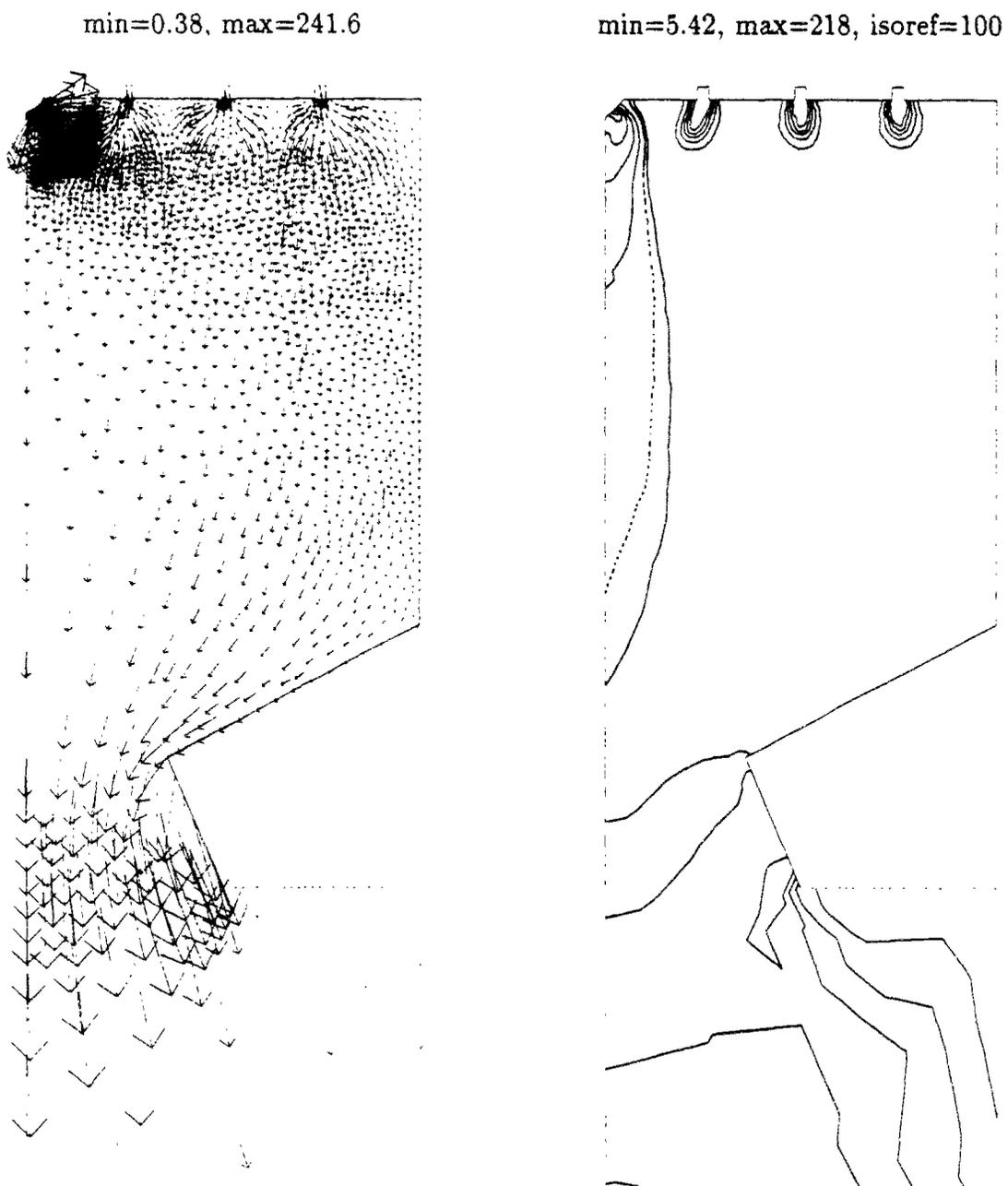
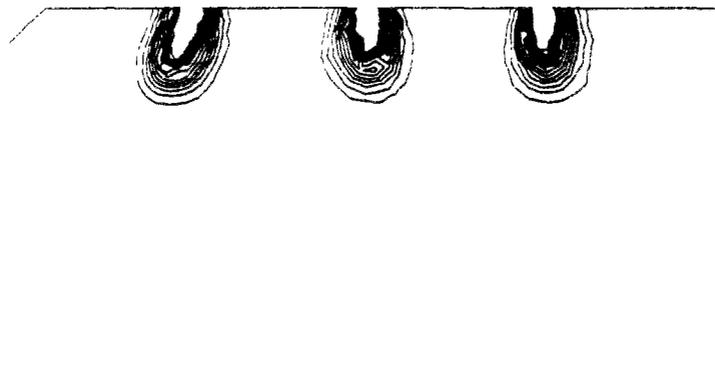


Figure IV.28 : Champ de vitesse et lignes Isotherme

Interaction réactive avec diffusion des jets (3 injecteurs)

10 isovaleurs min=0, max=1.12, isoref=0.5



10 isovaleurs min=0, max=1, isoref=0.5

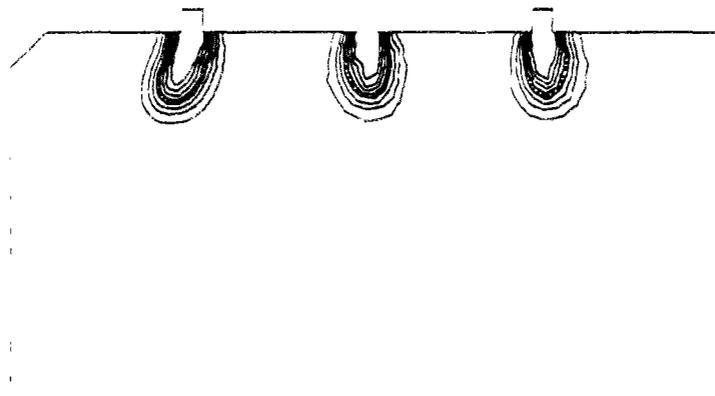


Figure IV.29 : Lignes Isoomega et Isoespèce 2 à l'échelle $\sim \frac{3}{5}$

Interaction réactive avec diffusion des jets (2 injecteurs)
15 isovaleurs

min=0.13, max=234.8

min=5.41, max=218, isoref=100

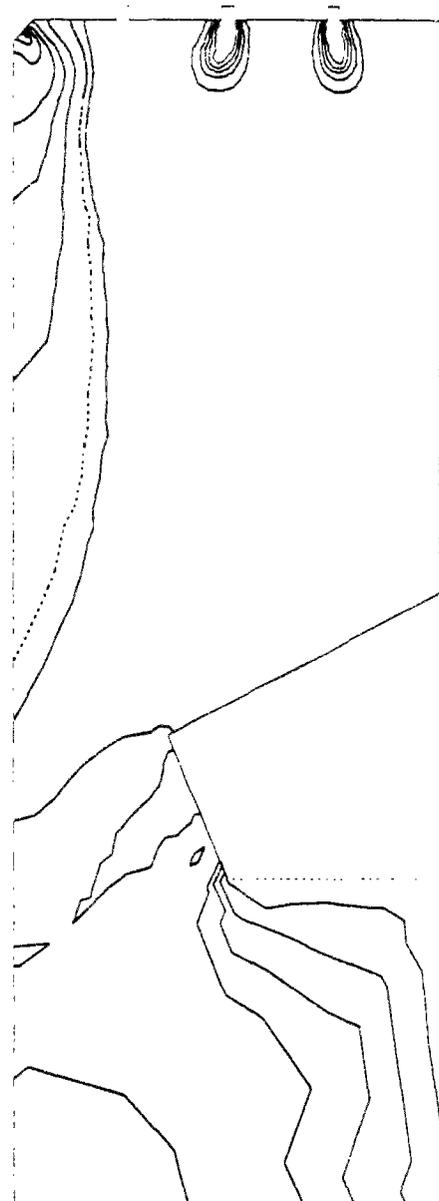
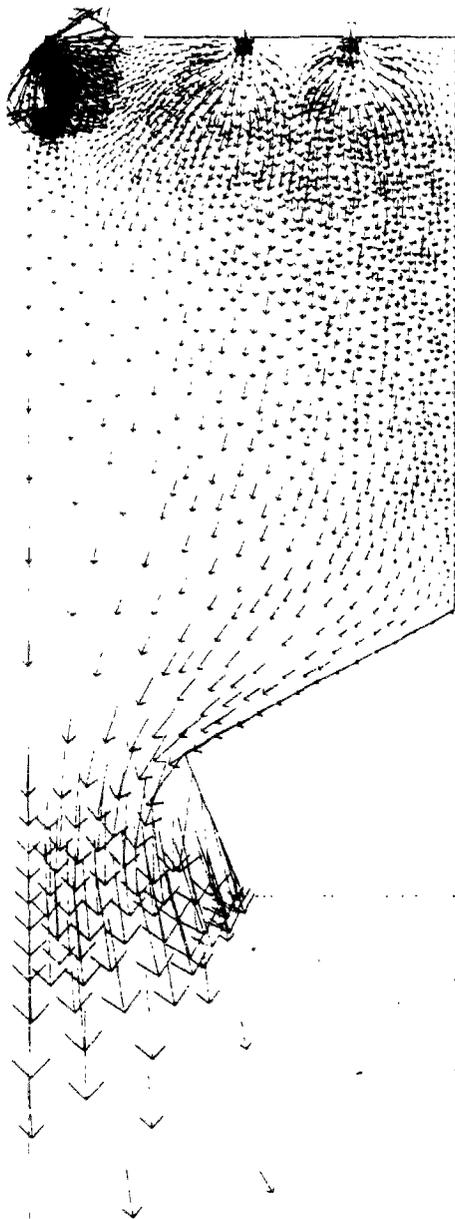
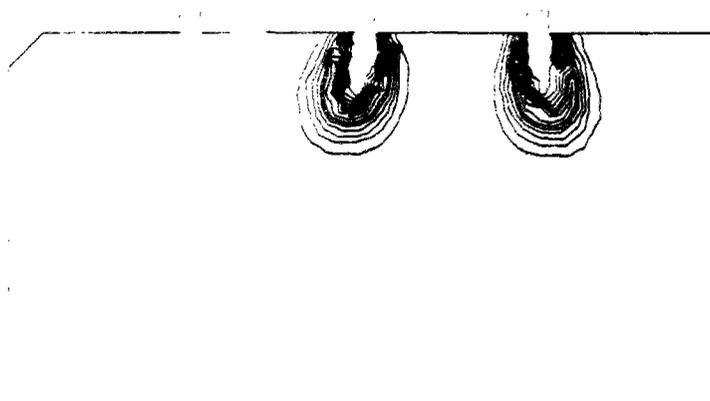


Figure IV.30 : Champ de vitesse et lignes Isotherme

Interaction réactive avec diffusion des jets (2 injecteurs)

10 isovaleurs min=0, max=0.84, isoref=0.5



10 isovaleurs min=0, max=1, isoref=0.5

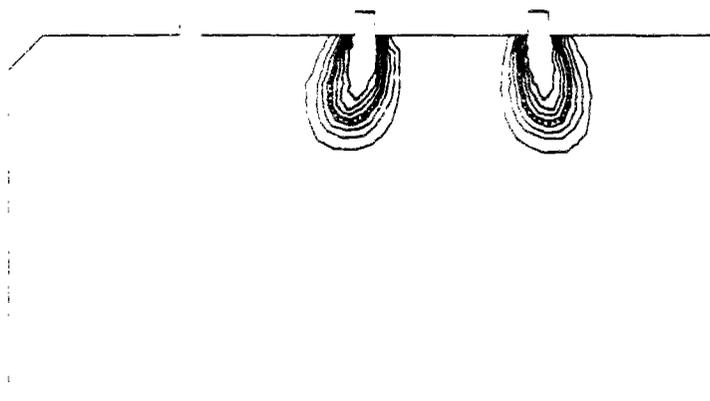


Figure IV.31 : Lignes Isoomega et Isoespèce 2 à l'échelle $\sim \frac{3}{5}$

IV.7.4 Présentation d'une solution stationnaire obtenue par une procédure d'adaptation dynamique du maillage

La simulation d'écoulements de jets supersoniques, comme nous avons pu le voir, nécessite la capture précise des chocs et des lignes de glissement qui constituent les principaux détails de ce type d'écoulement. Dans l'état actuel des méthodes numériques, il n'existe pas à notre connaissance de méthodes suffisamment fiable permettant de représenter ces discontinuités en les ajustant par des discontinuités numériques (méthodes de "shock fitting"). Ces discontinuités doivent alors être capturées, c'est à dire approchées par une transition continue et calculées par des volumes finis comme les autres détails de la solution. Il en résulte une représentation de ces détails de faible précision (la capture d'un choc est au plus précise à l'ordre un), d'où la nécessité de disposer de maillages fins au moins localement. Le même souhait de finesse locale du maillage résulte également de la présence de flammes assez minces ou de zones d'ignition localisées. Un module raffineur-déaffineur se présentant sous la forme d'une boîte noire a été couplé au code bidimensionnel multi-espèces par M. LORIENT et N. MAMAN. On se propose dans cette section de présenter une solution stationnaire permettant de mettre en évidence les avantages tant sur la qualité des solutions que sur les gains en temps CPU (à qualité de solution équivalente) du code ainsi construit (voir [16] pour plus de détail concernant la procédure d'adaptation dynamique).

Le maillage macro servant de base au calcul est présenté figure IV.32, il comporte 162 sommets. On choisit de présenter la solution stationnaire (maillage et lignes isomach en écoulement Euler pur) obtenue par la procédure d'adaptation dynamique (figures IV.33 et IV.34) qui correspond à la détente du jet chaud dans la chambre ouverte (i.e figure IV.17 sans adaptation). Le maillage raffiné comporte 8000 points, le temps de calcul est de l'ordre 3 heures sur CONVEX-C2. Pour un surcoût en temps de calcul de 50%, on obtient une solution d'une grande précision dans les zones de forts gradients. On distingue nettement la structure de la solution: choc droit, choc incident et choc réfléchi. A titre d'exemple, le même calcul sur maillage uniformément raffiné nécessiterait 10^7 noeuds pour un temps de calcul de l'ordre de 5000 heures, ceci se passe de commentaire.

Maillage macro (avant raffinement)

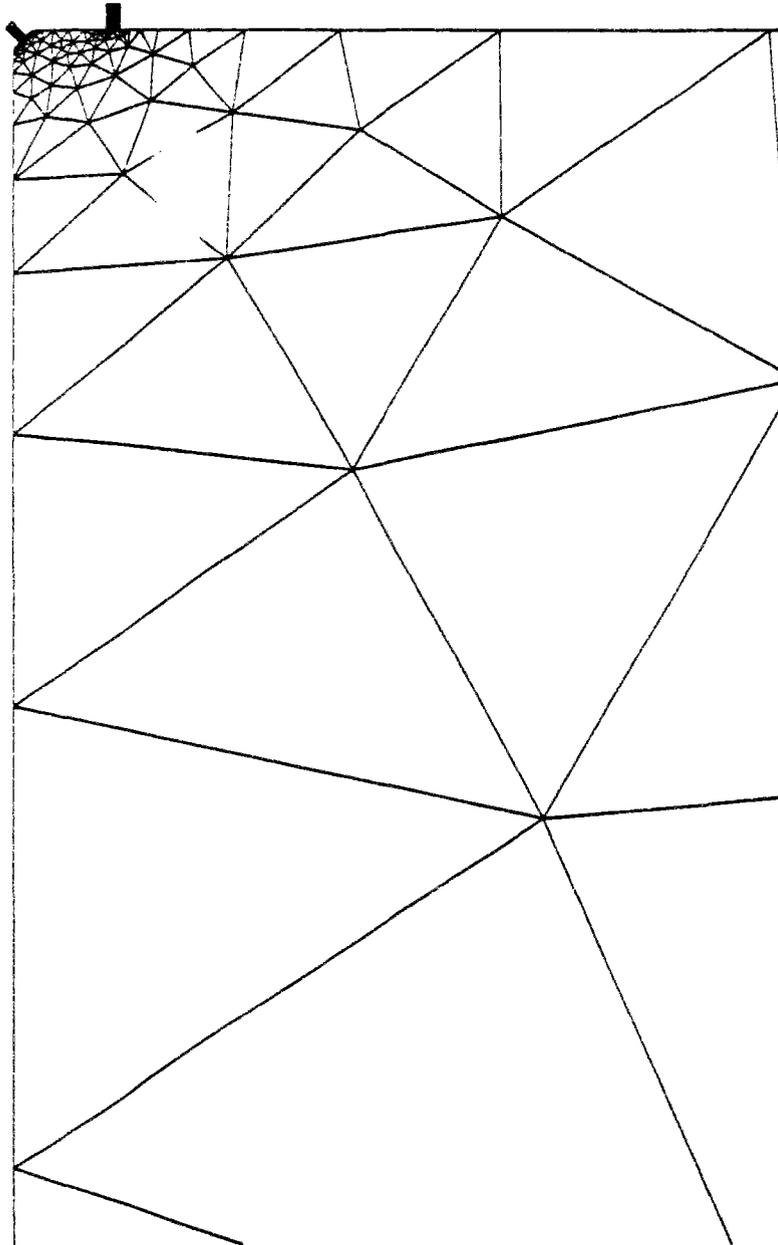


Figure IV.32 : Nombre de sommets: 162, Nombre d'éléments: 247

Détente du jet 1 - Flux de Roe ordre 2

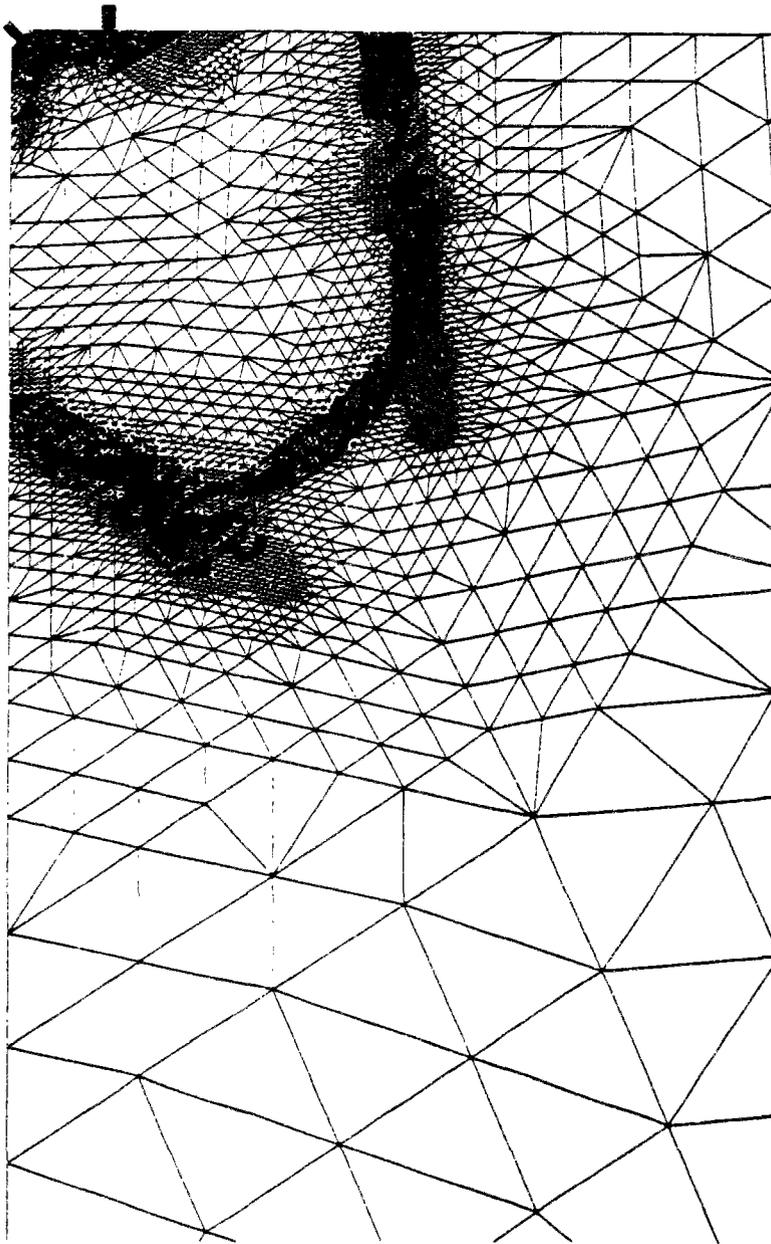


Figure IV.33 : Maillage adapté - Solution stationnaire

Détente du jet 1 - Flux de Roe ordre 2
15 isovaleurs min=0.025, max=4.437, isoref=1

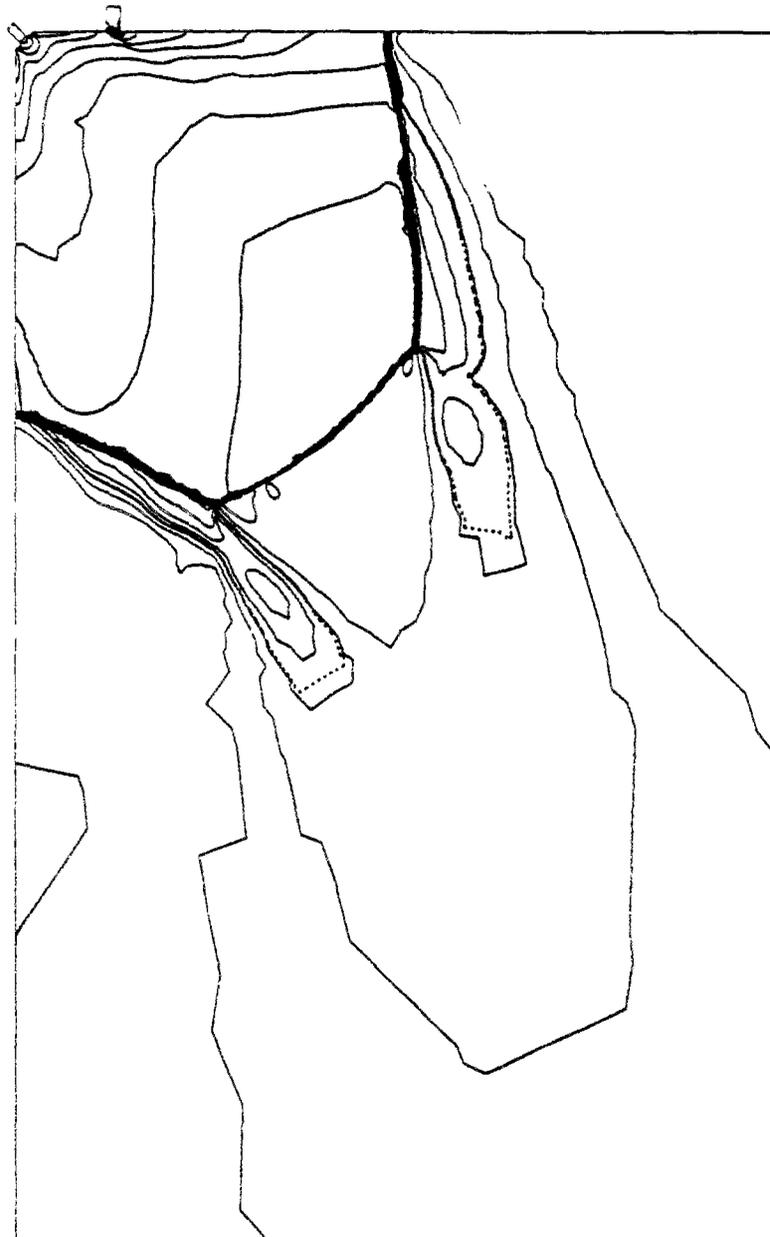


Figure IV.34 : Lignes isomachs - Calcul sans combustion ni diffusion

IV.8 CONCLUSION

Il ressort de cette étude que le code numérique mis au point s'est avéré performant et robuste, pour des calculs difficiles (rapports de pression voisin de 30).

On a pu traiter correctement le problème des frontières aval en construisant des flux numériques de bord adaptés aux différents problèmes considérés; de plus ces flux se sont avérés à l'usage très robustes. Par contre, on n'a pas été en mesure de résoudre le problème particulier dû à tous les schémas décentrés lorsque γ est variable (problème évoqué dans l'annexe B du chapitre 2), on notera cependant que sur la solution à l'intérieur du domaine ce problème n'est pas vraiment gênant alors qu'il apparaît essentiel (comme le montre l'étude sur les conditions aux limites) sur le bord du domaine. Cela nous a d'ailleurs conduit à prendre des maillages de dimensions très importantes.

Les calculs que l'on a présentés ici nécessiteraient d'être effectués sur des maillages plus fins (comme le montre les résultats utilisant la procédure d'adaptation dynamique) afin d'améliorer la qualité des solutions. Pour la recherche d'une solution *stationnaire* la procédure d'adaptation statique reste quand même la solution la moins onéreuse.

L'extension à une géométrie plus complexe (multiplication du nombre d'injecteurs) ne pose pas de problèmes particuliers comme le montre les derniers calculs. Par contre la réduction du diamètre d'injection du jet chaud pose un problème d'ordre dimensionnel et l'obtention dans ce cas d'une solution instationnaire nécessiterait la mise au point de nouvelles méthodes numériques (multi-domaines, multi-grilles,...).

IV.9 ANNEXE: Etude du flux de Steger et Warming modifié utilisant le β -schéma

IV.9.1 Introduction

Ce travail a été réalisé suite aux problèmes rencontrés sur les bords sortants pour des écoulements transsoniques bidimensionnels multi-espèces régis par les équations d'Euler. En effet, on constate (voir [13] et les résultats de la section IV.5) qu'en fonction des dimensions du domaine de calcul et du flux numérique de bord utilisé, les solutions obtenues sont assez différentes et non satisfaisantes (chocs bloqués à la frontière entre autres).

Pour les écoulements subsoniques, les problèmes de troncature proche ont souvent été étudiés. Dans ce cas, on essaie d'utiliser des informations sur le comportement asymptotique de la solution. Le problème qui nous intéresse n'entre pas dans ce contexte d'étude. En effet, sur les frontières sortantes que nous considérons l'écoulement peut être supersonique ou subsonique.

Le flux numérique utilisé pour traiter les frontières sortantes est un flux de Steger et Warming modifié. Ce flux est entièrement décentré sur la solution à l'intérieur du domaine et s'écrit: $\Phi = A^+(W_i)W_i + A^-(W_i)W_\infty$ où W_i représente la solution à l'intérieur du domaine et W_∞ la solution connue à l'infini. Ce flux numérique donne un problème stationnaire bien posé, mais n'est pas très précis en frontière proche.

On peut aussi utiliser un flux numérique totalement décentré soit $\Phi = A^+(W_i)W_i$, ce flux est valide en supersonique 1-D et totalement absorbant [44]. Mais alors, le problème stationnaire devient mal posé.

L'idée est de construire un flux numérique de bord entre ces deux options conservant le décentrage sur le champ à l'intérieur du domaine, pour préserver l'éventuel caractère supersonique de la solution et de remplacer le champ infini par une moyenne entre W_i et W_∞ . Il est en effet légitime de penser qu'en écoulement subsonique, la solution exacte en aval de la frontière est comprise entre W_i et W_∞ .

On remplace donc W_∞ par $W = \beta W_i + (1 - \beta)W_\infty$, $\beta \in [0, 1[$.

Le but de ce travail est de voir sur une équation scalaire monodimensionnelle en l'absence de choc d'une part s'il existe un β optimal assurant une solution exacte sur un domaine tronqué et d'autre part de voir l'influence de ce flux sur la stabilité et la consistance du schéma.

IV.9.2 Etude du β -schéma sur l'équation scalaire d'advection

On considère l'équation scalaire d'advection:

$$w_t + cw_x = 0 \quad (103)$$

avec $w(x, t)$ défini sur $\Omega \times [0, +\infty[$, $\Omega \subset \mathbb{R}$; c est une constante négative.

Etude de la troncature du domaine de calcul

On va donc chercher s'il existe une valeur de β telle que la solution obtenue avec le flux de bord précédent soit identique à la solution que l'on obtiendrait sans troncature du domaine de calcul.

Pour résoudre numériquement le problème (103) sur le domaine tronqué en espace, on utilise la même discrétisation spatiale et temporelle que celle mise en place en début de ce chapitre, le pas en espace est supposé variable. On a donc à l'intérieur du domaine:

$$w_i^{n+1} = w_i^n - 2 \frac{\Delta t}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} (\Phi_{i+\frac{1}{2}} - \Phi_{i-\frac{1}{2}}),$$

et sur le bord du domaine tronqué:

$$w_j^{n+1} = w_j^n - 2 \frac{\Delta t}{\Delta x_j} (\Phi_b - \Phi_{j-\frac{1}{2}}),$$

avec:

$$\Phi_b = c(\beta w_j + (1 - \beta)w_\infty) \quad , \quad \Phi_{i+\frac{1}{2}} = cw_{i+1} .$$

W_∞ est la solution supposée connue à l'infini. On va dans un premier temps calculer la solution w_j^{n+1} en supposant d'une part le domaine tronqué, d'autre part le domaine infini.

1. Domaine tronqué en x_i

$$w_i^{n+1} = w_i^n + 2 \frac{\Delta t}{\Delta x_i} c(1 - \beta)(w_i^n - w_\infty)$$

2. Domaine infini

$$w_i^{n+1} = w_i^n + 2 \frac{\Delta t}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} c(w_i^n - w_{i+1}^n)$$

On suppose qu'à l'instant t^n , les deux schémas donnent la même solution w_i^n , et on détermine alors β tel que ces deux solutions restent identiques à l'instant t^{n+1} . Il vient:

$$\beta = 1 - \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \left(\frac{w_i^n - w_{i+1}^n}{w_i^n - w_\infty} \right) .$$

Si la solution w est monotone au voisinage de la frontière où l'on tronque le domaine de calcul, on a $\frac{w_i^n - w_{i+1}^n}{w_i^n - w_\infty} \in [0, 1]$, d'où:

$$\beta \in \left[1, 1 - \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \right)$$

On observe ici que, si le maillage est régulier, on a $\beta \in [0.5, 1]$; on voit également que la valeur "optimale" de β est directement liée au pas du maillage.

IV.9.3 Conclusion

Le cas étudié, bien que simplifié à l'extrême et donc s'éloignant des cas réels d'écoulement, permet cependant de tirer les conclusions suivantes:

Même pour ce cas simple, il n'est pas possible de trouver une valeur de β assurant une solution exacte quelque soit la troncature; en effet il apparaît clairement qu'une telle valeur dépend de plusieurs facteurs liés au problème étudié: le pas du maillage, l'endroit où l'on effectue la troncature, et la solution elle-même. Cependant on a pu mettre en évidence l'intérêt de choisir la valeur de β dans l'intervalle $[0.5, 1]$. Il est clair que l'étude, présentée pour un problème monodimensionnel, s'étend sans difficulté au cas d'un maillage quadrangulaire régulier; mais, sur un maillage triangulaire, même régulier, la complexité est telle qu'on ne peut conclure simplement.

Ce schéma à été appliqué sur différents problèmes tests, il ressort de ces essais numériques (qui ne sont pas tous présentés dans cette thèse), que le β -schéma permet parfois de réduire de manière significative les problèmes sur les bords sortants. En pratique, cette amélioration ne se produit que dans les cas où les problèmes dus au flux numérique de bord sont effectivement localisés au voisinage immédiat du bord du domaine de calcul. Enfin, il ressort des exemples traités qu'il est effectivement préférable, en accord avec l'étude simplifiée précédente, de choisir la valeur de β dans l'intervalle $[0.5,1]$.

Chapitre V

SIMULATION NUMERIQUE DE LA COMBUSTION D'UN MELANGE GAZEUX H₂-O₂ DANS UNE TETE DE CHAMBRE

V.1 INTRODUCTION

L'objet de ce chapitre est l'étude numérique bidimensionnelle du processus de combustion dans une tête de chambre de moteur de fusée. De part le processus d'allumage adopté, que nous détaillerons par la suite, les flammes que l'on étudie sont dans un premier temps des flammes prémélangées qui se transforment à convergence en flammes de diffusion.

La géométrie que l'on considère comporte deux injecteurs coaxiaux (introduction de l'oxygène au centre et de l'hydrogène sur la partie extérieure), puis une partie cylindrique suivie d'un convergent-divergent (voir figure V.1).

Les différents calculs ont été réalisés sur deux maillages. Le premier, grossier, comporte 836 points (voir figure V.1) tandis que le deuxième relativement fin comporte 5281 points (voir figure V.2). L'intérêt d'effectuer les calculs sur deux maillages (un fin et un grossier) est lié à deux stratégies.

La première a pour but de réduire les temps de calculs. En effet l'expérience montre que les calculs sur maillages fins posent en général de gros problèmes de convergence (surtout pour les écoulements fortement subsoniques), d'où l'idée d'effectuer un premier calcul sur maillage grossier puis de se servir de la solution ainsi obtenue comme solution initiale pour le maillage fin obtenu par raffinement statique du maillage grossier (un peu dans l'idée des méthodes multigrilles). On peut ainsi obtenir une solution stationnaire à moindre coût.

La deuxième stratégie, plus proche du travail présenté dans ce chapitre porte sur une analyse qualitative et quantitative des résultats numériques. Le but final étant la simulation

numérique tridimensionnelle, un calcul simple permet (à taille de mailles équivalentes) de relier le nombre de points d'un maillage 2-D au nombre de points d'un maillage 3-D:

$$N_{3d} = N_{2d}^{3/2}.$$

Pour $N_{2d} = 5280$, on a $N_{3d} = 384000$ alors que pour $N_{2d} = 836$, on obtient $N_{3d} = 24000$. Il apparaît clairement que le premier cas semble non raisonnable voire impossible aussi bien en taille mémoire qu'en temps de calcul. Par conséquent, l'analyse des résultats bidimensionnels permet d'avoir une estimation de l'erreur commise lors d'un calcul tridimensionnel sur maillage grossier.

Les conditions d'injections sont subsoniques et on impose le débit des différentes espèces. Ce processus, bien que physiquement acceptable, présente l'inconvénient de ralentir la convergence vers la solution stationnaire. Ceci est d'autant plus vrai que l'écoulement dans la chambre est fortement subsonique (nombre de Mach voisin de 0.1).

Le modèle physique utilisé pour résoudre ce problème est un modèle laminaire non visqueux à trois espèces (une pour l'hydrogène, une pour l'oxygène et une pour les produits de réaction). Le modèle de combustion utilisé est de type E.B.U (Eddy Break Up). L'écoulement réel étant principalement turbulent, on augmente artificiellement les coefficients de diffusion thermique et moléculaire afin d'obtenir une largeur de flamme proche de la réalité.

Le schéma numérique utilisé est présenté au chapitre précédent; il est entièrement explicite. La discrétisation spatiale est réalisée de façon mixte par volumes finis pour les termes convectifs (utilisation d'un solveur de Riemann approché multi-espèces) et par éléments finis P1-Galerkin pour les termes diffusifs. Pour atteindre l'ordre deux, nous combinons la méthode des volumes finis avec une approche M.U.S.C.L (Monotonic Upstream Schemes for Conservation Laws).

Pour accélérer la convergence vers l'état stationnaire on peut, comme cela a déjà été réalisé dans de précédents calculs, utiliser une procédure de pas de temps local. Ce procédé, bien que donnant une solution instationnaire non physique, permet de réduire les temps de calcul à convergence. Malheureusement, il n'a pas été possible d'atteindre numériquement une solution stationnaire et la procédure de pas de temps local génère des solutions fortement instationnaires et non physiques. Dans un calcul en pas de temps global, ces instationnarités sont considérablement atténuées sans toute fois disparaître; on obtient alors une solution quasi-stationnaire. Différents tests montrent que ces instationnarités sont dues au traitement des conditions limites entrantes, du moins pour les écoulements Euler (c'est à dire sans diffusion et sans terme source). En fait, tout laisse penser que l'instationnarité qui apparaît est une instabilité physique dont le processus excitateur provient des conditions entrantes (fluctuation et non uniformité du champ de pression au niveau des injecteurs). En effet, partant d'une solution quasi-stationnaire pour l'écoulement Euler avec termes diffusifs, une onde de pression (onde générée par l'initiation de la combustion) remontant sur les jets suffit à déclencher une forte instabilité. On apportera aussi une justification permettant d'expliquer

le mauvais comportement de la procédure de pas de temps local qui semble propre aux écoulements "internes".

En fait, pour accélérer la convergence vers l'état quasi-stationnaire, la meilleure solution (tout en conservant un schéma explicite) est de combiner les deux types de calcul, une première phase en pas de temps local permet d'uniformiser les ondes de pression, puis une seconde phase en pas de temps global permet d'obtenir la solution quasi-stationnaire. Quoiqu'il en soit, pour le cas test étudié, la non possibilité d'utilisation de la procédure de pas de temps local conduit à des temps de calcul prohibitifs.

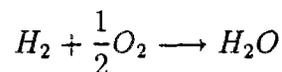
Partant du principe que l'instabilité provient entre autres de la non uniformité des pressions, on a construit de nouvelles conditions aux limites entrantes qui imposent toujours le débit mais qui suppriment le problème de la non uniformité du champ de pression. Ces nouvelles conditions aux limites ont permis sur le maillage grossier l'obtention de solutions convergées en pas de temps local tout à fait comparables à celles obtenues par une procédure de pas de temps global pour un coût 20 fois moindre. Malheureusement, sur le maillage fin, la faible diffusion numérique ne permet pas, même avec ce type de conditions aux limites, d'obtenir une solution convergée. Dans ce cas, la seule manière d'obtenir sur ce maillage une solution physique stationnaire consiste à forcer les entrées par l'état issu du calcul sur le maillage grossier (ce qui est très peu coûteux puisque l'obtention d'une solution Euler convergée à 10^{-4} sur le maillage grossier nécessite moins de $3mn$ CRAY-2). On retrouve dans ce procédé un intérêt supplémentaire à effectuer un calcul sur maillage grossier.

V.2 EQUATIONS

V.2.1 Modèle

Le modèle physique utilisé ici étant légèrement différent de celui étudié au chapitre précédent, nous le décrivons en détail ci-dessous.

On considère un écoulement bidimensionnel réactif non visqueux comportant 3 espèces en phase gazeuse H_2, O_2, H_2O avec la réaction chimique simple irréversible:



On note:

Y_1 : fraction massique de H_2 (Hydrogène).

Y_2 : fraction massique de O_2 (Oxygène).

Y_3 : fraction massique de H_2O (Eau).

avec: $Y_1 + Y_2 + Y_3 = 1$.

Compte tenu de cette dernière relation, on choisit de ne pas écrire d'équation de conservation pour l'espèce 3.

Les équations s'écrivent alors:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y = 0 \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y = 0 \\ e_t + [u(e + p)]_x + [v(e + p)]_y = \nabla \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) + Q\omega + \sum_{k=1}^{k=3} \nabla \cdot (\rho D C_p^k T \vec{\nabla} Y_k) \\ (\rho Y_1)_t + (\rho Y_1 u)_x + (\rho Y_1 v)_y = \nabla \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_1) - \frac{m_1}{m_3} \omega \\ (\rho Y_2)_t + (\rho Y_2 u)_x + (\rho Y_2 v)_y = \nabla \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_2) - \frac{m_2}{2m_3} \omega \end{array} \right. \quad (104)$$

Où l'on a utilisé les notations classiques suivantes:

e et ρ est la masse volumique, u et v les composantes de la vitesse \vec{v} , p la pression du fluide et T est la température. e représente l'énergie totale par unité de volume diminuée de l'énergie de formation des espèces.

λ et D représentent respectivement les coefficients de diffusion thermique et moléculaire, λ ainsi que le produit ρD sont supposés constants. Q est la quantité de chaleur dégagée par la réaction chimique à la température de référence (Q est exprimée en J/Kg). Enfin, on a noté ω le taux de formation des produits de réaction (en $kg/m^3/s$).

Remarque:

On retrouve dans les équations de conservation des espèces 1 et 2 un rapport de masse molaire devant le terme source. Cette écriture provient d'une part de la définition même du terme source ω (voir ci-dessous) et d'autre part de la loi de conservation de la masse.

Notons $R = 8.314 J/^\circ K/mole$ la constante des gaz parfaits.

On définit alors les caractéristiques physiques du mélange de gaz parfaits:

$$C_v = \sum_{k=1}^{k=3} Y_k C_v^k \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{\sum_{k=1}^{k=3} \gamma_k Y_k C_v^k}{\sum_{k=1}^{k=3} Y_k C_v^k}$$

p_k la pression partielle s'exprime en fonction de γ_k et de C_v^k .

$$p_k = Y_k (\gamma_k - 1) C_v^k \rho T = \frac{\rho Y_k R T}{m_k}, \quad C_v^k = \frac{R}{m_k (\gamma_k - 1)}$$

p la pression du fluide vérifie alors la loi de Dalton:

$$p = \sum_k p_k$$

Avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} p = \frac{(\gamma - 1)\rho C_v T}{Ma^2(\gamma_2 - 1)\gamma_2 C_{v2}} \\ e = \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) + \frac{p}{\gamma - 1} \\ \Omega = \epsilon A \rho \text{Min}(Y_1, \frac{Y_2}{8}) \end{array} \right.$$

γ et C_v sont les mêmes que ceux définis précédemment.

Les paramètres adimensionnés sont les suivants:

$\tilde{Le}_i = \frac{\lambda}{\rho D C_{pi}}$: nombre de Lewis, rapport du coefficient de diffusion thermique sur le coefficient de diffusion moléculaire.

$\tilde{Pr}_i = \frac{l_0 u_0 \rho_0 C_{pi}}{\lambda}$: pour un fluide visqueux, \tilde{Pr} serait le produit du nombre de Prandtl

$Pr = \frac{C_{pi} \mu}{\lambda}$ par le nombre de Reynolds $Re = \frac{l_0 u_0 \rho_0}{\mu}$.

$Ma = \frac{u_0}{[(\gamma_2 - 1)C_{p2}T_0]^{\frac{1}{2}}}$: nombre de Mach.

$\mathcal{Q} = \frac{QY_0}{u_0^2}$: facteur d'augmentation de chaleur.

$A = C \frac{t_0}{\tau}$ préfacteur adimensionné du terme source.

On a choisi de façon arbitraire d'effectuer l'adimensionnement par rapport à l'espèce 2 (Oxygène). On a donc réalisé l'adimensionnement en utilisant les caractéristiques physiques de cette espèce: $m_2, C_{p2}, \gamma_2 \dots$

Remarques:

Le modèle physique que l'on utilise suppose des coefficients de diffusion (thermique et moléculaire) identiques pour toutes les espèces. A la température standard, le produit ρD peut effectivement être supposé constant, par contre pour l'hydrogène et l'oxygène, à cette même température, le rapport des coefficients de diffusion thermique est voisin de 10. La solution consiste alors à définir un λ équivalent calculé à partir des fractions molaires (voir Williams [72]). Les modifications qui en résultent d'un point de vue numérique restent assez faibles du moins pour un schéma explicite.

Le terme source que l'on utilise dans ce modèle est linéaire, aussi dans le cadre d'une discrétisation par pas fractionnaires, on pourrait envisager une résolution exacte pour les termes sources.

V.2.3 Caractéristiques des jets et constantes physiques

Caractéristiques des jets

On suppose par la suite que les trois espèces considérées ont le même rapport de chaleurs spécifiques γ . Pour chacun des jets, les données sont les suivantes:

Grandeurs physiques	JET OXYGENE	JET HYDROGENE
Pression (Pa)	$9.74 \cdot 10^5$	$9.74 \cdot 10^5$
Température ($^{\circ}K$)	300	300
Masse volumique (Kg/m^3)	12.5	0.78
Débit massique ($Kg/m^2/s$)	250	156
Vitesse (m/s)	20	200
Nombre de Mach	0.06	0.15
Masse molaire (Kg/Mole)	$32 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$
Gamma	1.4	1.4

On suppose la chambre initialement remplie d'eau en phase gazeuse au repos à la pression $p = 1.0 \cdot 10^5 Pa$ et à la température $T = 300 \text{ }^{\circ}K$.

Aux frontières aval, on a utilisé pour les conditions aux limites un état "à l'infini" (composé d'eau) donné par:

$$u_{\infty} = v_{\infty} = 0, p_{\infty} = 1. \cdot 10^3 Pa \text{ et } T_{\infty} = 100 \text{ }^{\circ}K.$$

On choisit comme grandeur de référence:

$$Y_0 = 1, l_0 = 0.001, u_0 = 10, \rho_0 = 1, T_0 = 10.$$

(Toutes ces grandeurs sont données en unité S.I)

On obtient alors pour les quantités hydrodynamiques adimensionnées:

Grandeurs physiques	JET OXYGENE	JET HYDROGENE
Pression	9740	9740
Température	30	30
Vitesse	2	20
Masse volumique	12.5	0.78

Paramètres physiques de la flamme

Pour l'étude de l'écoulement non réactif, les quantités définies précédemment suffisent. Maintenant, il reste à choisir les quantités relatives à la combustion, c'est à dire les coefficients de diffusion thermique et moléculaire ainsi que les constantes apparaissant dans le terme source.

- Coefficient de transport

On prend le nombre de Lewis $\tilde{L}e_2 = 1$.

Le coefficient de diffusion thermique est le même pour toutes les espèces et vaut: $\lambda = 1.2 \text{ J/m/s/K}$.

Le produit du coefficient de diffusion moléculaire par la masse volumique est lui aussi supposé identique pour toutes les espèces, on prend: $(\rho D) = 1.3 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$.

- Chaleur de réaction

A la température de référence $T_0 = 293 \text{ }^\circ\text{K}$, l'enthalpie de formation de l'oxygène et de l'hydrogène est nulle et celle de l'eau est de $h_0 = 250 \text{ kJ/mole}$. Si on néglige les termes en $C_p^k T_0$, la chaleur Q dégagée par la réaction chimique est $Q = 13.89 \cdot 10^3 \text{ kJ/kg}$.

- Taux de réaction

On choisit pour le préfacteur du terme source $C =$ et comme température de seuil $T_s = 900 \text{ }^\circ\text{K}$.

Pour la chimie considérée, le temps de réaction est de $\tau = 1.5 \cdot 10^{-5} \text{ s}$. Cependant le choix de cette valeur associé d'une part au caractère subsonique de la solution (du moins pour la phase d'initiation du processus de combustion) et d'autre part aux coefficients de diffusion choisis, conduit à des temps de calcul importants. Pour illustrer ceci, on effectue une évaluation des différents temps caractéristiques. Notons τ_E le temps caractéristique Euler, τ_D le temps caractéristique diffusif et enfin τ_C le temps caractéristique chimique $\tau_c = \frac{\tau}{C}$.

$$\tau_E = \frac{\Delta x}{U + c} \sim \frac{\Delta x}{\sqrt{p/\rho}} \sim \frac{10^{-4}}{\sqrt{10^6/10^{-2}}} = 10^{-8},$$

où Δx est une mesure du maillage, U la vitesse du fluide et c la vitesse du son. De même, une analyse pour les termes diffusifs conduit à:

$$\tau_D = \frac{\Delta x^2 \rho C_p}{2\lambda} \sim \frac{10^{-8} \cdot 10^{-2} \cdot 10^3}{2} = 0.5 \cdot 10^{-7}.$$

On obtient alors pour les rapports des temps caractéristiques:

$$\frac{\tau_C}{\tau_E} \sim 1000,$$

$$\frac{\tau_C}{\tau_D} \sim 200.$$

Compte tenu du fait que nous utilisons un schéma explicite en temps, ces rapports sont difficilement praticables. La solution pour s'affranchir de cette difficulté est de réduire le temps de réaction; mais alors, on crée un problème supplémentaire car le rapport $\frac{\tau_D}{\tau_C}$ n'est plus respecté, ce qui peut être assez gênant puisque les caractéristiques de la flamme dépendent de ce rapport. Malgré ceci, nous choisissons de prendre $\tau = 1.5 \cdot 10^{-6} \text{ s}$, on obtient comme rapport des temps caractéristiques:

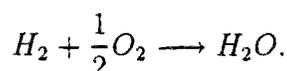
$$\frac{\tau_C}{\tau_E} \sim 100,$$

$$\frac{\tau_C}{\tau_D} \sim 20.$$

On souhaite maintenant déterminer la largeur et la vitesse de flamme liée au nouveau temps de réaction. Un calcul simple montre que la largeur de flamme, pour une viscosité constante, est proportionnelle à la racine carré de τ_C et que le produit de la vitesse de flamme par la largeur de flamme est constant. On obtient alors comme nouvelle largeur de flamme $L_f = \sqrt{0.1} \cdot 3 \cdot 10^{-3} = 9.4 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ soit $L_f \sim 1 \text{ mm}$ et pour la vitesse de flamme $V_f = \sqrt{10} \cdot 200 = 632.4 \text{ m/s}$. Le maillage que l'on utilise (figure V.2) permet de capter correctement cette flamme du moins dans les zones proches des entrées.

Température adiabatique de flamme

On souhaite dans ce paragraphe déterminer la température de la flamme pour la réaction qui nous intéresse, à savoir:



On applique pour cela le premier principe de la thermodynamique à un système clos composé initialement d'un mélange gazeux hydrogène-oxygène-eau à la température T_u (voir [54]). Le premier principe nous permet d'écrire:

$$dq + dw = dh - vdp, \quad (106)$$

où dq représente la quantité de chaleur échangée avec le milieu extérieur, dw le travail d'origine mécanique, électrique ou thermique fournit au système, vdp le travail des forces de pression et enfin dh la variation d'enthalpie massique du système isolé.

On suppose que la réaction chimique qui a lieu se fait à pression constante et sans échange de chaleur et de travail avec le milieu extérieur. Compte tenu des différentes hypothèses retenues, (106) s'écrit:

$$dh = 0,$$

qui traduit simplement que l'enthalpie du mélange gazeux est conservé durant la réaction chimique. Notons par l'indice $_u$ les gaz frais, par l'indice $_b$ les gaz brûlés et par l'indice $_i$ l'espèce chimique considérée, $i = 1, 2, 3$ ($Y_1 = Y_{H_2}$, $Y_2 = Y_{O_2}$, $Y_3 = Y_{H_2O}$). Alors:

$$\left(\sum_{i=1}^{i=3} Y_i h_i \right)_u = \left(\sum_{i=1}^{i=3} Y_i h_i \right)_b.$$

Compte tenu de la définition même de $h_i = h_{i,ref} + \int_{T_{ref}}^T C_p^i dT$, il vient:

$$(Y_{3,b} - Y_{3,u})Q = \int_{T_{ref}}^{T_b} C_{p,b} dT - \int_{T_{ref}}^{T_u} C_{p,u} dT,$$

car $h_{1,ref} = h_{2,ref} = 0$ et $Q = -h_{3,ref}$ avec Q la quantité de chaleur (J/kg) dégagée par la réaction chimique à la température de référence T_{ref} . Dans cette dernière relation on a posé

$$C_{p,u} = \sum_{i=1}^{i=3} C_p^i Y_{i,u} \text{ et } C_{p,b} = \sum_{i=1}^{i=3} C_p^i Y_{i,b}.$$

Pour terminer, il ne reste plus qu'à utiliser les lois de conservation de la réaction chimique. Ces dernières s'écrivent:

$$\begin{aligned} Y_{3,u} - Y_{3,b} &= (Y_{1,b} - Y_{1,u}) \frac{m_3}{m_1}, \\ Y_{3,b} - Y_{3,u} &= (Y_{2,b} - Y_{2,u}) \frac{2m_3}{m_2}. \end{aligned}$$

On introduit Z la fraction du mélange avant combustion: $Z = \frac{n_1 m_1}{n_1 m_1 + n_2 m_2}$ où n_i représente le nombre de mole de l'espèce chimique i et m_i sa masse molaire. Pour notre réaction, si on suppose qu'initialement le mélange gazeux n'est composé que d'oxygène et d'hydrogène, la fraction de mélange stoechiométrique est $Z_{st} = \frac{1}{9}$. Pour $Z < Z_{st}$ le mélange est pauvre (c'est à dire que l'oxygène est en excès) tandis que pour $Z > Z_{st}$ le mélange est riche (excès d'hydrogène). Pour notre problème où les injecteurs introduisent de l'hydrogène et de l'oxygène purs, on a simplement $Y_{1,u} = Z$, $Y_{2,u} = 1 - Z$ et $Y_{3,u} = 0$ (ce qui n'est pas le cas par exemple lorsque l'on considère la combustion de l'hydrogène dans de l'air). L'obtention de la température de flamme adiabatique est alors immédiate (on suppose que les C_p^i ne dépendent pas de la température):

-Pour un mélange pauvre $Z < Z_{st}$

$$QZ \frac{m_3}{m_1} = C_{p,b}(T_b - T_{ref}) - C_{p,u}(T_u - T_{ref}).$$

-Pour un mélange riche $Z > Z_{st}$

$$Q(1 - Z) \frac{2m_3}{m_2} = C_{p,b}(T_b - T_{ref}) - C_{p,u}(T_u - T_{ref}).$$

La température maximum sera atteinte pour $Z = Z_{st} = \frac{1}{9}$, alors $C_{p,b} = C_p^3$ et $C_{p,u} = \frac{1}{9}C_p^1 + \frac{8}{9}C_p^2$, $T_{ref} = 298 \text{ } ^\circ K$ et $T_u = T_{ref}$. On obtient pour T_b , la température des gaz brûlés: $T_b = 8931 \text{ } ^\circ K$.

Cette température anormalement élevée mérite d'être discutée. En effet, le modèle physique utilisé pour déterminer cette température suppose que les capacités calorifiques à pression constante (les C_p^i) ne dépendent pas de la température. Cette hypothèse peut à la limite être considérée comme raisonnable pour des fluides dont la température n'excède pas $2000 \text{ } ^\circ K$, on imagine aisément que pour une température de flamme proche de $10000 \text{ } ^\circ K$ cette hypothèse des C_p^i constantes n'est absolument pas valide. Pour confirmer ceci et avoir une meilleure approximation de la température réelle de la flamme, on a réalisé le calcul précédent en se donnant une loi $C_p^i(T)$ et pour simplifier le calcul on suppose $T_u = T_{ref}$. La température T_b est alors donnée par l'équation suivante:

$$\int_{T_{ref}}^{T_b} C_p^3 dT = Q.$$

Pour l'eau en phase gazeuse et pour des températures comprises entre $1000 \text{ } ^\circ K$ et $5000 \text{ } ^\circ K$, on a pour C_p^3 la loi suivante ([36]):

$$C_p^3 = \frac{\mathcal{R}}{m_3} (a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4),$$

avec:

$a_1 = 2.7167$, $a_2 = 0.2945 \cdot 10^{-2}$, $a_3 = -0.8022 \cdot 10^{-6}$, $a_4 = 0.1022 \cdot 10^{-9}$ et enfin $a_5 = -0.4847 \cdot 10^{-14}$. Par intégration et résolution numérique de l'équation en température de degré 5, on obtient: $T_b = 5150 \text{ } ^\circ K$. Le même calcul avec C_p^3 constant donne: $T_b = 8931 \text{ } ^\circ K$ soit une température supérieure de 73%. Cette température voisine de $5000 \text{ } ^\circ K$ est encore très importante et assez éloignée des températures observées expérimentalement (autour de $3000 \text{ } ^\circ K$), la raison provient du modèle de décomposition utilisé. A de telles températures, l'eau en phase gazeuse se décompose en différents radicaux (O, OH, \dots) suivant des réactions principalement endothermiques (réaction qui consomment de l'énergie). Ceci a pour conséquence évidente une baisse de la température des gaz brûlés.

On peut d'ores et déjà s'attendre pour les résultats numériques à venir à une température de flamme très élevée puisque le code numérique utilise d'une part une réaction chimique simple et d'autre part des $C_p^i = Cste$.

Une solution pour éviter ceci et tout en conservant un modèle physique simplifié, consiste à réduire la quantité de chaleur Q dégagée par la réaction. La nouvelle valeur de Q peut être déterminée simplement de façon à conserver par exemple une température de flamme adiabatique de $3000 \text{ } ^\circ K$.

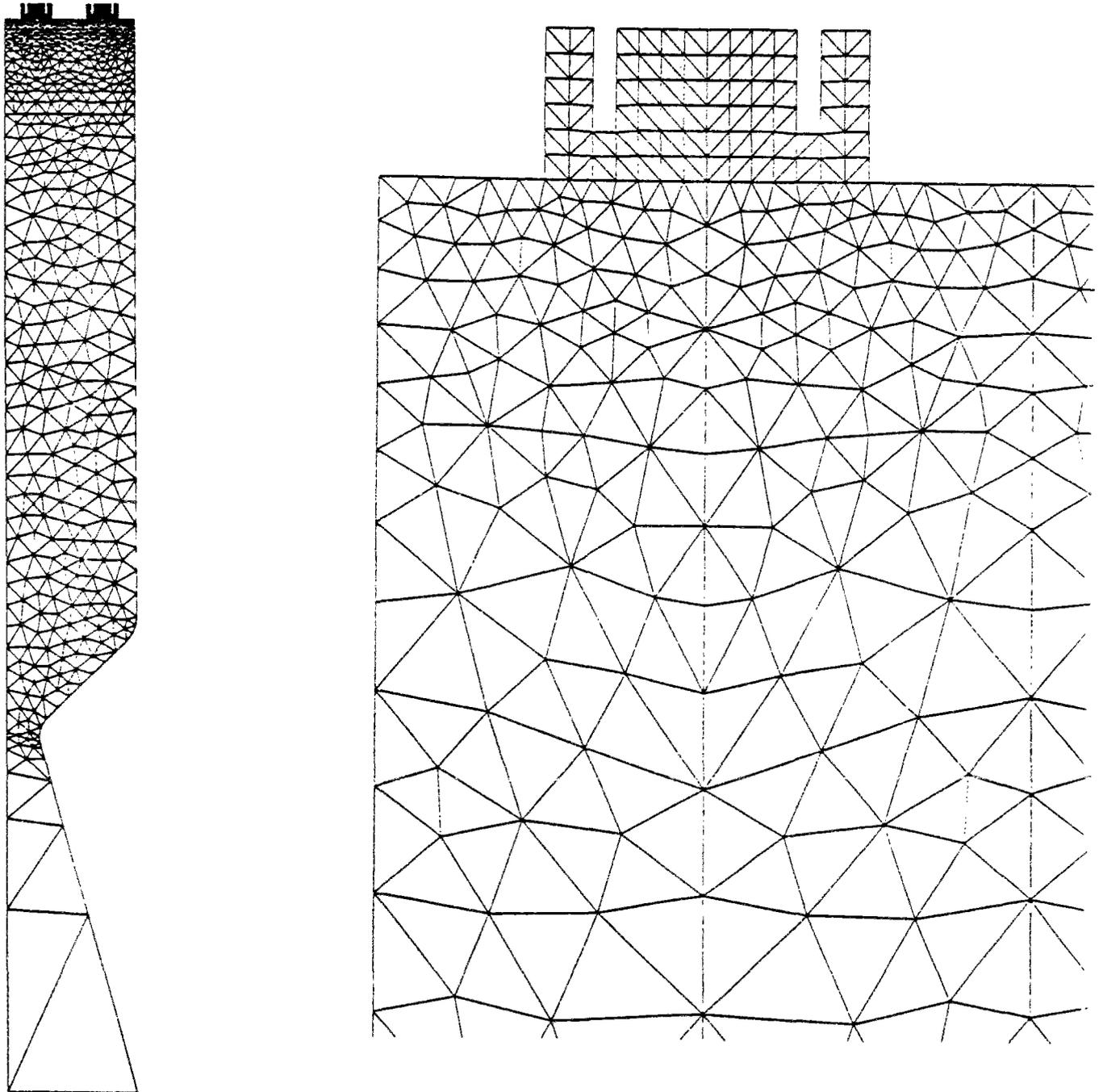


Figure V.1 : Chambre à combustion - Maillage grossier (836 points)

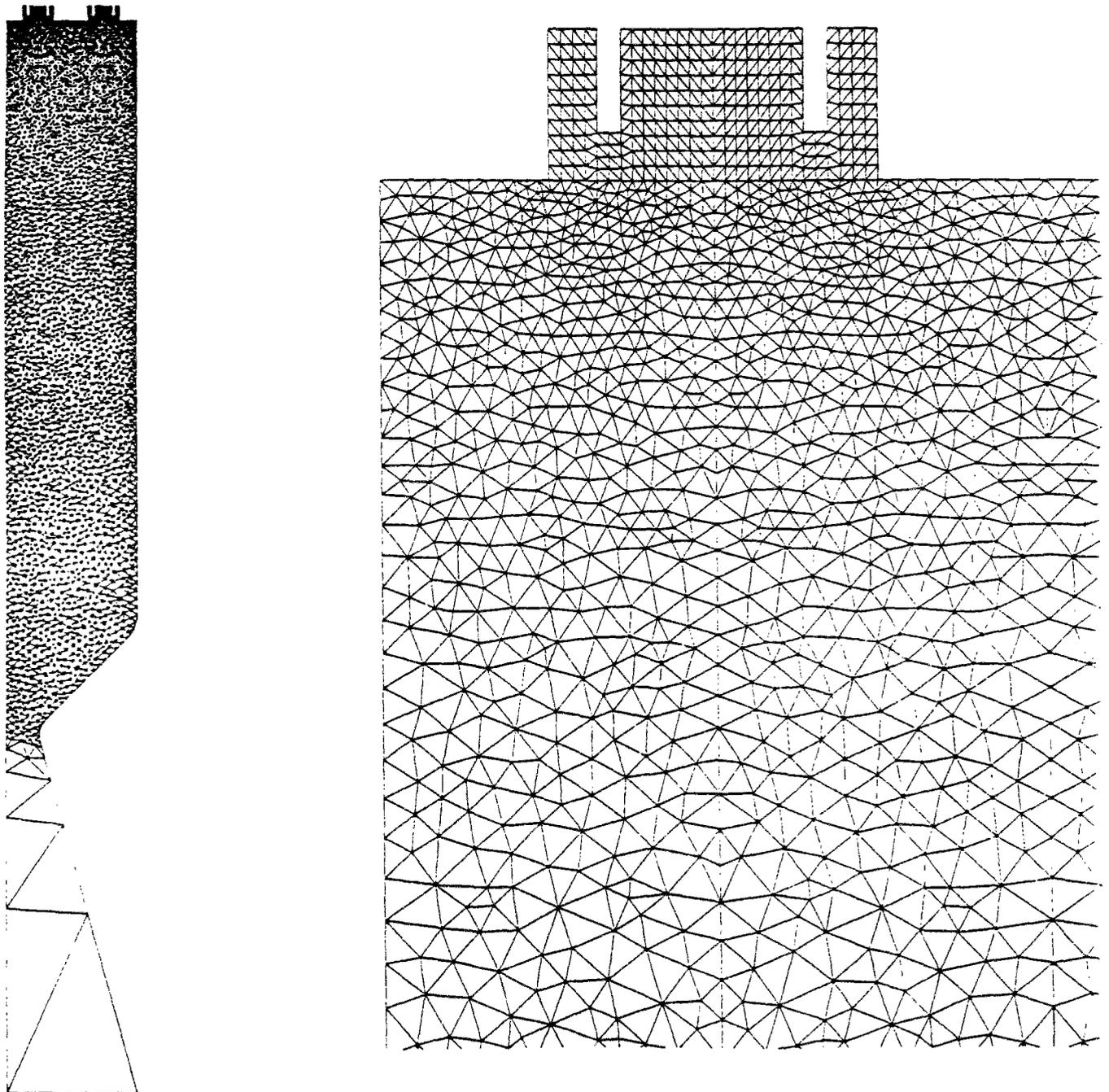


Figure V.2 : Chambre à combustion - Maillage fin (5281 points)

V.3 CONDITIONS AUX LIMITES ENTRANTES

Dans les calculs présentés au chapitre précédent, le traitement des conditions aux limites entrantes ne posait pas de problèmes puisque les entrées étaient supersoniques. On présente dans cette section deux calculs de flux qui d'une part imposent le débit et qui d'autre part prennent en compte le caractère subsonique des fluides injectés. Le premier flux à pression libre (flux $N^0 1$), physiquement satisfaisant, s'est avéré inefficace par utilisation d'une procédure de pas de temps local: forte instabilité qui se traduit entre autre par un important gradient de pression dans les sections d'entrée. Or l'analyse des solutions quasi-stationnaires obtenues en pas de temps global et avec ce flux montre en fait que le champ de pression est pratiquement uniforme pour chacune des entrées (i.e. hydrogène et oxygène). D'où l'idée d'effectuer le calcul avec le même flux mais en prenant le même état (pris au centre de l'injecteur) pour tous les points d'une entrée. Cette façon de procéder revient à supprimer le gradient de pression. On parle alors de conditions limites à pression uniforme (flux $N^0 2$).

Pour simplifier les différentes écritures à venir des flux numériques de bord, on se place dans un cadre monodimensionnel.

V.3.1 Conditions aux limites à pression libre: Flux $N^0 1$

Notons par W_∞ l'état du fluide en amont de l'injecteur (hydrogène ou oxygène), par W_i l'état au noeud i sur l'entrée de l'injecteur et par $\Phi_b(W_i, W_\infty)$ le flux numérique de bord au noeud i . W est défini de la façon suivante:

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \\ \rho Y_1 \\ \rho Y_2 \end{pmatrix},$$

avec: $e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho u^2$. On impose naturellement le débit en calculant un flux numérique de bord construit ainsi:

$$\Phi_b(W_i, W_\infty) = F(\bar{W}),$$

avec:

$$\bar{W} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} = \rho_\infty \\ \bar{\rho} u = \rho_\infty u_\infty \\ \bar{e} = \frac{p_i}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho_\infty u_\infty^2 \\ \bar{\rho} Y_1 = \rho_\infty Y_{1,\infty} \\ \bar{\rho} Y_2 = \rho_\infty Y_{2,\infty} \end{pmatrix}. \quad (107)$$

V.3.2 Conditions aux limites à pression uniforme: Flux $N^0 2$

Ce traitement des conditions aux limites, moins naturel que le précédent, permet de supprimer une cause importante d'instationnarité par utilisation du pas de temps local. Ce flux s'est avéré comme nous le verrons par la suite très performant pour les calculs sur le maillage grossier puisqu'alors, la diffusion numérique aidant, on a pu obtenir des solutions stationnaires. En ce qui concerne les calculs sur maillage fin, cette procédure améliore les résultats mais la non possibilité de convergence ne permet pas l'obtention de solutions physiques. On proposera dans la section suivante une démarche permettant l'obtention de solutions convergées à moindre coût sur ce maillage.

La détermination de ce flux se fait simplement en appliquant la même formule que précédemment:

$$\Phi_b(W_i, W_\infty) = F(\tilde{W}),$$

mais on impose en plus à \tilde{W} , construit de façon analogue à (107), d'être le même pour chacune des entrées (hydrogène et oxygène).

Nous analyserons plus en détail dans la section suivante le comportement de ces deux flux numériques.

V.4 RESULTATS NUMERIQUES

V.4.1 Introduction

On se propose dans cette partie de présenter les différents calculs relatifs au problème physique évoqué précédemment. Dans un premier temps, on s'est plus particulièrement intéressé à l'obtention d'une solution stationnaire en écoulement Euler pur (c'est à dire à l'écoulement sans termes diffusifs et sans terme source). Cette première étude a permis de montrer d'une part les limites d'une discrétisation en temps explicite pour la résolution des problèmes fortement subsoniques, et d'autre part la non possibilité d'obtention d'une solution stationnaire par utilisation de la procédure de pas de temps local pour le flux numérique de bord à pression libre.

Pour le maillage grossier, le flux numérique de bord à pression constante permet l'obtention d'une solution convergée. Le gain en temps de calcul est alors considérable (supérieur à 20).

Dans la dernière partie de cette section, on présente sur le maillage fin deux évolutions instationnaires de combustion pour deux temps de réaction. Le premier temps correspond au temps initialement prévu $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-5}$ s. On confirme d'une part, ce que l'analyse des temps caractéristiques avaient mis en évidence à savoir des temps de calculs très long et d'autre part, on montre que le processus d'initiation de la combustion adopté (allumage par dépôt d'énergie sur la paroi près du col) ne permet pas un allumage durable du moins sur le maillage fin. La flamme est évacuée par le col.

Le deuxième calcul avec $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6}$ s permet d'obtenir une solution stationnaire, la flamme de prémélange issue de l'allumage se transforme à convergence et après explosion en flamme de diffusion. Nous présentons à ce sujet le 'film' de l'évolution.

Puis sur le maillage grossier, pour le même temps caractéristique nous présentons la solution stationnaire de combustion (la procédure instationnaire présente peu d'intérêt puisque non physique car obtenue par une procédure de pas de temps local).

Les différents calculs que nous présentons par la suite ont été obtenus sur deux machines différentes. Les calculs sur le maillage grossier ont été réalisés sur CONVEX-C2 tandis que les calculs sur le maillage fin nécessitant des temps de calculs parfois très long ont été faits sur le CRAY-2. Pour établir une correspondance entre ces différents calculs, nos estimations (pour le code utilisé) donnent un rapport en temps de calcul de 10 entre ces deux machines.

V.4.2 Solution Euler

Toutes les solutions présentées sont, sauf mentions particulières, précises au second ordre en espace et en temps, le nombre de CFL (Courant, Friedrichs, Lewy) est pris égal à 0.6. De plus, seul le flux de bord N^0 1 a été utilisé avec la procédure de pas de temps global.

Sur maillage grossier

On a tout d'abord réalisé les calculs sur le maillage grossier. Un premier calcul en pas de temps constant (i.e global) montre clairement (voir la courbe de convergence figure V.3) que la solution ne converge pas. On est en présence d'une instationnarité qui persiste même si on poursuit le calcul. Par contre, l'examen de la solution obtenue (figure V.4) ne permet pas de mettre en évidence cette instationnarité. En fait une analyse détaillée, non présentée ici, montre une légère fluctuation des variables physiques au niveau des injecteurs. Ceci explique l'allure de la courbe de convergence. L'obtention de la solution quasi-stationnaire (100000 itérations) est très coûteuse puisqu'elle a nécessité sur le CONVEX-C2 un temps CPU de 330mn (33mn sur CRAY-2). Ces temps de calculs sont excessifs et on peut déjà prévoir pour le calcul sur maillage fin des temps très importants. Le nombre de Mach dans la chambre est voisin de 0.15 et peut à lui seul expliquer la convergence lente que l'on obtient.

Pour réduire ces temps de calcul, tout en conservant un schéma numérique explicite en temps, on peut avoir recours à une procédure d'avancement en temps par maille (i.e pas de temps local). Dans certains cas, cette procédure permet d'avoir des gains en temps CPU très importants. Bien évidemment la solution instationnaire est non physique et cette procédure ne présente un intérêt que si l'on obtient une solution stationnaire.

Un premier calcul a été effectué par utilisation du flux de bord N^0 1, la courbe de convergence figure V.5 (haut) met clairement en évidence la présence d'une forte instationnarité qui est confirmée par la solution obtenue figure V.6. En comparant cette solution avec la solution physique (figures V.3 et V.4), on constate que les conditions en entrée sont très mal traitées.

D'où l'idée du flux de bord $N^0 2$. Le calcul ainsi réalisé est présenté figures V.5(bas) et V.6. On obtient alors une solution parfaitement convergée pour un temps de calcul 20 fois moindre. De plus, les résultats sont tout à fait comparables (mis à part la légère instationnarité) à ceux obtenus par la procédure de pas de temps constant.

La pression dans la chambre est quasi uniforme et vaut $1.2 \cdot 10^5 Pa$. La température maximum est voisine de $46.4 \text{ } ^\circ K$, le nombre de Mach dans la chambre est 0.15 (le col est sonique). La vitesse d'éjection des gaz est de $442 m/s$. La forte diffusion numérique due aux grandes mailles dans la chambre uniformise de façon exagérée la solution (la solution sur le maillage fin est donnée par la suite).

Sur maillage fin

Le calcul sur maillage fin a directement été fait en pas de temps local et ce pour les deux types de flux numériques de bord. Le calcul avec le flux $N^0 1$ donne pour le résidu un comportement identique à celui sur maillage grossier. On a représenté figure V.7 (gauche) la solution à 20000 itérations. En fait, cette instationnarité se développe à partir de l'itération 4000, c'est à dire lorsque la pression dans la chambre devient presque uniforme mais avec une valeur bien supérieure à la normale. Ensuite, l'instationnarité se développe très rapidement (voir [17] pour plus de détail concernant le développement de cette instationnarité). Ce type de comportement est spécifique aux écoulements internes. En effet contrairement aux écoulements externes où les ondes de pression sont évacuées sur les frontières du domaine de calcul (avec des conditions non réflexives), les ondes de pression s'accumulent pour donner finalement une solution fortement perturbée.

Le calcul avec le flux $N^0 2$ (figure V.7 droite) ne permet pas contrairement au calcul sur le maillage grossier d'obtenir une solution convergée, la solution semble plus "physique" que précédemment avec une structure de jets qui ondule. L'analyse de la solution sur les sections d'entrée montre un champ de pression uniforme mais dont la valeur oscille en fonction des itérations. Pour le calcul sur maillage grossier, la forte diffusion numérique supprime cette oscillation des pressions et permet l'obtention d'une solution stationnaire.

Les deux études précédentes nous obligent à utiliser une procédure de pas de temps global pour l'obtention sur le maillage fin d'une solution physique et convergée. Pour rendre le calcul moins coûteux en temps CPU, on effectue un premier calcul à l'ordre 1 suivi d'un calcul à l'ordre 2 en partant de la solution obtenue par pas de temps local. Le premier calcul à l'ordre 1 fait entièrement disparaître l'instationnarité qui réapparaît à "convergence" à l'ordre 2. Les remarques que l'on peut faire ici sont les mêmes que celles énoncées sur le calcul avec le maillage grossier. L'obtention de la solution quasi-stationnaire figures V.8 et V.9 à nécessité 15 heures de calcul sur CRAY-2, temps bien évidemment inacceptable.

Dans la chambre, on retrouve une pression uniforme voisine de $1.2 \cdot 10^5 Pa$, le nombre de Mach minimum en aval des jet est de 0.1, le col est sonique. La température maximum

est quant à elle supérieure à celle obtenue sur le maillage grossier puisqu'elle est alors de $48.7^{\circ}K$. La vitesse d'éjection des gaz est de 435 m/s .

L'analyse comparative des solutions sur le maillage fin et sur le maillage grossier montre que les variables uniformes (comme la pression) sont identiques. Par contre les variables qui présentent un fort gradient (comme la température) sont fortement diffusées sur le maillage grossier.

Pour réduire les temps de calcul sur le maillage fin, par utilisation de la procédure de pas de temps local, les études précédentes ont montrées qu'il faut se fixer un état constant sur les entrées (suppression des fluctuations et des oscillations du champ de pression). La solution la plus économique consiste alors à imposer sur les entrées l'état obtenu à convergence sur le maillage grossier. Cette procédure a été testée avec succès puisque la solution ainsi obtenue est comparable à la précédente et ceci pour un temps CPU de 40mn sur CRAY-2. Le gain est de l'ordre de 20.

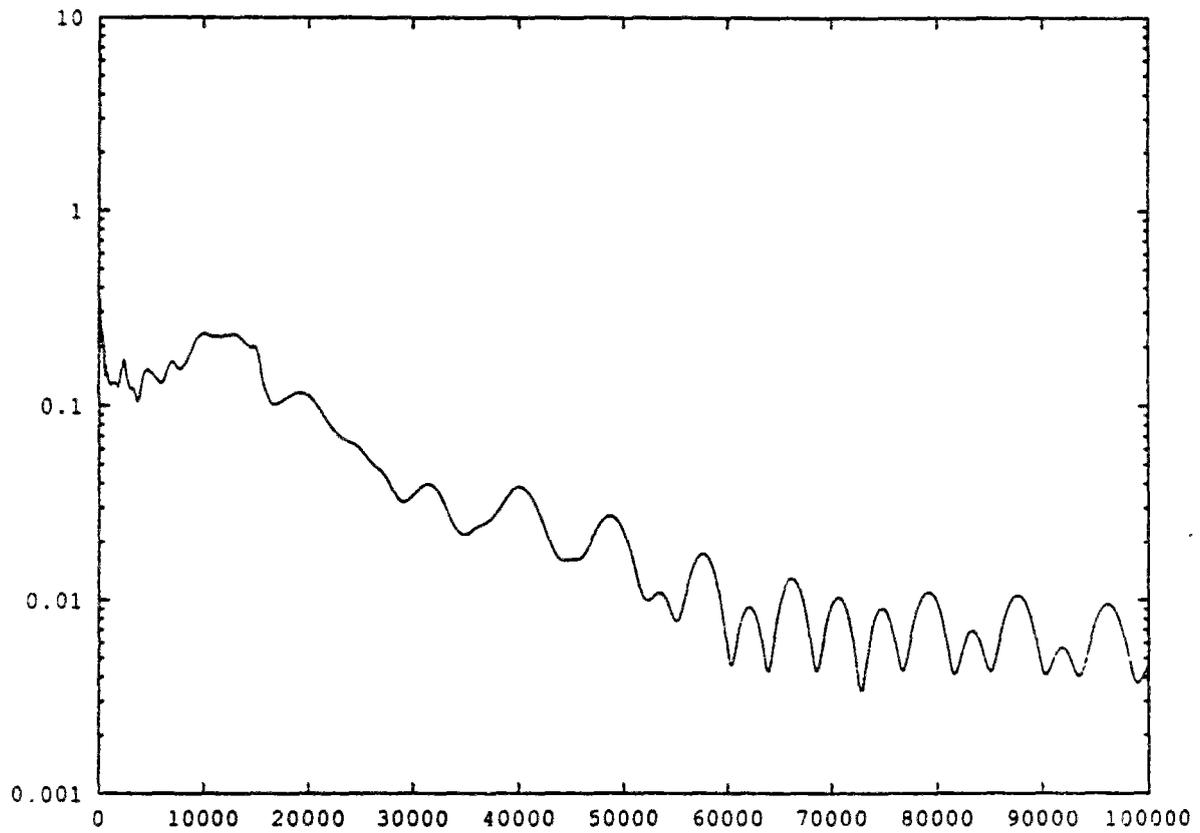


Figure V.3 : Courbe de résidu - Pas de temps global - Maillage grossier

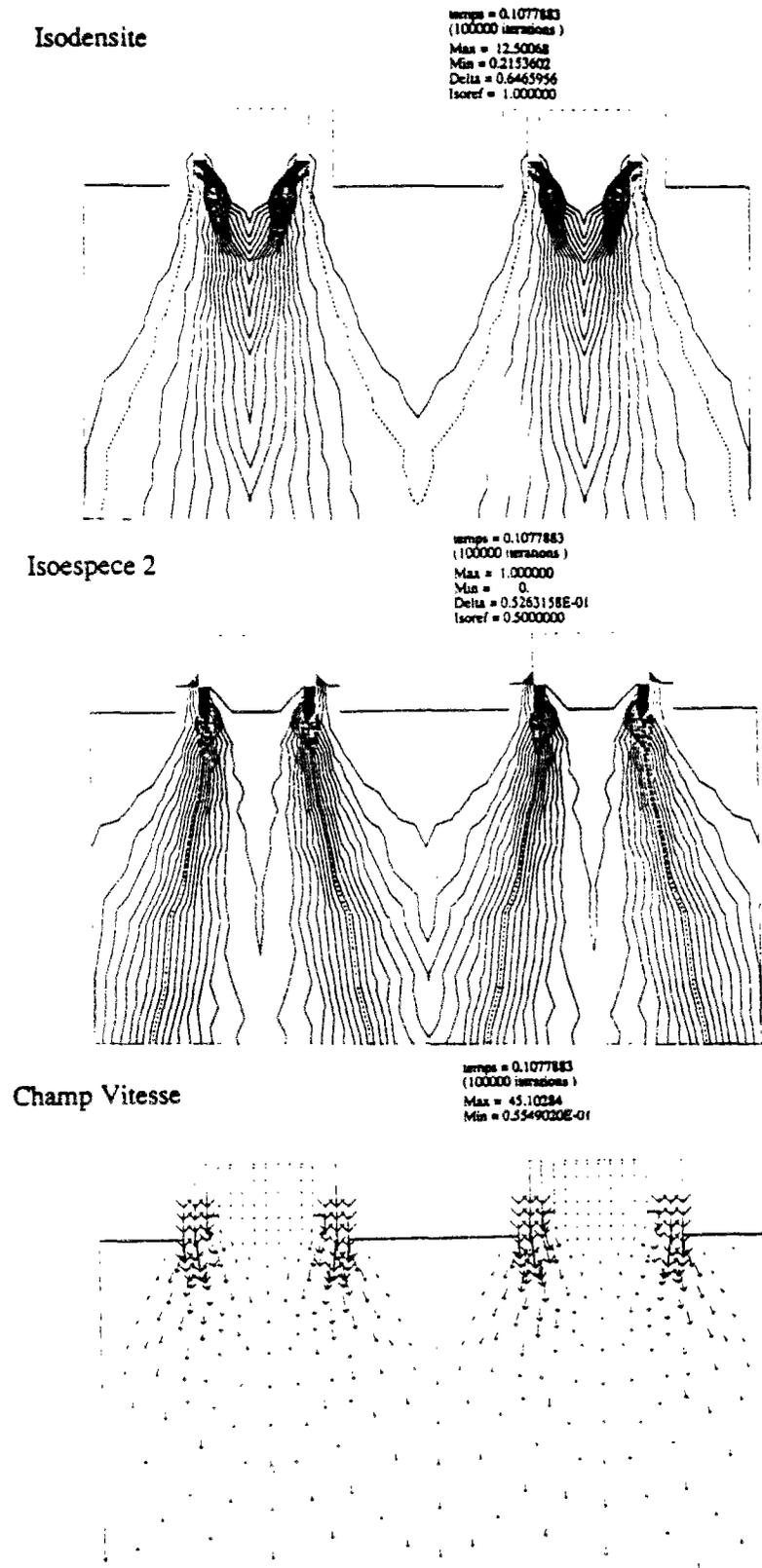


Figure V.4 : Solution Euler - pas de temps global - Maillage grossier

Courbe de résidu - Pas de temps local - Maillage grossier

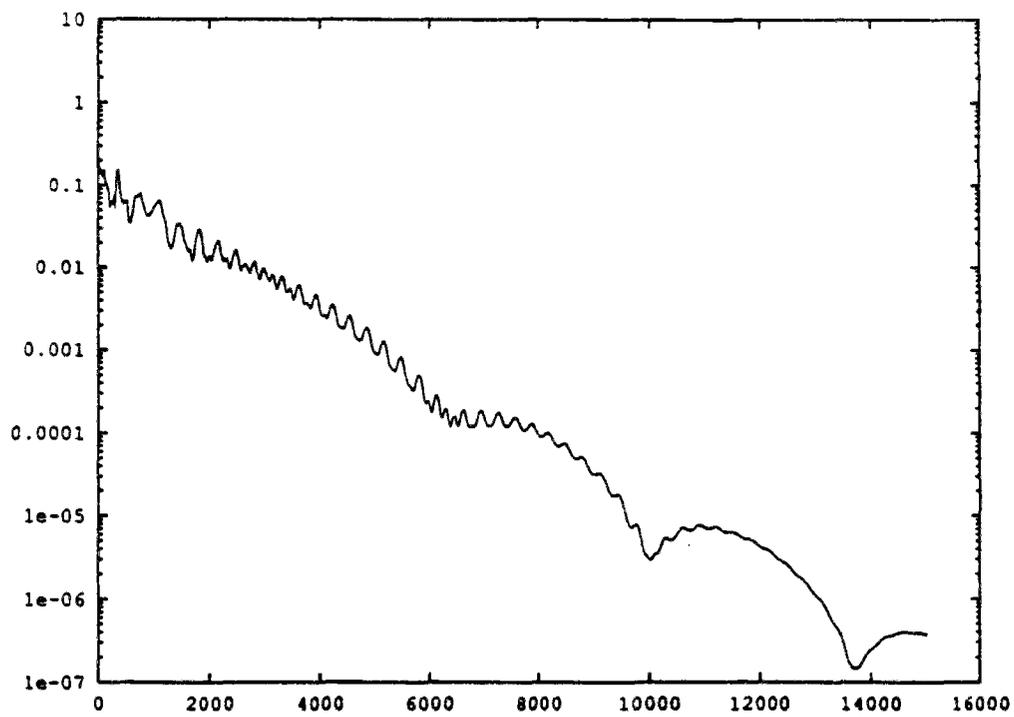
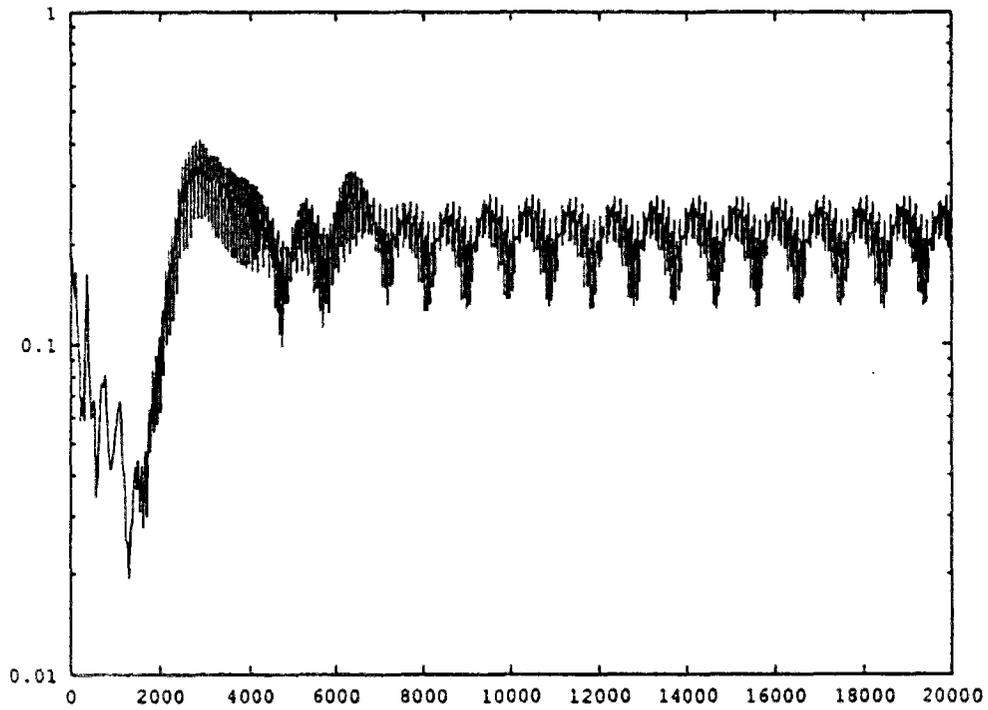


Figure V.5 : Flux de bord $N^0 1$ (haut) et $N^0 2$ (bas)

Solution Euler - Pas de temps local - Maillage grossier

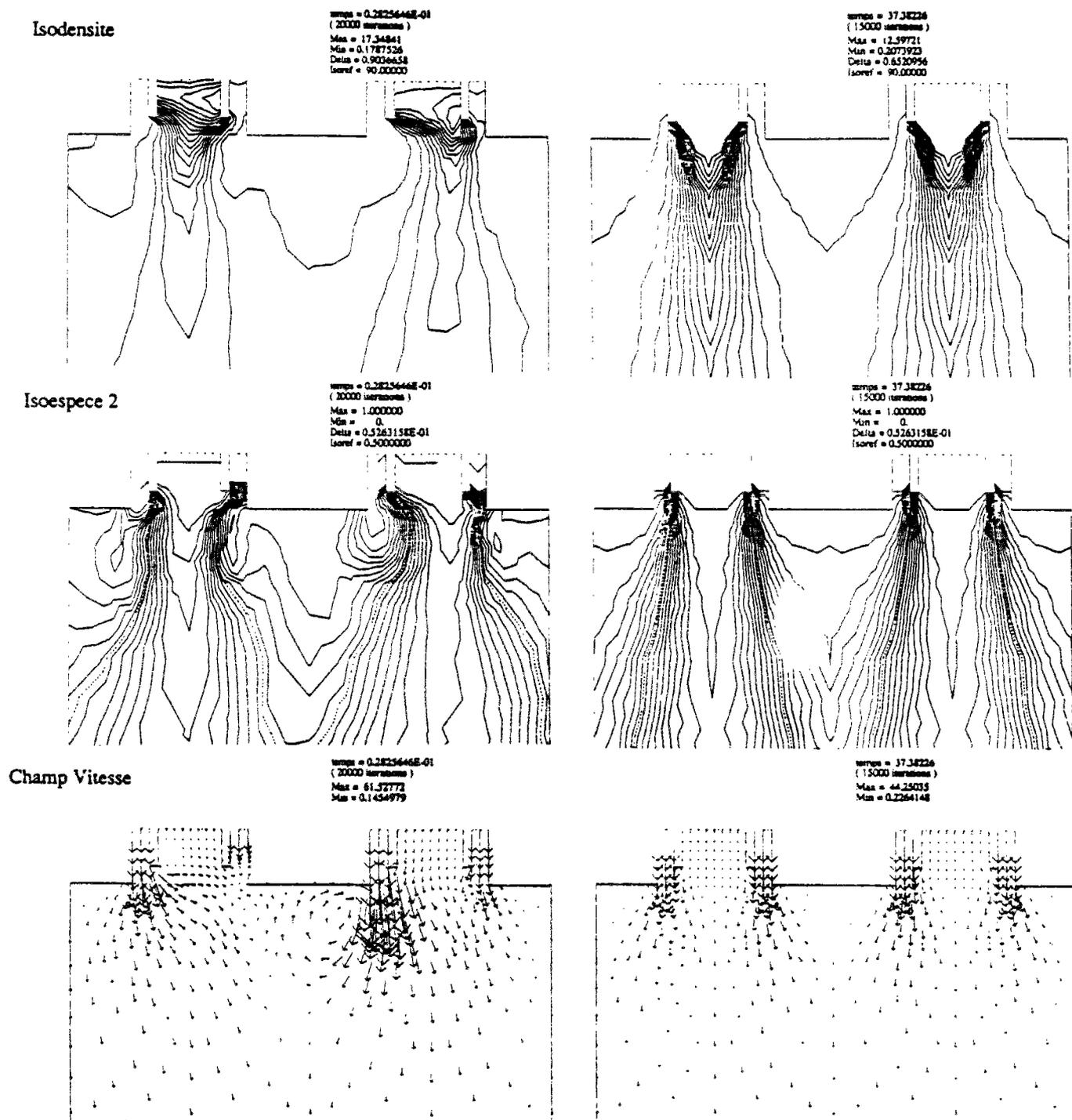


Figure V.6 : Flux de bord N° 1 (gauche), Flux de bord N° 2 (droite)

Solution Euler - Pas de temps local - Maillage fin

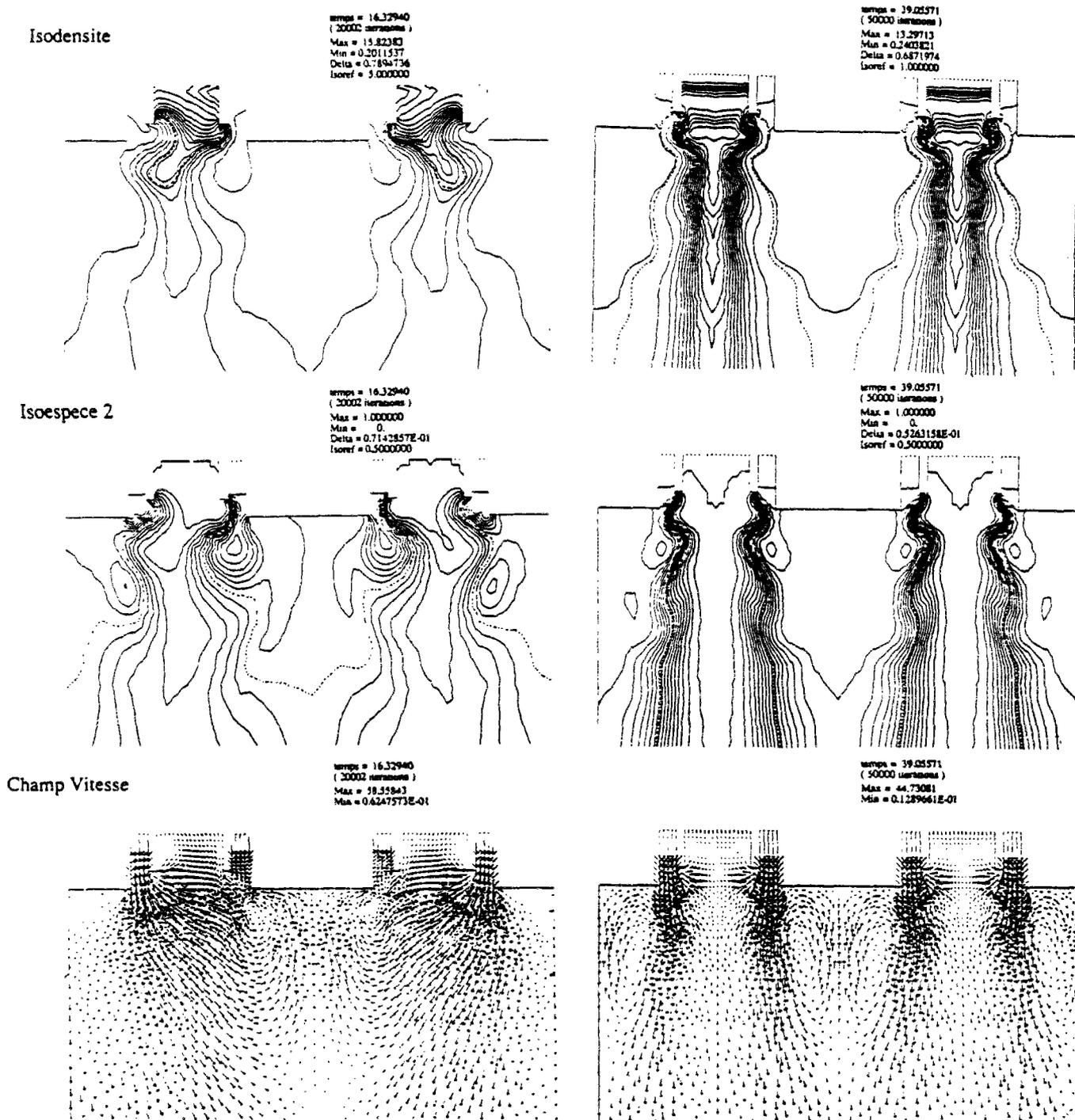


Figure V.7 : Flux de bord N° 1 (gauche) - Flux de bord N° 2 (droite)

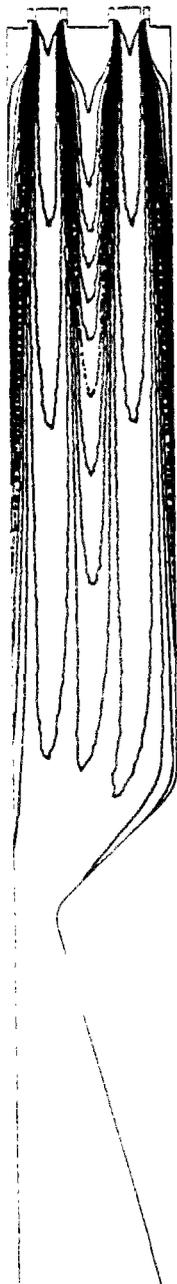
Solution Euler - Pas de temps global - Maillage fin

Isoespece 2

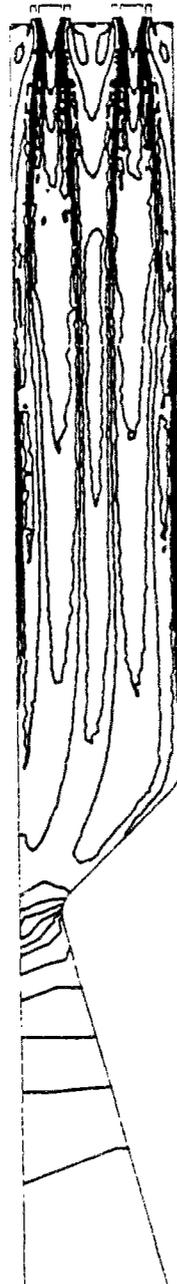
Isotherme

Isomach

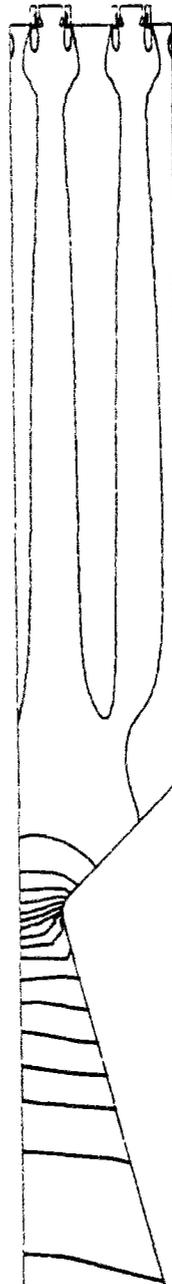
Isodensite



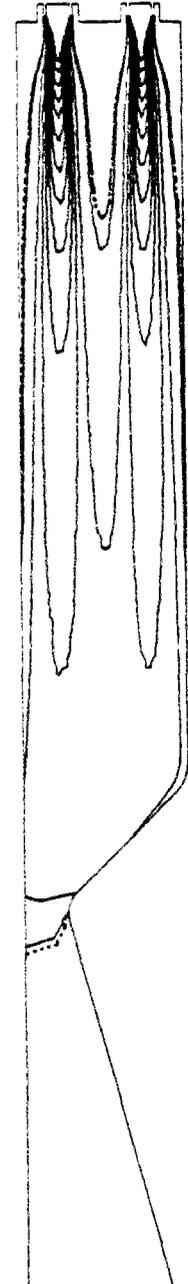
temps = 174.0528
(324000 iterations)
Max = 1.000000
Min = 0.
Delta = 0.7128572E-01
Isoref = 0.5000000



temps = 174.0528
(324000 iterations)
Max = 4.870534
Min = 1.474524
Delta = 0.1787374
Isoref = 1.000000



temps = 174.0528
(324000 iterations)
Max = 2.728262
Min = 0.8203950E-05
Delta = 0.1435923
Isoref = 1.000000



temps = 174.0528
(324000 iterations)
Max = 12.54072
Min = 0.2173022
Delta = 0.8802444
Isoref = 1.000000

Figure V.8 : Isoespece 2 (oxygène), Isotherme, Isomach et Isodensité

Solution Euler - Pas de temps global - Maillage fin

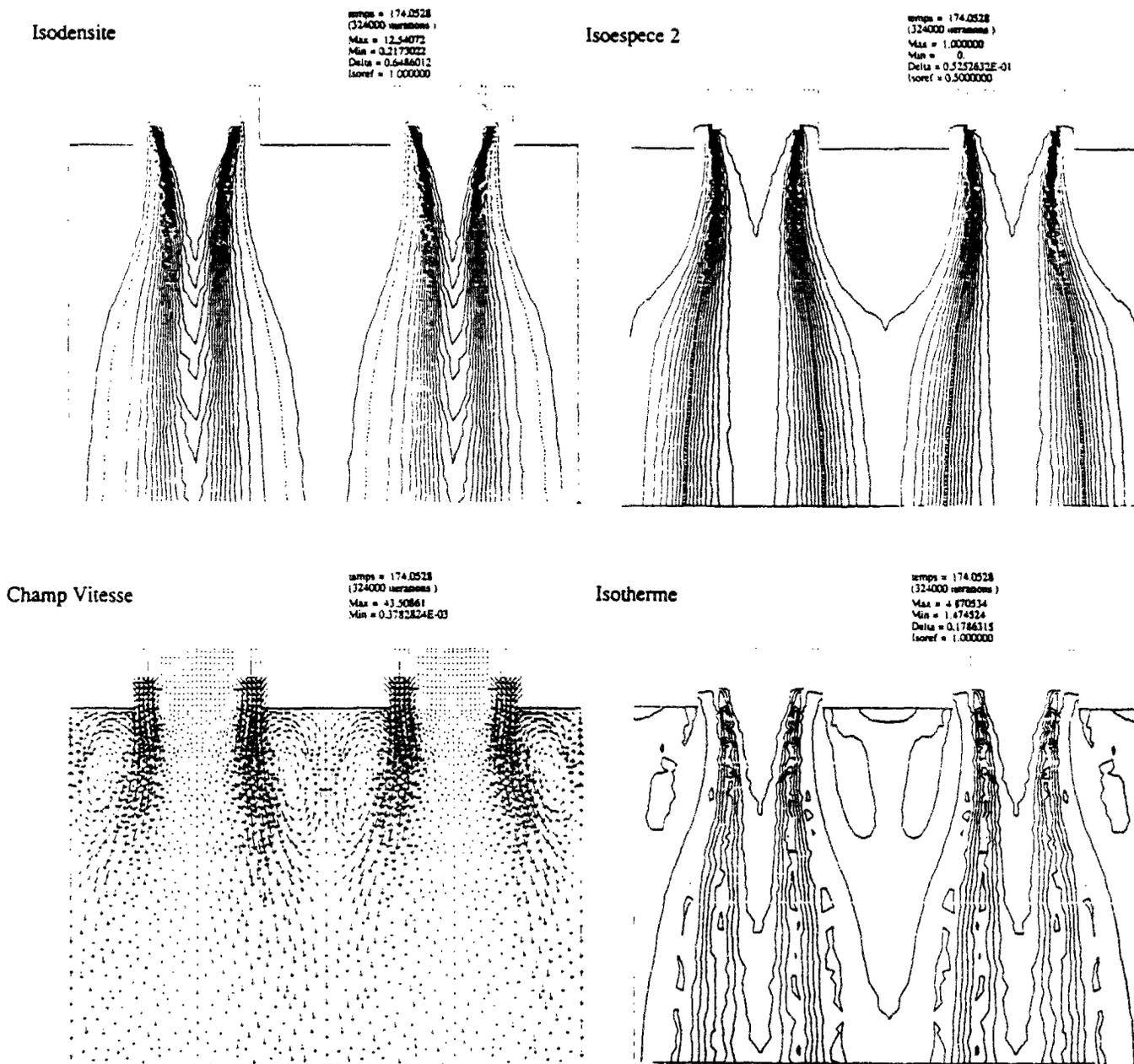


Figure V.9 : Zoom: Champ de vitesse, Isodensité, Isoespece 2 (oxygène) et Isotherme

V.4.3 Solution Euler avec termes diffusifs et combustion

On s'intéresse maintenant à la solution instationnaire avec combustion. On part pour cela de la solution avec diffusion (non présentée dans cette thèse, voir [17]) et on active le processus chimique. La température du réactant étant inférieure à la température de seuil, on initie artificiellement le processus de combustion par dépôt d'énergie sur la paroi de la chambre à proximité du col sur le convergent (voir V.10).

Etant donné que notre objectif principal est l'étude instationnaire de propagation de la flamme, on utilise la procédure de pas de temps global. On présentera aussi la solution stationnaire obtenue avec les pas de temps local sur le maillage grossier.

Un premier calcul a été réalisé sur le maillage fin en prenant pour le temps de réaction $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-5}$ s. Le temps chimique est alors (voir section 4.2.3) 1000 fois plus grand que le temps acoustique. Ce rapport élevé signifie en fait qu'il sera très coûteux d'obtenir la solution stationnaire. Cependant, cette étude présente comme nous allons le voir deux intérêts. On a représenté les lignes isodensités et isothermes pour 6000, 18000, 42000 et 60000 itérations figures V.10 et V.11 (16mn sur CRAY-2 pour 6000 itérations). 6000 itérations après l'allumage (figure V.10) on observe une flamme de prémélange qui remonte normalement l'écoulement. La température que l'on obtient ($3280 \text{ }^\circ\text{K}$) est tout à fait celle prévue par la théorie compte tenu des différentes fractions massiques dans cette partie de la chambre. On remarque aussi que l'initiation de la combustion a généré une onde de pression qui se propage assez vite (voir les courbes isodensité). A 18000 itérations, la flamme n'a pratiquement pas bougé et sa température n'est plus que de $2560 \text{ }^\circ\text{K}$. Par contre l'onde de pression est au niveau des injecteurs et elle déclenche une forte instabilité de jets (voir les isodensités). Ceci confirme l'idée selon laquelle la structure de l'écoulement que l'on étudie est instable. Ensuite (figure suivante), on constate que la flamme est évacuée par le col, sa vitesse ne lui permet pas de remonter vers les injecteurs. La structure instable disparaît si l'on poursuit suffisamment le calcul.

Le fait que la flamme ne se stabilise pas autour des injecteurs ne signifie pas pour autant que le problème que l'on étudie n'admet pas de solution de ce type. Cela signifie simplement qu'il faudrait changer la zone d'allumage. En fait, compte tenu du problème évoqué précédemment sur les temps caractéristiques, on choisit de réduire le temps de réaction tout en conservant la même zone d'allumage. Ceci est l'objet du calcul suivant.

On prend maintenant $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6}$ s. Pour cette valeur du temps de réaction, la flamme arrive à remonter l'écoulement (puisque sa vitesse est plus importante) et se stabilise finalement autour des injecteurs. On a représenté figures V.12 à V.16 les différentes étapes menant à la stabilisation de la flamme. De même que pour le calcul précédent, l'onde de pression génère une instabilité physique qui disparaît à convergence. Cette expérience montre que le processus d'allumage choisi conduit à une forte explosion (pression supérieure à $150 \cdot 10^5 \text{ Pa}$). Le front de flamme se caractérise par une température élevée et une pression élevée. En remontant sur les injecteurs, on comprime le réactant et on élève donc sa température. Lorsque cette température dépasse la température de seuil, on a alors un allumage très rapide et très violent dans la zone comprise entre les injecteurs et le front de flamme. L'écoulement est

principalement turbulent avec de fortes instabilités. La température de flamme dépasse les $12000^{\circ}K$ alors que la pression est supérieure à $150 \cdot 10^5 Pa$. Ensuite, le processus se stabilise et on obtient une flamme de diffusion. La solution presque convergée (306000 itérations soit 14 heures de CRAY-2) donne une température de flamme maximum de $9800^{\circ}K$ pour une pression uniforme de $11.5 \cdot 10^5 Pa$. L'oxygène est alors entièrement brûlé, les gaz éjectés à une vitesse de $3810 m/s$ (soit 8.76 fois plus que pour la solution Euler) ne comportent que de l'eau et de l'hydrogène. La température que l'on obtient est assez proche de la température adiabatique de flamme (section 4.2.4). Rappelons ici que cette température très importante provient du modèle de combustion et des hypothèses de chaleur spécifiques constantes.

Enfin, on a réalisé le même calcul sur le maillage grossier. La solution stationnaire obtenue par la procédure de pas de temps local avec le flux de bord $N^{\circ} 2$ est présentée figure V.17. La solution convergée à 10^{-5} a nécessité 8000 itérations sur CONVEX-C2, le temps CPU est de 30mn soit 3mn sur CRAY-2. La solution que l'on obtient est tout à fait conforme à ce que l'on pouvait attendre, la pression dans la chambre est de $11.5 \cdot 10^5 Pa$ (à peu près la même que celle obtenue sur le maillage fin, par contre on obtient une température maximale de flamme inférieure puisqu'elle est de $8720^{\circ}K$. La vitesse d'éjection des gaz est de $3876 m/s$.

L'obtention sur le maillage grossier d'une solution stationnaire pour un faible temps CPU peut nous autoriser à adopter une démarche identique à celle mise en place pour l'écoulement Euler: utiliser pour les conditions aux limites sur maillage fin les valeurs de la solution convergée sur maillage grossier. Ce procédé, non testé ici, doit nous permettre d'obtenir une solution stationnaire avec combustion sur maillage fin pour un temps CPU inférieur à 60mn sur CRAY-2.

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-3} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Isodensite

Isotherme

Isodensite

Isotherme

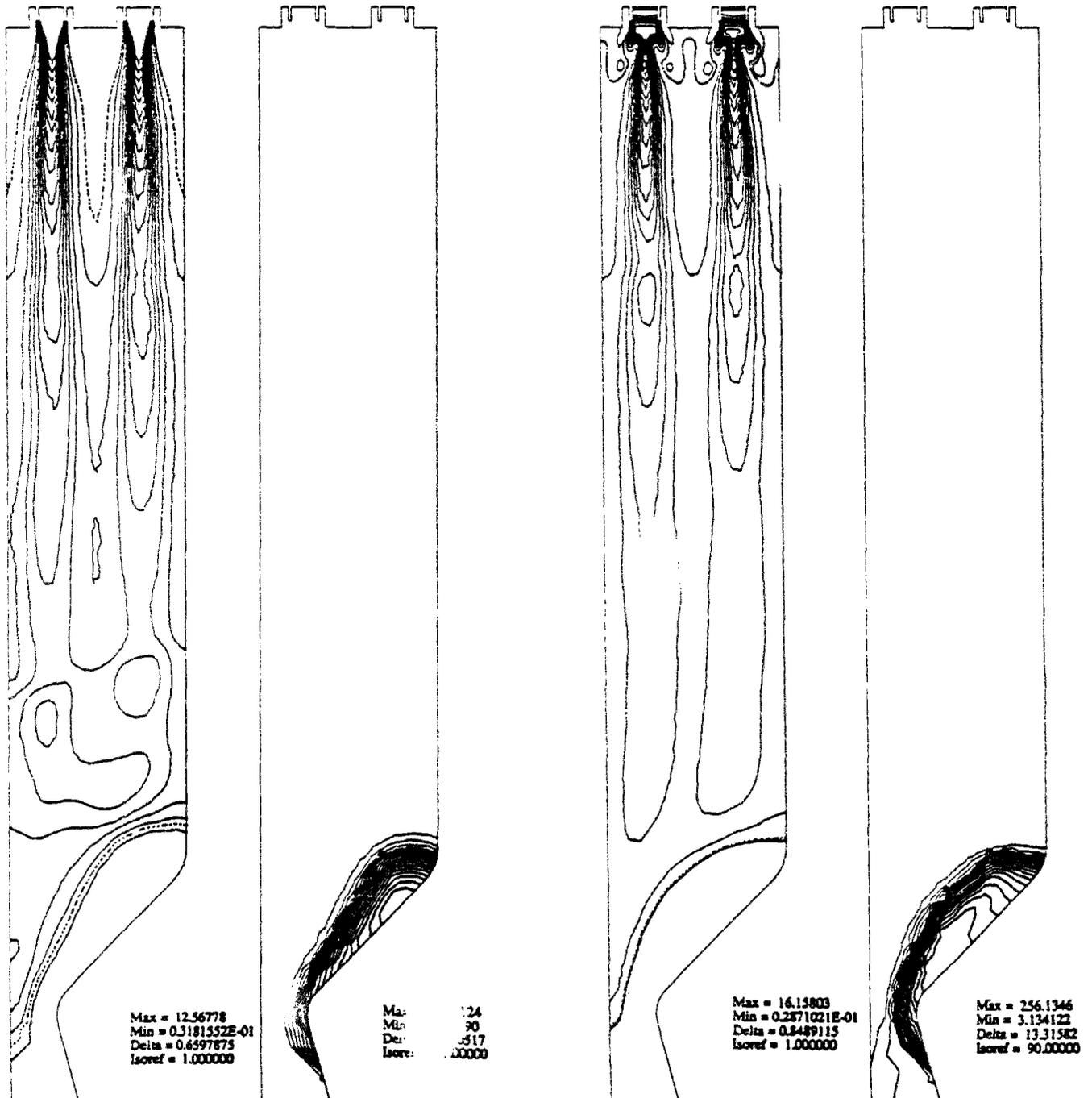


Figure V.10 : Isodensite et Isotherme à 6000 itérations (gauche) et 12000 (droite)

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-5} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Isodensite

Isotherme

Isodensite

Isotherme

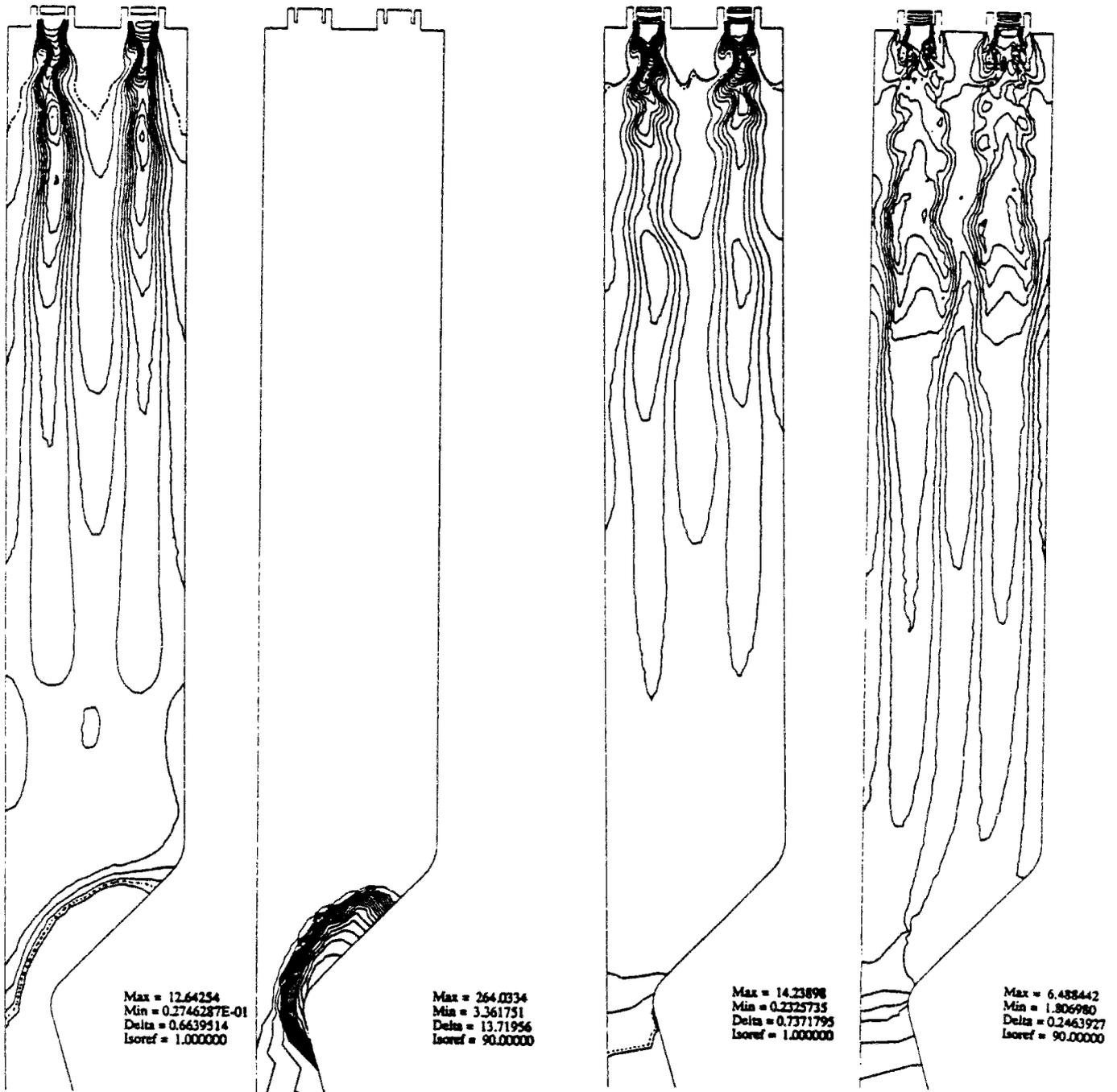


Figure V.11 : Isodensite et Isotherme à 42000 itérations (gauche) et 60000 (droite)

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Champ Vitesse

Isotherme

Champ Vitesse

Isotherme

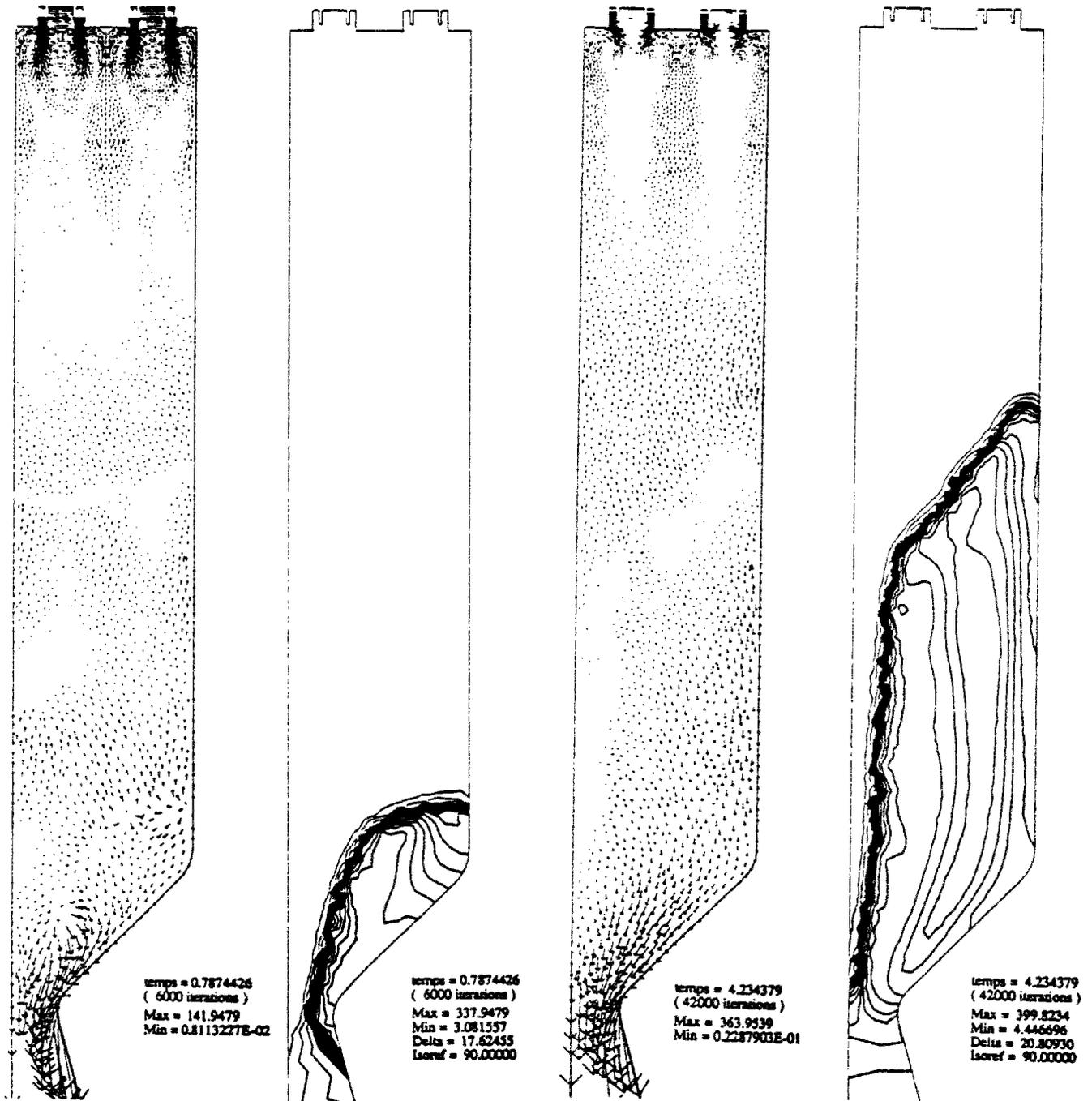


Figure V.12 : Champs de vitesse et Isotherme, itérations 6000 (gauche) et 42000 (droite)

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Champ Vitesse

Isotherme

Champ Vitesse

Isotherme

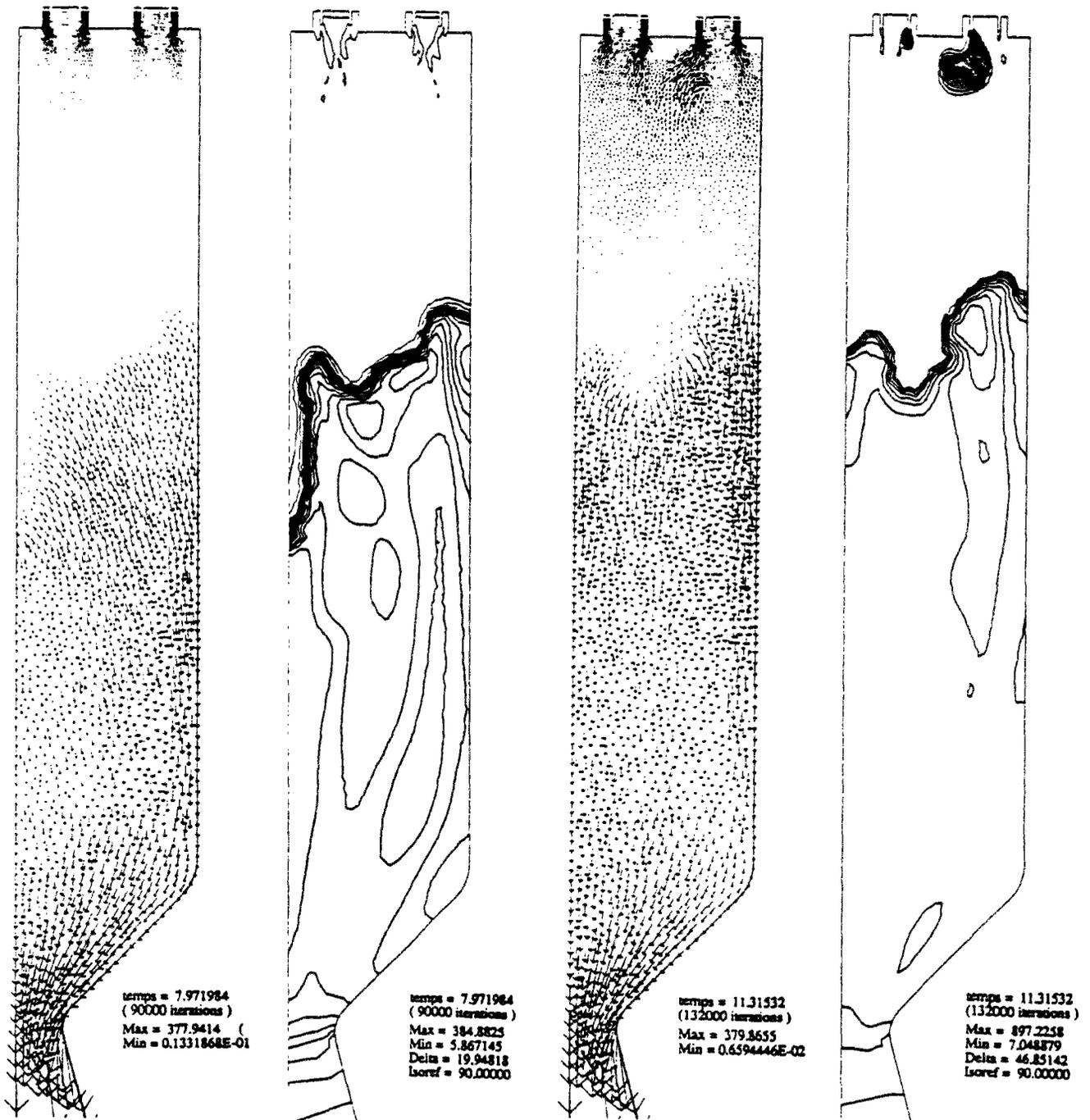


Figure V.13 : Champs de vitesse et Isotherme, itérations 90000 (gauche) et 132000 (droite)

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Champ Vitesse

Isotherme

Champ Vitesse

Isotherme

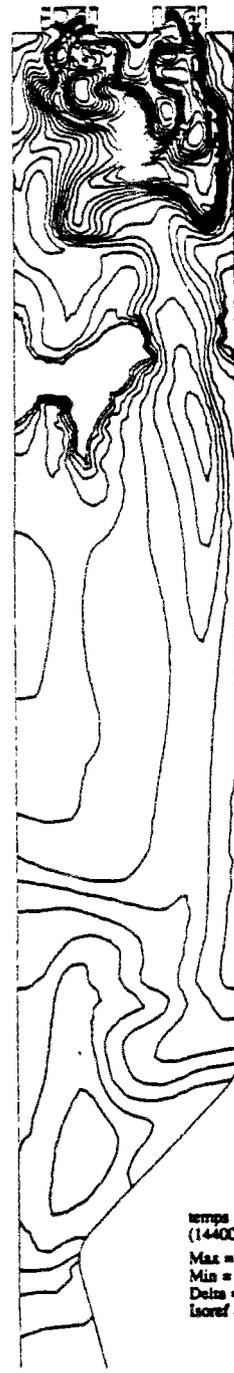
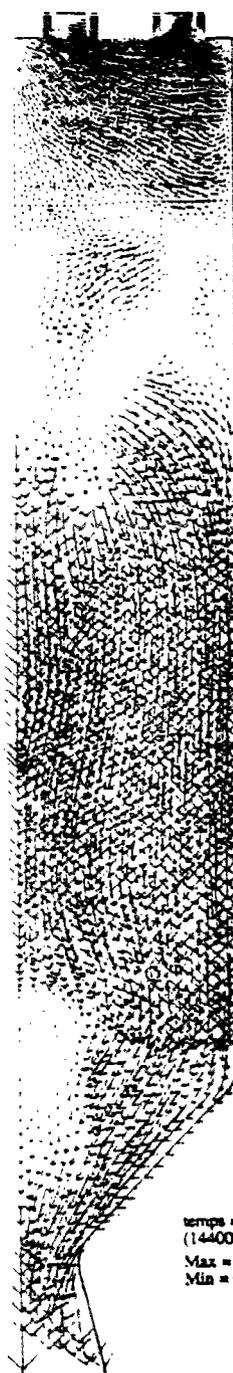
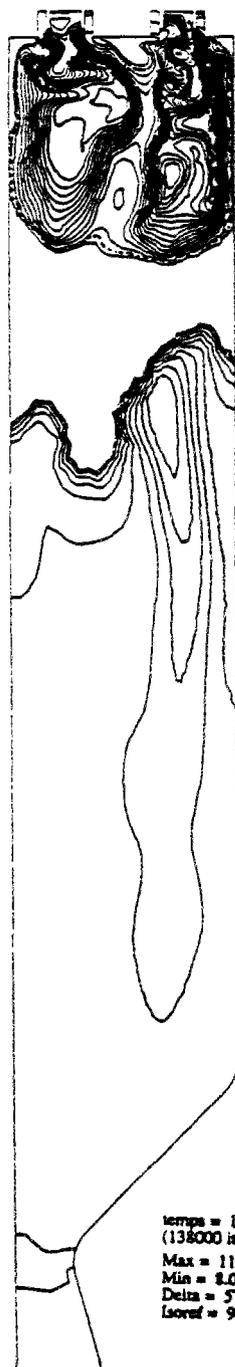
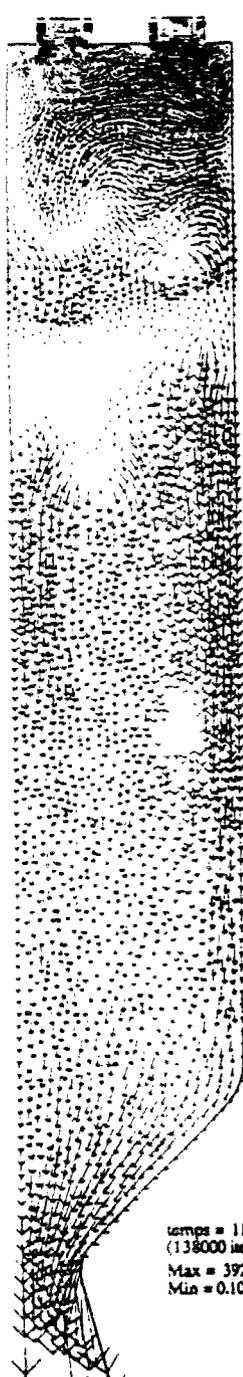


Figure V.14 : Champs de vitesse et Isotherme, itérations 138000 (gauche) et 144000 (droite)

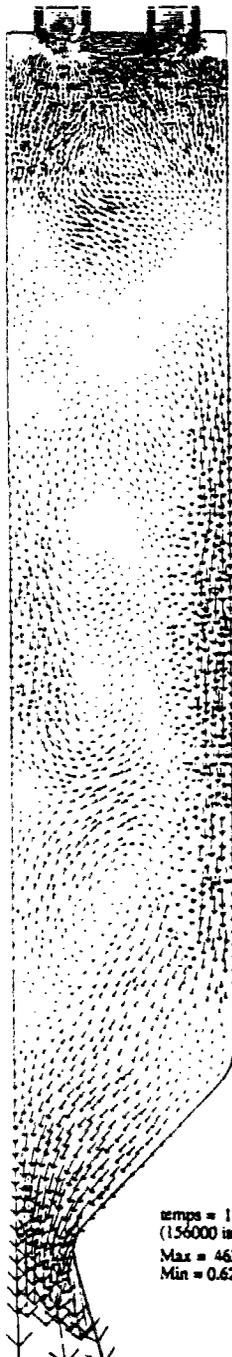
Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Champ Vitesse

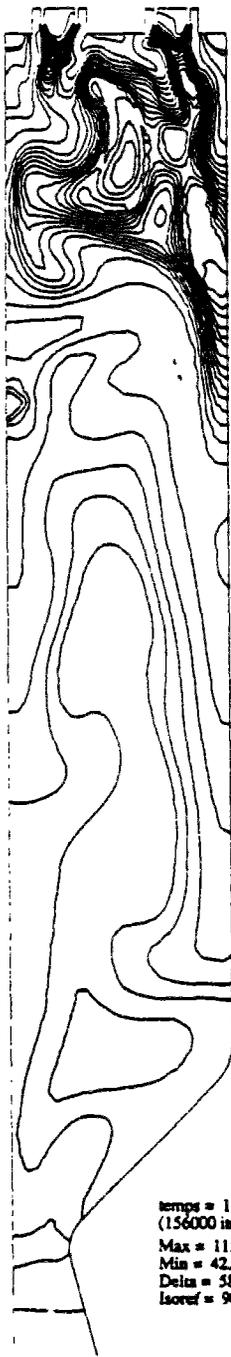
Isotherme

Champ Vitesse

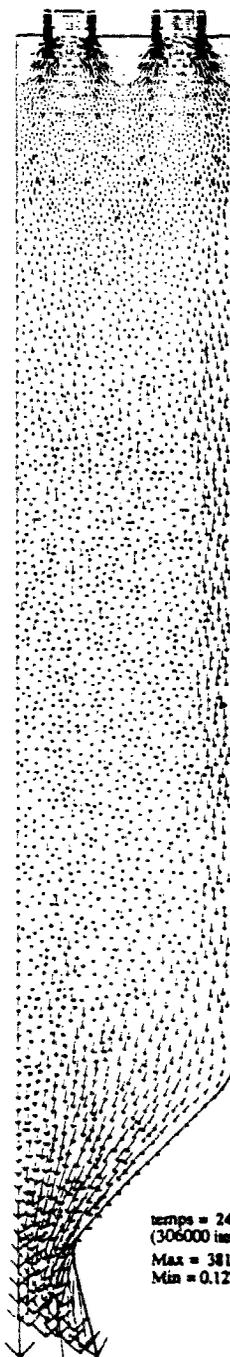
Isotherme



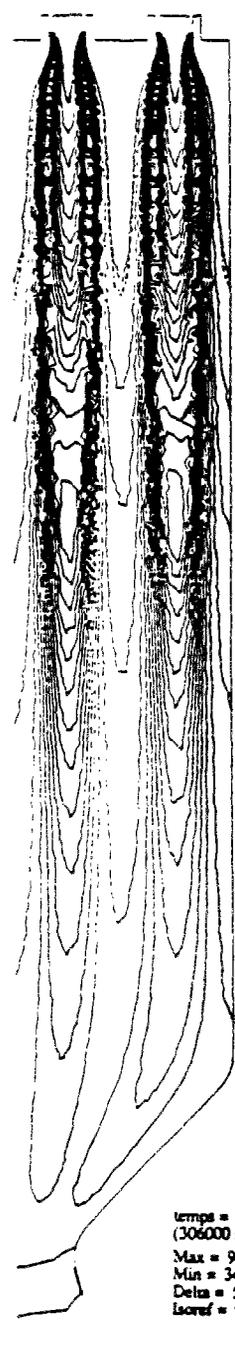
temps = 12.74976
(156000 iterations)
Max = 462.6046
Min = 0.6220284E-01



temps = 12.74976
(156000 iterations)
Max = 1157.624
Min = 42.17793
Delta = 58.70770
Isoref = 90.00000



temps = 24.06126
(306000 iterations)
Max = 381.0073
Min = 0.1270116



temps = 24.06126
(306000 iterations)
Max = 987.9100
Min = 34.90918
Delta = 50.15794
Isoref = 90.00000

Figure V.15 : Champs de vitesse et Isotherme, itérations 156000 (gauche) et 306000 (droite)

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6} s$ - Pas de temps global - Maillage fin

Isoespece 1

Isoespece 2

Isoespece 3

Isoomega

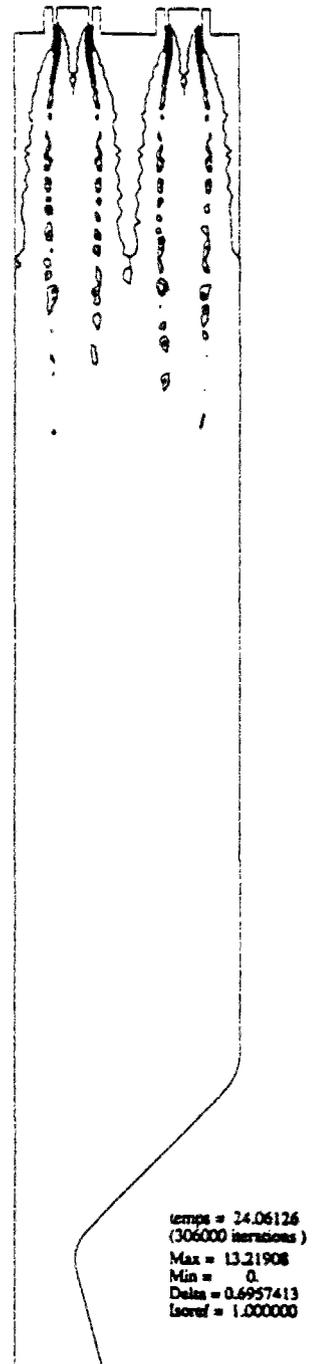
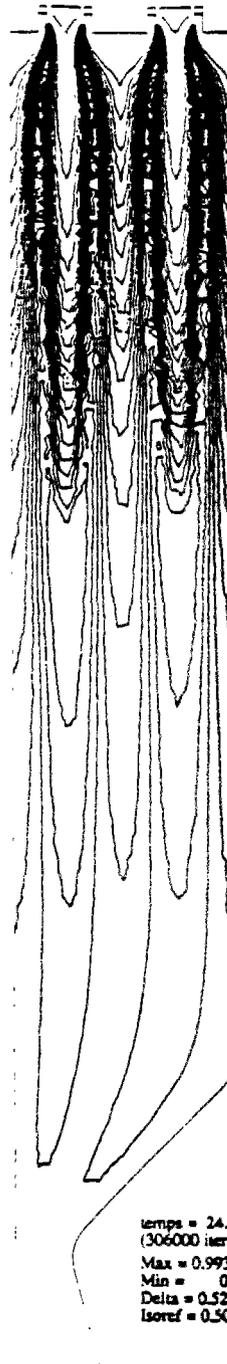
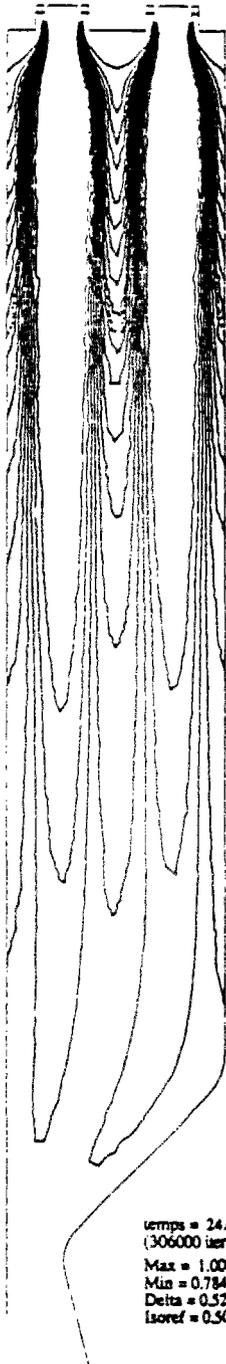
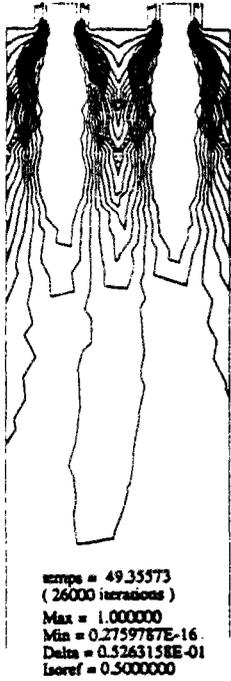


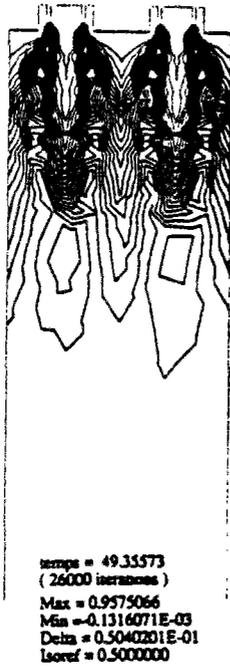
Figure V.16 : Itération 306000 - Isoespece 1, 2, 3 (H_2 , O_2 , H_2O) et Isoomega

Solution avec combustion $\tau_c = 1.5 \cdot 10^{-6} s$ - Pas de temps local - Maillage grossier

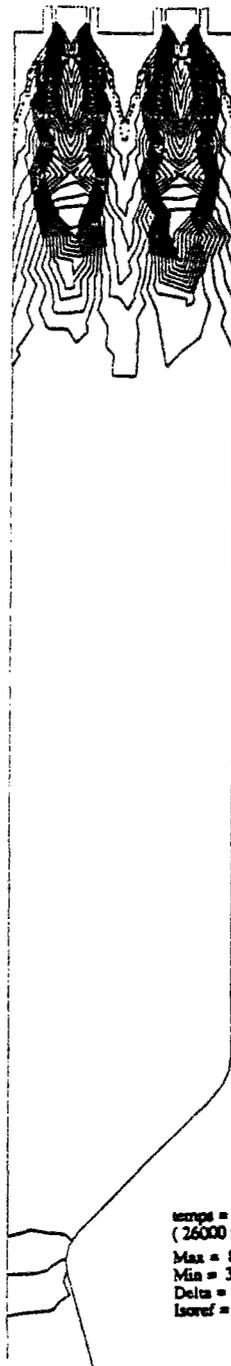
Isoespece 1



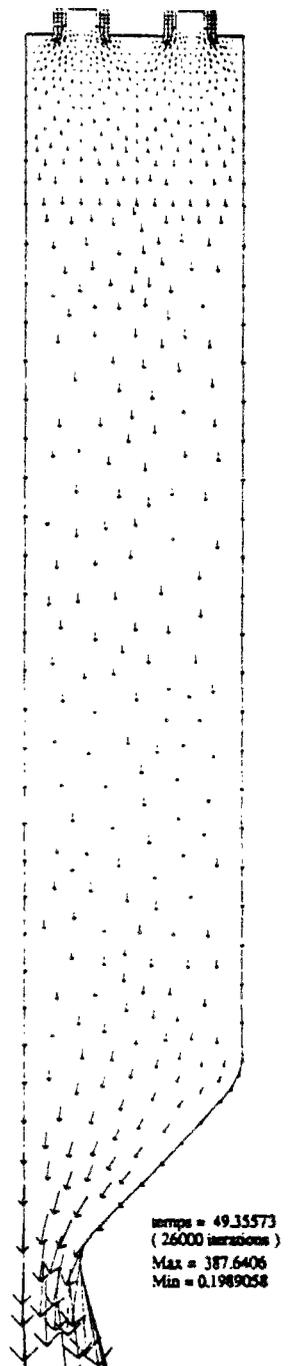
Isoespece 3



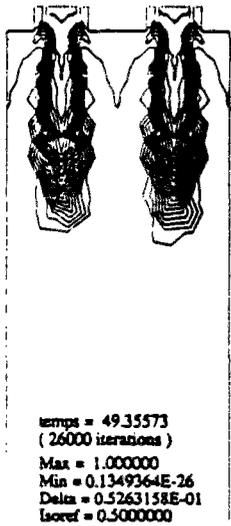
Isotherme



Champ Vitesse



Isoespece 2



Isoomega

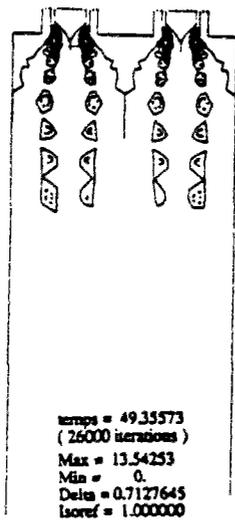


Figure V.17 : Isoespece 1, 2, 3 (H_2 , O_2 , H_2O), Isooméga Isotherme et champ de vitesse

V.5 CONCLUSION

Plusieurs conclusions d'ordre physique et numérique s'imposent.

Pour le problème physique que l'on se propose de résoudre, il semble nécessaire de revoir plus en détail le modèle choisi si l'on souhaite obtenir une meilleure prédiction des variables physiques essentielles (comme la pression ou la température). Les différentes améliorations que l'on peut envisager sont principalement de deux types. Le premier porte sur la cinétique chimique avec l'inclusion d'espèces chimiques supplémentaires. On peut ainsi prendre en compte les réactions endothermiques essentielles qui apparaissent lors de la combustion d'un mélange d'hydrogène et d'oxygène. Le second porte plus particulièrement sur l'évolution de certaines quantités physiques (coefficients de diffusion) et thermodynamiques (chaleurs spécifiques à pression constante) en fonction de la température. Il va de soi que le modèle ainsi défini permettrait sans aucun doute une nette amélioration des résultats numériques mais qu'il entraînerait aussi une élévation importante des temps de calcul.

Sur le plan numérique, on a dû résoudre un certain nombre de problèmes nouveaux. Les deux principaux problèmes rencontrés sont dus d'une part aux conditions limites entrantes qui contrairement aux précédents cas tests sont subsoniques et d'autre part au caractère subsonique de la solution dans la chambre (nombre de Mach voisin de 0.1). A ceci est venu s'ajouter une difficulté supplémentaire liée à la présence d'instabilités.

Pour la recherche d'une solution stationnaire, l'intérêt d'une discrétisation explicite en temps est double. Elle peut permettre à moindre coût l'inclusion de modèles physiques sophistiqués et, lorsque cela est possible, l'utilisation du pas de temps local s'avère très performante. Malheureusement, pour notre problème, la présence d'une instabilité associée aux conditions entrantes ne permet pas l'obtention d'une solution convergée avec cette procédure de pas de temps local. D'autre part, le pas de temps global conduit à des temps de calculs inacceptables. On a donc construit un flux de bord compatible avec la solution que l'on doit obtenir qui permet l'utilisation du pas de temps local. Ce flux permet sur le maillage grossier l'obtention d'une solution stationnaire pour un temps CPU inférieur à 3mn CRAY-2. Sur le maillage fin, la faible diffusion numérique n'autorise pas l'obtention d'un état stationnaire. La solution que l'on a testé avec succès consiste alors à forcer les entrées avec l'état obtenu à convergence sur le maillage grossier.

Le calcul grossier semble suffisamment précis pour constituer une bonne condition initiale à un calcul fin; il a en l'occurrence servi à construire une bonne condition aux bords. Cette remarque suggère aussi une approche multi-grille.

Ce cas test à deux maillages confirme l'intérêt potentiel d'une approche en maillage adaptatif, puisque le calcul est réalisable en maillage grossier, qui permettrait en stationnaire (adaptatif statique) de restreindre le raffinement au voisinage immédiat des couches de gradient, et en instationnaire (adaptatif dynamique) de suivre la flamme dès l'allumage. En instationnaire, lorsque les rapports des temps caractéristiques des phénomènes physiques intervenant sont importants (comme c'est le cas pour le calcul instationnaire de combustion),

une discrétisation semi-implicite semble la meilleure solution pour réduire les temps de calcul.

La comparaison maillage grossier/ maillage fin fournit les réponses suivantes sur la précision:

D'une part un calcul grossier à 800 points en 2-D s'est avéré possible et plus facile à faire converger que le calcul fin; compte tenu des effets géométriques, le calcul équivalent en 3-D contiendrait 10000 à 20000 points.

Ce calcul grossier donne une précision globale entre 10 et 20 % sur les valeurs les plus représentatives de l'écoulement avec toutefois de plus gros écarts sur la localisation des forts gradients. Des maillages aussi pauvres peuvent être utilisés pour des prédictions très approximatives, mais cette conclusion pourrait être révisée quand des modèles turbulents seront utilisés.

Chapitre VI

ETUDE D'UNE CLASSE DE SCHEMAS IMPLICITES PAR RELAXATION NON LINEAIRE POUR LES SYSTEMES HYPERBOLIQUES AVEC OU SANS TERME SOURCE

VI.1 INTRODUCTION

La résolution par des méthodes implicites de systèmes hyperboliques décrivant les lois de conservation a connu un grand essor ces dernières années. Ces méthodes permettent, pour la plupart, de s'affranchir du critère de stabilité (de type CFL, Courant-Friedrichs-Lewy). L'utilisation de grands pas de temps est alors possible et on peut ainsi espérer obtenir une solution stationnaire (lorsqu'elle est recherchée) pour un moindre coût. Deux grandes classes de schémas implicites existent: les schémas implicites linéarisés et les schémas totalement implicites. Ces deux classes conduisent en monodimensionnel à la résolution de systèmes linéaires tridiagonaux par bloc pour les schémas centrés (Beam et Warming [4], Lerat [44]) et à la résolution de systèmes linéaires bidiagonaux pour les schémas décentrés (Mc Cormack [47]).

Plus récemment, Stoufflet [63] a construit une classe de schémas implicites inconsistants en temps. Considérant le schéma explicite de départ comme un processus de relaxation de Jacobi non linéaire, il construit le schéma associé à un algorithme de relaxation de Gauss-Seidel (voir ci-dessous). Il a pu, par cette méthode, obtenir un gain de 4 à 5 par rapport à un schéma explicite.

L'objet de ce travail est de présenter une méthode de résolution des équations d'Euler monodimensionnelles avec ou sans terme source par un schéma totalement implicite consistant en temps, où une relaxation non linéaire par point est utilisée en suivant l'idée de Stoufflet [63]. La phase non linéaire due à la présence du terme source est résolue par une méthode de Newton. Un des intérêts directs de cette méthode, par rapport aux méthodes existantes, est l'absence de matrices implicites à stocker. En fait, la recherche de nouveaux schémas implicites consistants en temps est surtout motivée par les problèmes de combustion (présence d'un terme source) pour lesquels l'utilisation d'un schéma explicite peut donner des temps de calculs très importants.

Dans une première partie, on cherche à établir des théorèmes de convergence pour ce type de schéma. Après avoir précisé l'équation scalaire monodimensionnelle qui servira de base à notre étude, et ce que l'on attend d'un "bon schéma", on rappelle des définitions et des théorèmes généraux de convergence. Malheureusement, on n'a pas été en mesure de montrer, même dans le cas linéaire et sans terme source, la convergence vers une solution faible de notre schéma de relaxation. Par contre, on a pu montrer que ce schéma implicite possède de bonnes propriétés de stabilité inconditionnelle et, pour le cas linéaire, de préservation de la variation totale (schéma TVD : Total Variation Diminishing).

Ensuite, on étudie sur une équation scalaire linéaire la convergence de la phase de relaxation. On montre notamment l'influence sur la convergence de chacun des termes présents dans l'équation (convection, diffusion, terme source) et on discute sur la possibilité d'accélérer la convergence par utilisation de paramètres de sous- ou sur-relaxation.

Enfin, dans une dernière partie, on applique ces schémas de relaxation sur un problème pseudo-stationnaire de combustion à boîte ouverte. On met en évidence l'importance de la procédure de sur-relaxation pour obtenir une réduction des temps de calculs. Pour finir, on discute de l'intérêt que présente cette classe de schémas implicites.

VI.2 PRESENTATION DU PROBLEME SCALAIRE

On souhaite résoudre par une méthode implicite le système hyperbolique monodimensionnel suivant:

$$\begin{cases} u_t + f(u)_x + g(u) = 0 & \forall (x, t) \in \mathbb{R} \times]0, T[, \\ u(x, 0) = u_0(x) & \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (108)$$

On notera h et Δt les pas spatial et temporel, et $\sigma = \frac{\Delta t}{h}$ (σ est une constante positive). On découpe \mathbb{R} en une infinité d'intervalles I_i :

$$I_i = \left[\left(i - \frac{1}{2}\right)h, \left(i + \frac{1}{2}\right)h \right[\quad \forall i \in \mathbb{Z},$$

et l'intervalle $[0, T]$ en N intervalles notés V_n :

$$V_n = [n\Delta t, (n+1)\Delta t[\quad \forall n \in [0, \dots, N-1], \quad N = \frac{T}{\Delta t}$$

Soient $\chi_i(x)$ et $\chi^n(t)$ les fonctions caractéristiques de I_i et V_n . Pour toute fonction $u(x, t) \in L^\infty(\mathbb{R} \times]0, T[)$, on définit l'approximation spatiale $u_h(x, t)$ par:

$$u_h(x, t) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{n=0}^{n=N-1} u_i^n (\chi_i \otimes \chi^n)(x, t),$$

avec:

$$u_i^n = \frac{1}{h} \int_{I_i} u(x, n\Delta t) dx.$$

On définit aussi l'approximation temporelle $u^{\Delta t}(x, t)$ par:

$$u^{\Delta t}(x, t) = \sum_{n=0}^{n=N-1} u^n(x) \chi^n(t),$$

avec:

$$u^n(x) = u(x, n\Delta t).$$

VI.2.1 Schéma de relaxation

On utilise un schéma sous forme conservative à deux niveaux en temps et trois points en espace. Soit:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{h} (\Phi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \Phi_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) + g(u_i^{n+1}) = 0, \quad (109)$$

le flux numérique $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$ est donné par $\Phi_{i+\frac{1}{2}} = \Phi(u_i, u_{i+1})$ où la fonction de flux numérique Φ vérifie la relation de consistence $\Phi(u, u) = f(u)$. On prend pour le flux numérique Φ , une classe de flux appelée classe des Q-schémas ([63]-[67]), où Φ est de la forme:

$$\Phi(u, v) = \frac{f(u) + f(v)}{2} - q(u, v)(v - u).$$

Remarque:

Il est facile de voir que les différents flux numériques que l'on a présentés dans les chapitres précédents appartiennent à cette classe des Q-schémas.

En utilisant cette dernière expression, (109) se réécrit:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2} (f(u_{i+1}^{n+1}) - f(u_{i-1}^{n+1})) + \sigma q(u_i^{n+1}, u_{i+1}^{n+1})(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) - \sigma q(u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1})(u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) - \Delta t g(u_i^{n+1}). \quad (110)$$

Le système à résoudre pour construire u^{n+1} à partir de u^n est non trivial puisque le schéma (110) est a priori non linéaire (f , g et q sont non linéaires).

Aussi pour passer de l'étape n à l'étape $n + 1$, on construit à partir de (110) une suite $\{u^\alpha\}^\alpha$ où tous les termes non linéaires relatifs à la convection sont pris à l'étape de relaxation précédente. En utilisant un algorithme de type Gauss-Seidel et en supposant un balayage des noeuds dans le sens croissant, on définit la suite des u_i^α par:

$$\begin{cases} \forall i \in \mathbf{Z}, \forall \alpha \in \mathbf{N}, \\ u_i^{\alpha+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2}(f(u_{i+1}^\alpha) - f(u_{i-1}^\alpha)) + \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha)(u_{i+1}^\alpha - u_i^{\alpha+1}) \\ \quad - \sigma q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha)(u_i^{\alpha+1} - u_{i-1}^{\alpha+1}) - \Delta t g(u_i^{\alpha+1}), \\ u_i^{\alpha=0} = u_i^n. \end{cases} \quad (111)$$

Remarque 1:

Cette écriture suppose, comme nous l'avons dit, un balayage sur les noeuds dans le sens croissant. Dans la pratique pour améliorer la convergence de la méthode (la convection pouvant se faire aussi de $i + 1$ vers i), il conviendra de faire un balayage dans les deux sens (croissant et décroissant) (voir Stève [62]). On explicitera ceci ultérieurement.

Remarque 2:

Bien que non linéaire en général, le terme source $g(u)$ doit être pris, pour des raisons de stabilité, à l'étape de relaxation $\alpha + 1$. Le système non linéaire que l'on obtient ainsi sera résolu par une méthode de Newton.

Remarque 3:

Le schéma de Stoufflet [63] est donné simplement par la première itération de (111) (avec $g(u) = 0$), c'est-à-dire $u_i^{n+1} = u_i^{\alpha=1}$. Bien évidemment ce schéma est non conservatif et inconsistant en temps.

On souhaite maintenant, avant d'aborder l'aspect programmation, déterminer de façon théorique si un tel schéma a de bonnes propriétés. On se pose les questions suivantes:

1. Convergence de la suite u_i^α : a-t-on, pour tout $i \in \mathbf{Z}$, $\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} u_i^\alpha = u_i^{n+1}$, solution de (110)?
2. Convergence lorsque h et Δt tendent vers 0 de la solution numérique u_i^n vers une solution faible de (108).
3. Unicité de la solution obtenue: on souhaite sélectionner par un tel schéma la solution entropique de (108).
4. Stabilité L^2 inconditionnelle (sans limitation du pas de temps Δt).
5. Stabilité L^∞ (solution numérique sans oscillation).

Dans le cas général des équations d'Euler (même en monodimensionnel), la convergence des schémas numériques vers une solution faible, voire la solution entropique, est un problème ouvert. Par contre dans le cas scalaire, on sait démontrer l'existence et l'unicité de la solution moyennant certaines hypothèses. On citera par exemple les travaux de Le Roux [45], qui montre pour un schéma explicite du type Godunov la convergence vers une solution faible sous une condition de CFL. Plus proche des travaux que nous avons réalisés, Stoufflet [63]

montre aussi la convergence vers une solution faible pour son schéma implicite. Dans ces deux travaux, la démonstration de convergence de la solution discrétisée repose sur la vérification du principe du maximum, et sur des estimations de la variation totale spatiale et temporelle, tandis que la convergence vers une solution faible unique au sens de Kruzkov repose sur des méthodes de viscosité.

Pour mener à bien une étude analogue, appliquée à notre schéma de relaxation (110), on dispose des résultats suivants dus à Le Roux [45].

VI.2.2 Rappels

On considère le problème scalaire à valeur initiale (108). La condition initiale (u_i^0) est définie en tout point i du maillage par:

$$u_i^0 = \frac{1}{h} \int_{I_i} u_0(x) dx.$$

Par application d'un schéma numérique, on calcule u_i^{n+1} pour tout $i \in \mathbf{Z}$. On notera $u^{n+1} = T_h u^n$, T_h désignant l'opérateur du schéma numérique. On définit alors l'approximation spatiale $u_h(x, t)$ par:

$$u_h(x, t) = \sum_{i \in \mathbf{Z}} \sum_{n=0}^{n=N-1} u_i^n (\chi_i \otimes \chi^n)(x, t).$$

Enfin, on note $BV_{loc}(\mathbb{R})$ l'espace des fonctions à variation totale localement bornée.

Définition 1 - Solution faible du problème de Cauchy

Une solution faible du problème de Cauchy (108) est une fonction $u \in L^\infty(\mathbb{R} \times]0, T[)$ vérifiant:

$$\begin{cases} \forall \phi \in C_0^2(\mathbb{R} \times]0, T[), \\ \iint_{\mathbb{R} \times]0, T[} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} u + \frac{\partial \phi}{\partial x} f(u) - \phi g(u) \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}} \phi(x, 0) u_0(x) dx = 0. \end{cases}$$

Définition 2 - Solution faible au sens de Kruzkov [37]

Une solution faible au sens de Kruzkov du problème de Cauchy (108) (pour $g(u) \equiv 0$) est une fonction $u \in L^\infty(\mathbb{R} \times]0, T[)$ vérifiant:

$$\begin{cases} \forall k \in \mathbb{R}, \forall \phi \in C_0^2(\mathbb{R} \times]0, T[) \text{ positive,} \\ \iint_{\mathbb{R} \times]0, T[} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} |u - k| + \frac{\partial \phi}{\partial x} \text{sign}(u - k)(f(u) - f(k)) \right) dx dt \geq 0, \\ \text{avec } \lim_{t \rightarrow 0} \int_{|x| < R} |u(x, t) - u_0(x)| dx = 0, \forall R > 0. \end{cases}$$

Théorème 3 - Existence d'une solution faible au sens de Kruzkov

Il existe une solution unique au sens de Kruzkov du problème de Cauchy à valeur initiale (108).

Afin d'assurer la convergence de la solution discrétisée du problème (108), on dispose du théorème de compacité suivant:

Théorème 4 - Théorème de convergence

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sous les hypothèses suivantes:} \\ u_0 \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap BV_{loc}(\mathbb{R}), \\ \exists C_0 \geq 0, \forall h > 0, \forall n \leq N-1, \sup_{i \in \mathbb{Z}} |u_i^{n+1}| \leq (1 + hC_0) \sup_{i \in \mathbb{Z}} |u_i^n|, \\ \exists C_1(h) \geq 0, \text{ non décroissante, } \forall h > 0, \forall I \in \mathbb{Z}, \forall n \leq N-1, \\ \quad \sum_{|i| \leq I} |u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}| \leq (1 + hC_1(h)) \sum_{|i| \leq I+1} |u_{i+1}^n - u_i^n|, \\ \exists C_2(h) \geq 0, \text{ non décroissante, } \forall h > 0, \forall I \in \mathbb{Z}, \forall n \leq N-1, \\ \quad \sum_{|i| \leq I} |u_i^{n+1} - u_i^n| \leq C_2(Ih) \sum_{|i| \leq I+1} |u_{i+1}^n - u_i^n|. \end{array} \right.$$

Alors:
 La famille $\{u_h\}_h$ contient une sous suite $\{u_{h_m}\}_{h_m}$ convergente dans $L^1_{loc}(\mathbb{R} \times]0, T[)$ vers une fonction $u \in L^\infty(\mathbb{R} \times]0, T[)$ telle que:
 $\forall R > 0, \lim_{t \rightarrow 0} \int_{|x| \leq R} |u(x, t) - u_0(x)| dx = 0,$
 $\exists L(R) > 0, \forall (t_1, t_2) \in]0, T[\quad \int_{|x| \leq R} |u(x, t_1) - u(x, t_2)| dx \leq L(R)|t_1 - t_2|.$

VI.3 ETUDE THEORIQUE SUR LE SCHEMA DE RELAXATION

VI.3.1 Préliminaires

Avant de commencer cette section, on va préciser un certain nombre d'hypothèses. Tout d'abord, on suppose que f est C^1 , ce qui permet d'écrire, pour tout $u, v \in \mathbb{R}$:

$$\exists \xi \in \mathbb{R} / f(u) - f(v) = f'(\xi)(u - v).$$

On suppose que la solution initiale u_0 est définie sur un support compact et est bornée, on note $M_0 = \|u_0\|_{L^\infty}$. Enfin, on suppose que la fonction $g(u)$ vérifie $g(0) = 0$ et $\forall u \in \mathbb{R}, ug(u) \geq 0$. Ces hypothèses sur g traduisent que ce terme correspond à un terme de consommation de la variable u ; elles sont nécessaires pour espérer des propriétés de stabilité du schéma (111), et raisonnables pour les problèmes de combustion qui nous intéressent. Nous utilisons par la suite la propriété suivante, conséquence des hypothèses sur g :

$$\forall A \in \mathbb{R}^+, \forall u \in \mathbb{R}, |Au + \sigma hg(u)| \geq |Au|$$

On va maintenant réécrire le schéma de relaxation (111) en remplaçant la différence $f(u_{i+1}^\alpha) - f(u_{i-1}^{\alpha+1})$ par $f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})(u_{i+1}^\alpha - u_{i-1}^{\alpha+1})$. Si on note $M = \max(\|u_{i+1}^\alpha\|_{L^\infty}, \|u_{i-1}^{\alpha+1}\|_{L^\infty})$

alors $|\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}}| \leq M$; compte tenu de ces dernières remarques, le schéma (111) s'écrit:

$$\begin{cases} \forall i \in \mathbf{Z}, \forall \alpha \in \mathbb{N}, \forall \sigma > 0, \\ u_i^{\alpha+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})(u_{i+1}^\alpha - u_{i-1}^{\alpha+1}) + \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha)(u_{i+1}^\alpha - u_i^{\alpha+1}) \\ \quad - \sigma q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha)(u_i^{\alpha+1} - u_{i-1}^{\alpha+1}) - \sigma h g(u_i^{\alpha+1}), \\ u_i^{\alpha=0} = u_i^n. \end{cases} \quad (112)$$

VI.3.2 Stabilité L^∞

Montrons que le schéma (112) vérifie le principe du maximum.

Proposition 1:

$$\begin{cases} \text{On suppose que } u^n \text{ est définie sur un support compact,} \\ \text{et que } \forall i \in \mathbf{Z}, \forall \alpha \in \mathbb{N}, \inf(q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha), q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha)) \geq \frac{1}{2} |f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})|. \\ \text{Alors: } \forall \alpha \in \mathbb{N}, \sup_{i \in \mathbf{Z}} |u_i^\alpha| \leq \sup_{i \in \mathbf{Z}} |u_i^n|. \end{cases} \quad (113)$$

Preuve:

On note $M = \sup_{i \in \mathbf{Z}} |u_i^n|$, et:

$$A_i^\alpha = 1 + \sigma q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha) + \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha)$$

$$B_i^\alpha = \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha) - \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})$$

$$C_i^\alpha = \sigma q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha) + \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})$$

On remarque que $A_i^\alpha = 1 + B_i^\alpha + C_i^\alpha$, $B_i^\alpha \geq 0$, $C_i^\alpha \geq 0$.

Pour montrer que le schéma (112) vérifie le principe du maximum, on effectue pour chaque étape de relaxation α une démonstration par récurrence sur i .

Pour $\alpha = 0$, le schéma (112) s'écrit:

$$A_i^0 u_i^1 + \sigma h g(u_i^1) = u_i^n + B_i^0 u_{i+1}^n + C_i^0 u_{i-1}^n$$

Ce qui donne après majoration, compte tenu des hypothèses faites sur $g(u)$:

$$A_i^0 |u_i^1| \leq |u_i^n| + B_i^0 |u_{i+1}^n| + C_i^0 |u_{i-1}^n|$$

u^n étant défini sur un compact, il existe $i_1 \in \mathbf{Z}$ tel que $\forall i \leq i_1$, $u_i^1 = u_i^n = 0$. On vérifie alors que pour $i \leq i_1 + 1$ on a: $|u_i^1| \leq M$. En supposant que cette dernière relation est vraie pour tout $i \leq i_1 + p$, on montre facilement qu'elle est vraie pour $i \leq i_1 + p + 1$. En conclusion on a démontré:

$$\forall i \in \mathbf{Z}, \sup_i |u_i^1| \leq \sup_j |u_j^n|.$$

L'inégalité est démontrée pour $\alpha = 1$. La récurrence sur α se fait par un procédé identique (récurrence sur i à partir de la solution définie sur un compact à l'étape de relaxation α). La proposition est donc démontrée.

Remarque 4:

Si l'on suppose un balayage des noeuds dans le sens décroissant, cela revient juste dans (112) à intervertir $i + 1$ et $i - 1$. Donc par une démonstration identique, on peut aussi montrer que le schéma construit en alternant sens croissant et sens décroissant préserve le principe du maximum. Simplement, le support compact voit sa taille croître à chaque itération en α .

VI.3.3 Convergence de la suite $\{u_i^\alpha\}^\alpha$

On souhaite montrer que la suite $\{u_i^\alpha\}^\alpha$ définie à partir du schéma de relaxation (112) converge vers une solution $u_i^{\alpha+1}$ de (109), lorsque $\alpha \rightarrow \infty$. Même pour le cas scalaire, la démonstration est assez complexe et on ne pourra conclure, pour le cas général, que sous certaines hypothèses que l'on jugera "raisonnables". Par contre, pour le cas particulier où $q = Cst$ et f et g sont linéaires, la démonstration peut être achevée sans hypothèses supplémentaires. La démonstration repose essentiellement sur le théorème de Bolzano Weierstrass et sur un argument de sous-suite diagonale.

La solution u_i^α à l'étape n étant donnée, le schéma (112) peut se réécrire sous la forme:

$$S(u^\alpha, u^{\alpha+1}) = 0,$$

avec S fonction continue de chacun de ses arguments.

Dans un premier temps, afin de simplifier la démonstration, on va supposer que $i \in \mathbb{N}$ et (artificiellement) que le schéma (112) ne fait pas intervenir de terme en $u^{\alpha+1}$; c'est à dire qu'il s'écrit:

$$S(u_{i-1}^\alpha, u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha) = 0. \quad (114)$$

En utilisant le théorème de Bolzano Weierstrass et la proposition 1, on voit que, $\forall i \in \mathbb{N}$ on peut extraire une sous suite convergente de $\{u_i^\alpha\}^\alpha$. On peut donc définir une suite croissante d'entiers α_k^0 telle que la suite $u_0^{\alpha_k^0}$ converge vers v_0 . On peut ensuite définir une suite croissante d'entiers α_k^1 extraite de α_k^0 telle que la suite $u_1^{\alpha_k^1}$ converge vers une limite v_1 . En procédant de la même façon, on définit pour tout $N \geq 1$ une suite croissante d'entiers α_k^N extraite de α_k^{N-1} telle que:

$$u_N^{\alpha_k^N} \text{ converge vers } v_N$$

Clairement, pour $i \leq N$, la suite d'entiers α_k^N est extraite de la suite α_k^i . Par conséquent, on a construit pour tout N une suite d'entiers α_k^N qui assure la convergence pour les N premiers indices i vers v_i .

$$\forall i \leq N, \lim_{k \rightarrow \infty} u_i^{\alpha_k^N} = v_i$$

Introduisons maintenant la suite diagonale $\beta_k = \alpha_k^k$. Pour tout N , la suite $\{\beta_k\}_k$ est à partir du rang N une suite extraite de α_k^N . Donc, $\forall N, \lim_{k \rightarrow \infty} u_N^{\beta_k} = v_N$. Comme on a:

$$\forall i \in \mathbb{N}, \forall k \geq 0, S(u_{i-1}^{\beta_k}, u_i^{\beta_k}, u_{i+1}^{\beta_k}) = 0,$$

et que S est continue, on en déduit:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} S(u_{i-1}^{\beta_k}, u_i^{\beta_k}, u_{i+1}^{\beta_k}) = S(v_{i-1}, v_i, v_{i+1}) = 0.$$

On souhaite maintenant démontrer que pour tout i fixé, on a $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} u_i^\alpha = v_i$. Ceci sera assuré, par un argument de contradiction classique, si on fait l'hypothèse suivante:

$$\text{La suite des } \{v_i\}_{i \in \mathbb{N}} \text{ vérifiant } S(v_{i-1}, v_i, v_{i+1}) = 0 \text{ est unique.} \tag{115}$$

Il reste à revenir sur les hypothèses u simplifications précédentes. Tout d'abord, la démonstration précédente suppose que $i \in \mathbb{N}$. L'ensemble \mathbf{Z} étant dénombrable, il est facile de voir que les résultats précédents restent valables pour $i \in \mathbf{Z}$. Revenons maintenant sur l'hypothèse irréaliste (114), et considérons le cas où le schéma numérique s'écrit:

$$S(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha, u_i^{\alpha+1}) = 0$$

Par une démarche identique à celle développée plus haut, on sait construire une suite $\{\beta_k\}_k$ telle que:

$$\forall i \in \mathbf{Z}, \lim_{k \rightarrow \infty} u_i^{\beta_k} = v_i, \lim_{k \rightarrow \infty} u_i^{\beta_k+1} = v_i'.$$

Le problème qui apparait ici est le suivant, peut on montrer que $v_i = v_i'$? Ce sera par exemple le cas si on sait que:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} (u_i^{\alpha+1} - u_i^\alpha) = 0, \tag{116}$$

et on aura alors $S(v_{i-1}, v_i, v_{i+1}, v_i) = 0$; en posant $u_i^{n+1} = v_i$, on voit que les u_i^{n+1} satisfont (110).

Dans le cas général, nous n'avons malheureusement pas été en mesure de démontrer la propriété (116) ni bien sûr la propriété (115) (unicité de u^{n+1} vérifiant (110)). Nous devons nous contenter de vérifier ces propriétés dans le cas linéaire:

On suppose donc que le terme source $g(u)$ est linéaire:

$$\exists b \in \mathbb{R}^+ / \forall u, g(u) = b u.$$

On suppose que f est aussi linéaire; enfin, q est supposé constant avec $q \geq \frac{1}{2}|f'|$. Dans ces conditions, le schéma (112) s'écrit:

$$(A + b\sigma h)u_i^{\alpha+1} = u_i^n + B^\alpha u_{i+1}^\alpha + C^\alpha u_{i-1}^{\alpha+1}, \tag{117}$$

avec: $A = 1 + 2q\sigma, B = \sigma(q - \frac{f'}{2}), C = \sigma(q + \frac{f'}{2})$

Vérifions d'abord la propriété 115. Supposons qu'il existe deux solutions (\hat{v}_i) et (\bar{v}_i) de:

$$(A + b\sigma h)v_i = u_i^n + B^\alpha v_{i+1} + C^\alpha v_{i-1}.$$

En notant $w_i = \hat{v}_i - \bar{v}_i$, on a immédiatement:

$$Bw_{i+1} + Cw_{i-1} - (A + b\sigma h)w_i = 0.$$

On a alors $w_i = \gamma r_1^i + \delta r_2^i$, où r_1 et r_2 sont les deux racines du trinôme $f(r) = Br^2 - (A + b\sigma h)r + C = 0$. Mais B et C sont positifs et on voit que $f(0) > 0$ et $f(1) < 0$; donc les deux racines sont réelles et vérifient:

$$0 < r_1 < 1 < r_2.$$

Comme la suite $(w_i)_{i \in \mathbf{Z}}$ est bornée, on a nécessairement $\gamma = \delta = 0$, ce qui démontre l'unicité.

Vérifions enfin la propriété 116. On revient au schéma (117) et on pose:

$$X_i^{\alpha+1} = u_i^{\alpha+1} - u_i^\alpha;$$

il vient:

$$(A + \sigma hb)X_i^{\alpha+1} = BX_{i+1}^\alpha + CX_{i-1}^{\alpha+1}.$$

Posons $M^\alpha = \text{Sup}_i |X_i^\alpha|$, la solution u_i^α étant définie sur un compact, il en est de même pour u_i^α et donc aussi pour $X_i^{\alpha+1}$. Dans ces conditions, en effectuant une double récurrence sur i et sur α (démonstration identique à celle présentée pour le principe du maximum), on montre que:

$$M^{\alpha+1} = \text{Sup}_i |X_i^{\alpha+1}| \leq \frac{B+C}{A+\sigma hb} M^\alpha,$$

et donc: $M^\alpha = \left(\frac{B+C}{A+\sigma hb}\right)^\alpha$ qui tend vers 0 lorsque α tend vers l'infini.

En conclusion, nous n'avons pas pu prouver, dans le cas général, la convergence des itérations de relaxation; mais cette convergence est bien assurée dans le cas linéaire.

VI.3.4 Conservation de la variation totale spatiale

On écrit maintenant le schéma de relaxation (112) sous la forme suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_i^{\alpha+1} = u_i^n + D_i^\alpha (u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha) + E_i^\alpha (u_{i-1}^{\alpha+1} - u_i^{\alpha+1}) - F_i^\alpha g(u_i^{\alpha+1}), \\ \text{avec:} \\ D_i^\alpha = \frac{\sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha) - \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})}{1 + \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha) - \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})}, E_i^\alpha = \frac{\sigma q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha) + \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})}{1 + \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha) - \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})} \\ \text{et:} \\ F_i^\alpha = \frac{\sigma h}{1 + \sigma q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha) - \frac{\sigma}{2} f'(\xi_i^{\alpha+\frac{1}{2}})} \end{array} \right. \quad (118)$$

Il est facile de voir que; pour tout i et pour tout $\alpha: D_i^\alpha \in [0, 1[$; d'autre part, en notant $S = \sigma \sup_{i,\alpha} [q(u_{i-1}^{\alpha+1}, u_i^\alpha), q(u_i^\alpha, u_{i+1}^\alpha)]$, on a $0 \leq E_i^\alpha \leq 2S$.

On veut démontrer dans ce paragraphe la propriété suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall \alpha \in \mathbb{N}, \exists k_1^\alpha / \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^{\alpha+1} - u_i^{\alpha+1}| \leq (1 + hk_1^\alpha) \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n|, \\ \text{avec: } \lim_{\alpha \rightarrow \infty} k_1^\alpha = k_0, k_0 \in \mathbb{R}. \end{array} \right. \quad (119)$$

Malheureusement, pour le cas général où f, g et q sont non linéaires, il n'a pas été possible de conclure. La difficulté est liée au fait que (en théorie) la solution u^{n+1} est obtenue à partir de u^n après une infinité de relaxations; on obtient dans la majoration (même pour g nulle), des termes de la forme $(1 + kh)^\alpha$, qui lorsque $\alpha \rightarrow \infty$ ne sont pas bornés.

On va donc pour cette partie se restreindre à vérifier la propriété (119) dans le cas particulier où f et g sont linéaires (avec $g(u) = bu$) et q constant.

Dans ces conditions $D_i^\alpha = D < 1$ et $E_i^\alpha = E < 2S$. On pose:

$$X_i^\alpha = |u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha| \text{ et } X_i^n = |u_{i+1}^n - u_i^n|$$

On obtient alors (car $1 - D > 0$):

$$(1 + E)X_i^{\alpha+1} \leq (1 + E + Fb)X_i^{\alpha+1} \leq (1 - D)X_i^n + DX_{i+1}^\alpha + EX_{i-1}^{\alpha+1}$$

Quand on somme ces inégalités pour $i \in]-\infty, +\infty[$, les termes en facteur de E s'annulent deux à deux et on obtient la relation de récurrence suivante:

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} X_i^{\alpha+1} \leq (1 - D) \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} X_i^n + D \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} X_i^\alpha.$$

Or $X_i^0 = X_i^n$, et le résultat est immédiat:

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^{\alpha+1} - u_i^{\alpha+1}| \leq \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n|.$$

On a donc prouvé pour le cas linéaire que le schéma de relaxation préserve la variation totale en espace, car après passage à la limite en α on a bien:

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}| \leq \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n|.$$

Pour la suite, on suppose que la relation (119) est aussi vraie pour le cas non linéaire.

VI.3.5 Conservation de la variation temporelle

On veut démontrer une relation analogue à celle de la partie précédente, soit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall \alpha \in \mathbb{N}, \exists k_2^\alpha / \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_i^{\alpha+1} - u_i^\alpha| \leq k_2^\alpha \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha|, \\ \text{avec:} \\ \lim_{\alpha \rightarrow \infty} k_2^\alpha = k_3, \quad k_3 \in \mathbb{R} \end{array} \right.$$

Il est clair que cette propriété ne peut pas être vérifiée si g est non nulle (considérer le cas où u_i^α est constant!). On suppose donc dans ce paragraphe que g est nulle.

On reprend l'écriture (118) pour le schéma de relaxation. On s'intéresse à des petits pas de temps, il est donc possible de supposer que $\forall \alpha \in \mathbb{N}, hk_1^\alpha < 1$. En conséquence, la relation (119) étant supposée vérifiée, on a:

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^{\alpha+1} - u_i^{\alpha+1}| \leq 2 \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha|. \quad (120)$$

On pose maintenant: $X_i^\alpha = u_i^\alpha - u_i^\alpha$ et $X_i^\alpha = u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha$, et on remplace dans (118) $u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha$ par $u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha + u_i^\alpha - u_i^\alpha$. On obtient alors:

$$X_i^{\alpha+1} = D_i^\alpha X_i^\alpha + D_i^\alpha (u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha) + E_i^\alpha (u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha)$$

Notons $D = \sup_{i,\alpha} D_i^\alpha$ et $E = \sup_{i,\alpha} E_i^\alpha \leq 2S$; on suppose que l'on a l'inégalité stricte $D < 1$. La relation précédente s'écrit alors après majoration et sommation sur $i \in \mathbb{Z}$ (compte tenu de la relation (120)):

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |X_i^{\alpha+1}| \leq D \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |X_i^\alpha| + 2(D+E) \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |X_i^\alpha|.$$

La relation de récurrence ainsi définie donne:

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |X_i^{\alpha+1}| \leq 2(D+E)(1 + D + \dots + D^\alpha) \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |X_i^\alpha|.$$

Puisque $D < 1$, cette suite est convergente et à la limite on obtient:

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_i^{\alpha+1} - u_i^\alpha| \leq \frac{2(D+2S)}{1-D} \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |u_{i+1}^\alpha - u_i^\alpha|$$

Et donc, sous les hypothèses précédentes, le schéma de relaxation préserve la variation totale en temps.

VI.3.6 Conclusion partielle

Le but de ce qui a été fait jusqu'à présent est de se placer dans le cadre des hypothèses du théorème de compacité (théorème 4), afin de prouver l'existence d'une sous-suite convergente vers une fonction u . En fait on ne se trouve pas tout à fait dans le cadre de ce théorème puisque les estimations TVD précédentes portent non pas sur une somme finie de termes (comme les estimations du Théorème 4), mais sur une somme infinie. Cela provient du type de schéma que nous étudions pour lequel le passage de l'étape de relaxation α à l'étape de relaxation $\alpha + 1$ est tel que la solution $u_i^{\alpha+1}$ n'est plus définie a priori sur un compact. Le théorème 4 est donc trop restrictif pour le schéma de relaxation considéré, et ne peut être utilisé tel quel. Néanmoins les estimations TVD précédentes (dont certaines n'ont pu être établies que dans le cas linéaire) montrent que cette classe de schémas implicites possède de bonnes propriétés.

De plus si l'on suppose que les conclusions du théorème 4 sont vraies (existence d'une sous suite convergente vers une fonction u), alors on peut montrer pour le cas $q = Cste$ avec g nulle que la limite u est solution faible de (108) et qu'en plus elle est entropique au sens de Kruskov. Le détail de ces démonstrations est présenté en annexe à la fin de ce chapitre.

VI.3.7 Stabilité L^2 dans le cas linéaire

Pour en finir avec les objectifs fixés, il ne reste plus qu'à montrer que le schéma implicite de relaxation est inconditionnellement stable. Pour cela, on considère le schéma dans ce cas linéaire qui s'écrit pour un balayage des noeuds dans le sens croissant:

$$\begin{cases} Au_i^{\alpha+1} = u_i^\alpha + Bu_{i+1}^\alpha + Cu_{i-1}^{\alpha+1}, \\ \text{avec} \\ A = 1 + 2q\sigma, B = \sigma(q - \frac{1}{2}f'), C = \sigma(q + \frac{1}{2}f'), \\ \text{et} \\ A = 1 + B + C, \frac{B}{A} < 1, \frac{C}{A} < 1. \end{cases} \quad (121)$$

L'étude de stabilité est faite au moyen d'une analyse de Fourier. Notons u_j^α les modes de Fourier de la forme:

$$u_j^\alpha = \exp(ij\xi_k), \quad \text{où } \xi_k = \frac{2k\pi}{N+1}, \quad i^2 = -1;$$

$N + 1$ représente le nombre de points du maillage.

On note $g_k(\alpha)$ le module d'amplification reliant l'état α à l'état $\alpha + 1$, qui vérifie:

$$u_j^{\alpha+1} = g_k(\alpha)u_j^\alpha,$$

et $G_k(\alpha)$ le module d'amplification du schéma (121) reliant u^α à u^n :

$$u_j^\alpha = G_k(\alpha)u_j^n.$$

Le schéma (121) sera stable si le critère de von Neuman est vérifié, à savoir:

$$\max_{k \in [0, N]} |G_k(\alpha)| \leq 1.$$

Remarque 5:

Si on note $G_k(\Delta t)$ le module d'amplification reliant u_j^n à u_j^{n+1} , on a la relation suivante:

$$G_k(\Delta t) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} G_k(\alpha) = \prod_{\alpha=0, \infty} g_k(\alpha),$$

et donc si pour chaque relaxation le critère de von Neumann est vérifié, il le sera aussi pour l'équation en u^n et u^{n+1} .

Proposition 2:

Le schéma de relaxation (121) donnant $u_j^{\alpha+1}$ est inconditionnellement stable.

Preuve:

Le module d'amplification $G_k(\alpha)$ est défini par la relation de récurrence suivante:

$$\begin{cases} \forall \alpha \geq 1, G_k(\alpha) = L_k + M_k G_k(\alpha - 1), \\ L_k = \frac{1}{A - C \exp(-i\xi_k)}, M_k = \frac{B \exp(i\xi_k)}{A - C \exp(-i\xi_k)}, \\ G_k(0) = 1. \end{cases}$$

A partir de cette relation, on peut exprimer simplement $G_k(\alpha)$ en fonction de la condition initiale et de α , il vient :

$$G_k(\alpha) = L_k(1 + M_k + \dots + (M_k)^{\alpha-1}) + (M_k)^\alpha$$

On peut alors majorer le module G_k en remarquant que:

$$\forall k, |L_k| \leq |L_0| = \frac{1}{1+B} \text{ et } |M_k| \leq |M_0| = \frac{B}{1+B}$$

La majoration devient:

$$|G_k(\alpha)| \leq \frac{1}{1+B} [1 + \frac{B}{1+B} + \dots + (\frac{B}{1+B})^{\alpha-1}] + (\frac{B}{1+B})^\alpha,$$

d'où on déduit:

$$\forall \alpha, |G_k(\alpha)| \leq 1.$$

Le schéma est donc inconditionnellement stable.

Remarque 6:

Il n'est absolument pas prouvé que $|g_k(\alpha)|$ soit inférieur à 1. Cependant, pour le cas

particulier des grands pas de temps (i.e. dans la limite $\sigma \rightarrow \infty$), le module d'amplification $g_k(\alpha)$ (qui ne dépend alors plus de α) reliant u_j^α à $u_j^{\alpha+1}$ s'écrit:

$$g_k = \frac{(q - \frac{f'}{2}) \exp(i\xi_k)}{2q - (q - \frac{f'}{2}) \exp(-i\xi_k)},$$

et on montre alors simplement que $|g_k| \leq 1$.

Remarque 7: Intérêt des deux balayages.

Plaçons nous dans le cas particulier des grands pas de temps, et considérons le module d'amplification du schéma de relaxation pour $\xi_k = \pi$ (fréquence qui minimise g_k). Alors, le module g_π s'écrit:

$$g_\pi = \frac{q - \frac{f'}{2}}{3q + \frac{f'}{2}}$$

On constate que lorsque la convection est positive (i.e. $f' > 0$) le module d'amplification du schéma est plus petit que celui obtenu pour une convection négative (i.e. $f' < 0$). C'est à dire que le module d'amplification du schéma de relaxation est minimum lorsque la convection se fait dans le sens de balayage des noeuds. Dans le cas général, on ne connaît pas a priori le sens de convection, il est donc nécessaire pour accroître la convergence d'effectuer un balayage dans les deux sens (il est facile de voir que la majoration précédente de G_k s'étend aisément au double balayage du fait de la symétrie du schéma de relaxation).

VI.4 ETUDE DE LA CONVERGENCE SUR UNE EQUATION MODELE

L'efficacité du schéma implicite présenté sera déterminée par la convergence de la phase de relaxation donnant $u^{\alpha+1}$ à partir de u^α . L'étude de cette convergence sur les équations d'Euler est techniquement très difficile du fait de la non linéarité. De plus on souhaite par cette classe de schémas implicites résoudre des systèmes faisant intervenir non seulement la convection, mais aussi la diffusion et le terme source en vue de traiter des problèmes de combustion. On se propose donc dans cette partie d'étudier la convergence sur une équation scalaire linéaire contenant ces différents termes, et de voir dans quelle mesure il est possible d'améliorer cette convergence. L'accélération de la convergence sera réalisée en utilisant un paramètre de sous ou sur-relaxation par analogie avec ce qui est fait pour les systèmes linéaires matriciels.

L'équation modèle considérée est donc:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - bu, \tag{122}$$

où a, b et c sont des constantes positives.

Pour étudier la convergence du schéma de relaxation, on peut effectuer une analyse par Fourier. On détermine alors le module d'amplification du schéma en fonction du paramètre de sous- ou sur-relaxation noté par la suite ω , le problème consiste alors à déterminer la valeur de ω qui minimise ce module d'amplification. Ce procédé est particulièrement bien adapté aux problèmes périodiques.

Si par contre on considère un problème avec des conditions aux limites de type Dirichlet, la résolution de (122) par le schéma de relaxation se ramène alors à la résolution d'un système matriciel suivant un algorithme de Gauss-Seidel pour lequel on a, sous certaines conditions que nous précisons ci-dessous, des résultats de convergence (voir [70]). Lorsque cela sera possible, nous choisirons ce deuxième procédé qui est plus proche des problèmes que nous devons résoudre.

Soit à résoudre le système matriciel $MX = b$, avec $M = m(i, j)$ une matrice inversible de rang n . On décompose par point la matrice M , $M = D - E - F$ où D, E et F sont les matrices définies par:

$$\begin{aligned}(D)_{ij} &= m(i, j)\delta_{ij}, \\ (-E)_{ij} &= m(i, j) \text{ si } i > j, 0 \text{ sinon,} \\ (-F)_{ij} &= m(i, j) \text{ si } i < j, 0 \text{ sinon.}\end{aligned}$$

La résolution de ce système par une méthode itérative nous amène à considérer trois algorithmes.

L'algorithme de Jacobi s'écrit:

$$DX_{k+1} = (E + F)X_k + b,$$

celui de Gauss-Seidel par:

$$(D - E)X_{k+1} = FX_k + b, \text{ ou } (D - F)X_{k+1} = EX_k + b,$$

selon le sens de balayage et enfin l'algorithme de Gauss-Seidel sous- ou sur-relaxé ($\omega \neq 0$):

$$\left(\frac{D}{\omega} - E\right)X_{k+1} = \left(\frac{1-\omega}{\omega}D + F\right)X_k + b, \text{ ou } \left(\frac{D}{\omega} - F\right)X_{k+1} = \left(\frac{1-\omega}{\omega}D + E\right)X_k + b$$

On a alors les résultats suivants:

-Si la matrice M est hermitienne définie positive alors la méthode de relaxation converge si $0 < \omega < 2$

-Si la matrice M est hermitienne définie positive et tridiagonale, alors le paramètre ω qui optimise la convergence est:

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - (\rho(J))^2}},$$

avec $\rho(J)$ le rayon spectral de la méthode de Jacobi (i.e. le rayon spectral de la matrice $D^{-1}(E + F)$).

VI.4.1 Convection

L'équation correspondante s'écrit:

$$u_t + cu_x = 0$$

Notons ω le paramètre contrôlant la convergence, le schéma de relaxation donnant $u^{\alpha+1}$ s'écrit (on suppose un balayage dans le sens croissant des noeuds car $c > 0$, et on utilise une approximation décentrée):

$$\hat{u}_j^{\alpha+1} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{h} (\hat{u}_j^{\alpha+1} - u_{j-1}^{\alpha+1})$$

$$u_j^{\alpha+1} = \omega \hat{u}_j^{\alpha+1} + (1 - \omega) u_j^\alpha$$

Cette discrétisation rentre bien dans le cadre de l'étude théorique précédente, elle correspond au cas $\omega = 1$, $f' = c$ et $q = \frac{1}{2}f'$.

Un calcul direct (matriciel ou par Fourier) montre que la convergence est optimale pour $\omega = 1$. Cela signifie qu'aucune amélioration par cette technique de sous- ou sur-relaxation n'est à espérer pour la convection.

On pose $\nu = c \frac{\Delta t}{h}$, le schéma peut alors se réécrire:

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

Il est immédiat que ce schéma respecte la positivité si $\omega \leq 1$.

VI.4.2 Diffusion

L'équation considérée s'écrit:

$$u_t = au_{xx}$$

De même que pour la partie précédente, on écrit le schéma de relaxation en tenant compte du paramètre ω contrôlant la convergence :

$$\hat{u}_j^{\alpha+1} = u_j^n + a \frac{\Delta t}{h^2} (u_{j-1}^{\alpha+1} - 2\hat{u}_j^{\alpha+1} + u_{j+1}^\alpha)$$

$$u_j^{\alpha+1} = \omega \hat{u}_j^{\alpha+1} + (1 - \omega) u_j^\alpha$$

On pose $\mu = a \frac{\Delta t}{h^2}$. La matrice $J = D^{-1}(E + F)$ de l'algorithme de Jacobi correspondant à ce schéma relaxé est symétrique et tridiagonale, $J = \frac{\mu}{1 + 2\mu}(1, 0, 1)$; on peut donc appliquer

le résultat de convergence présenté ci-dessus. Un calcul simple de valeur propre montre alors que la convergence est optimale pour:

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - (\rho(J))^2}}, \text{ avec } \rho(J) = \frac{2\mu}{1 + 2\mu} \cos\left(\frac{\pi}{N}\right),$$

ou N représente le nombre de points de la discrétisation.

Pour mieux comprendre ce phénomène d'accélération de la convergence, on réalise l'étude précédente par Fourier. Les notations sont les mêmes que celles définies pour l'étude de stabilité.

Le module d'amplification s'écrit alors:

$$g_k(\alpha + 1) = \frac{(1 + 2\mu)(1 - \omega)G_k(\alpha) + \omega(1 + \mu G_k(\alpha)\exp(i\xi_k))}{G_k(\alpha)(1 + 2\mu - \omega\mu\exp(-i\xi_k))}.$$

Pour les grands pas de temps, $\mu \rightarrow \infty$, il vient:

$$g_k \rightarrow \frac{2(1 - \omega) + \omega\exp(i\xi_k)}{2 - \omega\exp(-i\xi_k)}.$$

On exclut le mode $k = 0$ (qui correspond à un état constant). Dans ces conditions, le maximum du module d'amplification est obtenu pour $k = 1$. Le paramètre ω_k minimisant le module d'amplification g_k (qui ne dépend plus de α) est solution de l'équation suivante:

$$(2\cos\xi_k - 1)\omega_k^2 - 4\omega_k + 4 = 0.$$

Des deux solutions de cette équation, on ne garde que celle qui appartient à l'intervalle $[0, 2]$. On obtient directement la solution:

$$\omega_k^{opt} = \frac{2}{1 + 2\sin\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)}.$$

On constate que $\forall k$, $\omega_k^{opt} \in \left[\frac{2}{3}, 2\right]$. Dans la pratique, les solutions ne sont pas décomposées suivant les modes propres; on choisit alors ω de façon à améliorer la convergence sur les basses fréquences. Soit:

$$\omega = \frac{2}{1 + 2\sin\left(\frac{\pi}{N+1}\right)}.$$

On a représenté figure VI.1 le tracé du module d'amplification en fonction de la fréquence pour différentes valeurs de ω . La sur-relaxation a pour effet de remplacer la tangente horizontale (pour $k \rightarrow 0$) par une tangente de pente négative. On constate que l'amélioration sur les basses fréquences se fait au détriment des hautes fréquences.

Remarque 8:

Pour le cas particulier des grand pas de temps, cette valeur de ω est légèrement plus

petite que celle obtenue par l'analyse matricielle (pour $N = 101$ points, $\omega_{opt} = 1.88$ alors que l'analyse matricielle donne $\omega_{opt} = 1.94$). En fait on ne résout pas le même problème puisque l'analyse de Fourier suppose un problème périodique.

Remarque 9:

De même que pour la convection, il est possible d'effectuer pour la diffusion un double balayage par point (sens croissant puis sens décroissant). En fait pour $\omega = 1$ ce procédé n'améliore pas la convergence; par contre pour $\omega \neq 1$ il a tendance à détériorer la vitesse de convergence. Ce double balayage réduit la valeur observée de ω_{opt} (du moins pour l'équation $u_{xx} = 0$) et la valeur obtenue concorde avec celle de l'analyse de Fourier (analyse qui fournit la même valeur que pour un simple balayage). Une analyse matricielle identique n'est plus réalisable.

Remarque 10:

En ce qui concerne la positivité, une étude similaire à ce qui a été fait pour la convection montre que la positivité est respectée si $\omega \leq 1$. En fait dans la pratique, pour des solutions suffisamment régulières, il est possible de sur-relaxer la solution sans pour autant perdre la positivité.

Il est donc possible pour la diffusion de réduire considérablement les temps de calcul par utilisation d'un paramètre de sur-relaxation. L'étude théorique réalisée, bien que très simplifiée, permet d'avoir un ordre de grandeur du paramètre optimal. Cependant, ce paramètre optimal ne permet pas a priori de vérifier le principe du maximum, en conséquence cette amélioration ne pourra s'effectuer que pour certains cas particuliers.

VI.4.3 Terme source

L'équation considérée s'écrit:

$$u_t = -bu.$$

Le schéma de relaxation s'écrit:

$$\hat{u}_j^{\alpha+1} = u_j^\alpha - b\Delta t \hat{u}_j^{\alpha+1},$$

$$u_j^{\alpha+1} = \omega \hat{u}_j^{\alpha+1} + (1 - \omega)u_j^\alpha.$$

Le résultat est immédiat, le minimum de g_k vérifiant la positivité sera obtenu pour $\omega = 1$.

VI.4.4 Convection-diffusion

Pour un système plus général comportant des termes convectif et diffusif; on peut discrétiser le terme convectif soit par une dérivée décentrée suivant le signe de c , soit par une dérivée centrée.

On souhaite alors déterminer quelle est la discrétisation la plus avantageuse. Etant donné que

la matrice M n'est pas symétrique on choisit de faire l'étude de la convergence par analyse de Fourier. On considère l'équation (avec c et a positifs):

$$u_t + cu_x = au_{xx}.$$

Pour les grands pas de temps ($\Delta t \rightarrow +\infty$), le schéma de relaxation s'écrit (pour un balayage dans le sens croissant):

Convection centrée

$$u_i^{\alpha+1} = \frac{\omega}{2} \left[\left(1 - \frac{ch}{2a}\right) u_{i+1}^\alpha + \left(1 + \frac{ch}{2a}\right) u_{i-1}^\alpha \right] + (1 - \omega) u_i^\alpha.$$

Convection décentrée

$$u_i^{\alpha+1} = \frac{\omega}{2a + ch} \left[au_{i+1}^\alpha + (a + ch) u_{i-1}^\alpha \right] + (1 - \omega) u_i^\alpha.$$

Posons $\beta = \frac{ch}{2a}$ le Reynolds de maille, les modules d'amplification g_k^c et g_k^d de ces deux schémas s'écrivent:

$$g_k^c = \frac{1 - \omega + \frac{\omega}{2}(1 - \beta)\exp(i\xi_k)}{1 - \frac{\omega}{2}(1 + \beta)\exp(-i\xi_k)},$$

$$g_k^d = \frac{1 - \omega + \frac{\omega}{2(\beta + 1)}\exp(i\xi_k)}{1 - \frac{\omega(2\beta + 1)}{2(1 + \beta)}\exp(-i\xi_k)}.$$

On vérifie aisément que pour $\omega = 1$, la stabilité est inconditionnelle quelque soit le schéma utilisé. Mais on constate que l'utilisation du schéma centré ne peut se faire que si $\beta < 1$ (en effet si $\beta > 1$ le principe du maximum et donc la positivité ne sont pas vérifiés même pour $\omega < 1$).

Remarque 11:

Le passage de g_k^d à g_k^c se faisant très simplement par la transformation:

$$\beta_d = \frac{\beta_c}{1 - \beta_c}, \text{ ou } \beta_c = \frac{\beta_d}{1 + \beta_d},$$

on choisit donc de n'étudier que le cas centré avec $\beta_c \in [0, 1]$ ($\beta_d \in [0, \infty[$).

On a représenté figure VI.2 le tracé de g_k^c en fonction de la fréquence pour différentes valeurs de β_c et pour $\omega = 1$. Le nombre de points est $I = 101$.

On constate que le module d'amplification décroît lorsque β croît quelque soit la fréquence. Or $\beta_d \geq \beta_c$. Donc à β fixé et si $\beta < 1$, le schéma centré donnera la meilleure convergence pour la phase de relaxation. En d'autres termes, lorsque le pas h du maillage est suffisamment

petit pour que l'approximation centrée soit stable, celle ci converge plus rapidement que l'approximation décentrée.

De même que dans les études précédentes, la plus basse fréquence est celle qui est la moins amortie. Le paramètre de relaxation ω_{opt} qui minimise g_k^c est solution de l'équation suivante:

$$[((1 + \beta)^2 + 2\cos(\xi_k)(\beta^2 - 1))\omega^2 + 4(1 - \beta)\omega - 4][(1 + \beta)^2\omega^2 - 4\cos(\xi_k)(1 + \beta)\omega + 4] = 0$$

En fait le deuxième facteur ne comporte que des racines complexes, donc ω_{opt} est donnée simplement par la racine comprise entre 0 et 2 de:

$$((1 + \beta)^2 + 2\cos(\xi_k)(\beta^2 - 1))\omega^2 + 4(1 - \beta)\omega - 4.$$

Pour $\beta = 0$, on retrouve l'équation correspondant à la diffusion pure établie précédemment. Intéressons nous plus particulièrement à la solution basse fréquence, si l'on suppose que le nombre de points N est grand (i.e $\cos(\xi_1) \simeq 1$) on obtient pour ω_{opt} :

$$\omega_{opt} = \frac{2}{\beta + 1}.$$

Alors $\omega_{opt}(\beta = 0) = 2$ et $\omega_{opt}(\beta = 1) = 1$.

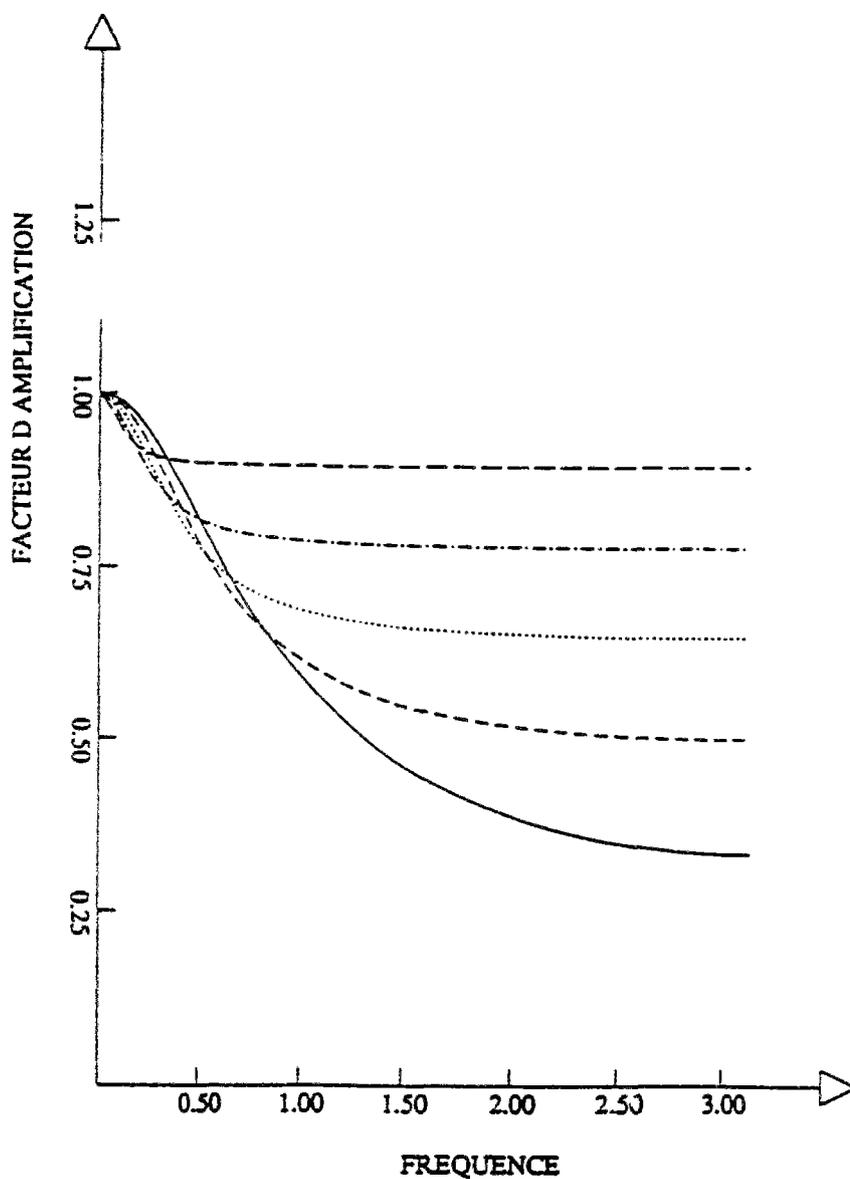
VI.4.5 Conclusion

Pour le système complet comportant la convection, la diffusion et le terme source, la possibilité de sur-relaxer pour améliorer la convergence sera inhibée, pour certains cas, par le non respect de la positivité engendré par cette méthode de sur-relaxation. Dans ces conditions la diffusion ralentira la convergence. On a pu établir par ailleurs que lorsque $\beta < 1$, il est plus intéressant de discrétiser le terme convectif par une dérivée centrée. On a ainsi une accélération de la convergence.

Pour les cas particuliers où la positivité n'a qu'une importance relative ou plus simplement pour les cas où la sur-relaxation est réalisable, il est possible de déterminer le paramètre optimal assurant une accélération de la convergence. La détermination de ce paramètre peut dans tous les cas être réalisée par analyse de Fourier. Cependant, lorsque cela est possible, on préfère le déterminer par l'analyse matricielle; en effet cette dernière donne de meilleurs résultats puisqu'elle se rapproche plus des conditions réelles. Par exemple pour un système ne comportant que les termes de diffusion et le terme source, la matrice M est symétrique, et on obtient pour les grands pas de temps:

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2}}, \text{ avec } \rho = \frac{2a}{2a + bh^2} \cos\left(\frac{\pi}{N}\right)$$

On constate que la présence du terme source diminue aussi la valeur optimale du paramètre paramètre de sur-relaxation.



— $\omega = 1.0$ - · - · - $\omega = 1.6$
- - - $\omega = 1.2$ - - - $\omega = 1.8$
· · · · $\omega = 1.4$

Figure VI.1 : Module d'amplification $g_k(\omega)$ pour la diffusion en fonction de la fréquence pour différents paramètres de relaxation ω

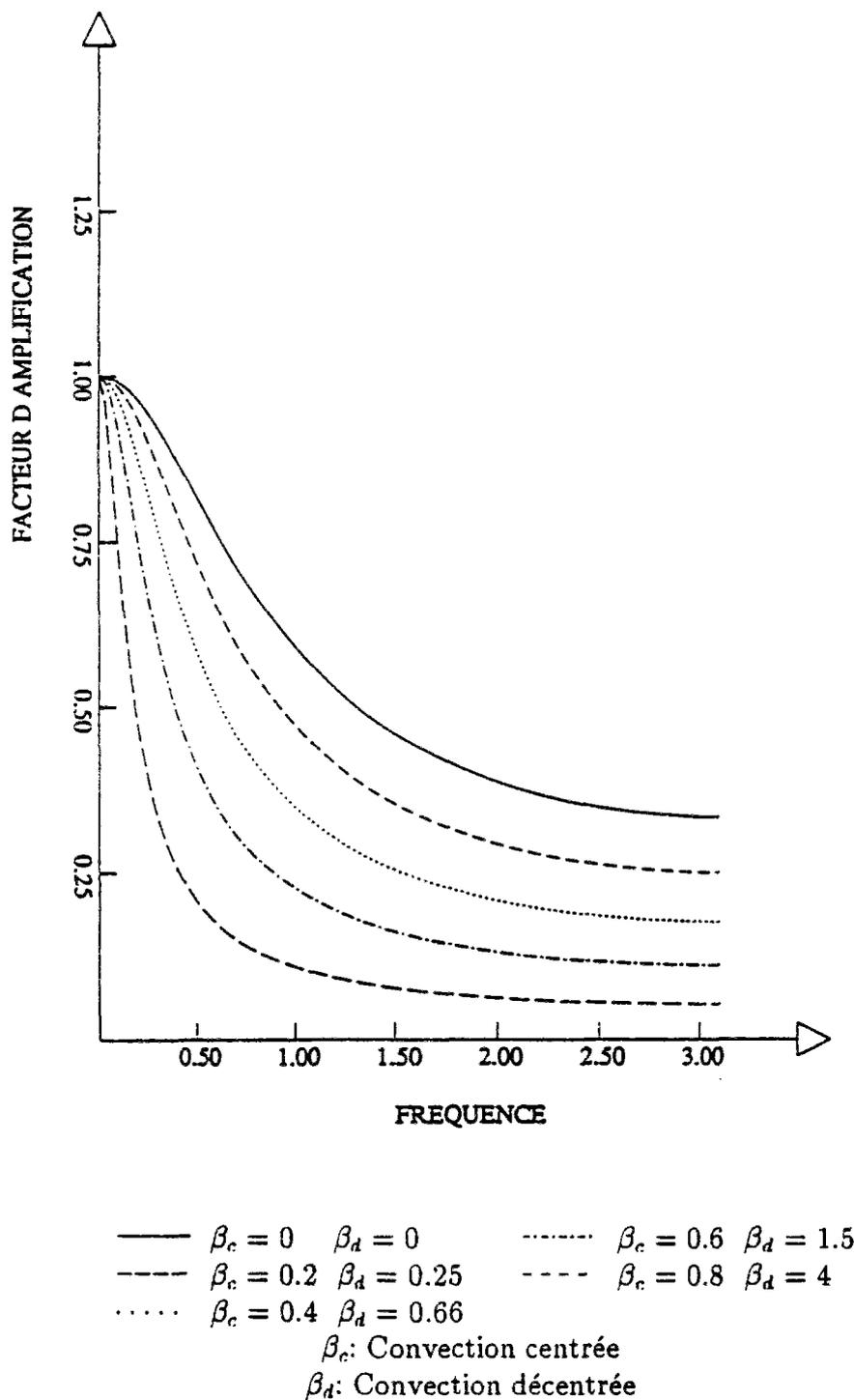


Figure VI.2 : Facteur d'amplification pour l'équation $cu_x = au_{xx}$, $\beta = \frac{ch}{2a}$ en fonction de la fréquence pour différentes valeurs de β (maillage à 101 points)

VI.5 RESULTATS NUMERIQUES SUR UN PROBLEME STATIONNAIRE

On souhaite dans cette section étudier sur un problème stationnaire monodimensionnel le comportement du schéma de relaxation et voir ainsi dans quelles mesures ce schéma peut être intéressant pour la recherche de la solution stationnaire d'un problème bidimensionnel (on présente au chapitre suivant une étude utilisant ce schéma pour des problèmes instationnaires).

Le modèle mathématique utilisé est le modèle isobare monodimensionnel de la théorie de la combustion auquel on ajoute un terme de convection pour rendre le phénomène stationnaire dans un domaine borné (B.Larrouturou [39]).

VI.5.1 Equations monodimensionnelles

Le système que l'on résout ne comporte comme variable que la température (T) et la fraction massique du réactant (Y). Il s'écrit:

$$\begin{cases} T_t = T_{xx} + \Omega(T, Y) + V(t)T_x, \\ Y_t = \frac{Y_{xx}}{Le} - \Omega(T, Y) + V(t)Y_x, \end{cases} \quad (124)$$

$\Omega(T, Y)$ est le taux de réaction et Le le nombre de Lewis, rapport des diffusivités thermiques et moléculaires. La loi d'Arrhénius et la loi d'action de masse donnent pour le taux de réaction normalisé (voir [39,53]):

$$\Omega(T, Y) = \frac{\beta^2}{2Le} Y \exp\left(\frac{-\beta(1-T)}{1-\delta(1-T)}\right),$$

β est l'énergie d'activation réduite et δ le rapport entre l'élévation de température due à la réaction et la température des gaz brûlés. On suppose de plus que Le , β et δ sont constants. Pour rendre ce problème stationnaire, le terme de convection $V(t)$ (qui correspond en fait à la vitesse de flamme) ajouté dans les équations est calculé de façon à conserver l'énergie thermique dans le domaine de calcul. Notons X_0 et X_I les bornes du domaine, on obtient alors [39]:

$$V(t) = \frac{-\int_{X_0}^{X_I} \Omega(T, Y)(t)dt + T_x(X_0) - T_x(X_I)}{T(X_I) - T(X_0)}. \quad (125)$$

Pour résoudre le système (124), il reste encore à préciser les conditions aux limites et initiales. En X_0 (frontière froide) on impose des conditions du type Dirichlet:

$$T(X_0) = 0, \quad Y(X_0) = 1,$$

et en X_I (frontière chaude) des conditions du type Neumann:

$$T_x(X_I) = Y_x(X_I) = 0.$$

On prend pour les conditions initiales un état constant pour la température et la fraction massique de part et d'autre de $x_0 \in [X_0, X_1]$:

$$\text{pour } x < x_0 \quad T(t = 0) = 0, Y(t = 0) = 1,$$

$$\text{pour } x \geq x_0 \quad T(t = 0) = 1, Y(t = 0) = 0.$$

VI.5.2 Schéma numérique

On se propose de résoudre le système précédent en utilisant le schéma implicite de relaxation non linéaire. Pour simplifier l'écriture, on suppose que le nombre de Lewis vaut 1, dans ces conditions on a une relation simple reliant la température T à la fraction massique Y :

$$Y + T = 1.$$

On discrétise l'équation de température en supposant un maillage régulier de pas $h = X_{i+1} - X_i$. Le rapport $\frac{ch}{2a}$ est ici de l'ordre de grandeur de h , on choisit donc compte tenu des résultats issus de la section précédente (étude de la convergence sur l'équation modèle) de discrétiser le terme convectif par une dérivée centrée. Le système totalement implicite s'écrit en tenant compte des conditions limites:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_0^{n+1} = 0 \\ \forall i \in [1, I - 1] \\ T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\Delta t}{h^2}(T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}) + \Delta t \Omega(T_i^{n+1}) \\ \quad + \frac{\Delta t}{2h} V(t^{n+1})(T_{i+1}^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}) \\ T_I^{n+1} = T_I^n + \frac{\Delta t}{h^2}(T_{I-1}^{n+1} - T_I^{n+1}) + \Delta t \Omega(T_I^{n+1}) \\ \quad + \frac{\Delta t}{h} V(t^{n+1})(T_I^{n+1} - T_{I-1}^{n+1}) \end{array} \right.$$

La conservation discrète de l'énergie thermique sur le domaine de calcul se traduit par:

$$\frac{h}{2}(T_0^{n+1} + T_I^{n+1}) + \sum_{i=1}^{I-1} T_i^{n+1} h = Cste$$

On obtient alors pour la vitesse $V(t^{n+1})$:

$$V(t^{n+1}) = \frac{-\frac{h}{2}(\Omega(T_0^{n+1}) + \Omega(T_I^{n+1})) - \sum_{i=1}^{i=I-1} \Omega(T_i^{n+1})h + \frac{T_1^{n+1}}{h}}{T_I^{n+1} - \frac{T_1^{n+1}}{2}}.$$

Cette relation est la traduction discrète de (125), compte tenues des conditions limites utilisées.

Le schéma de relaxation, écrit en supposant un balayage dans le sens croissant des noeuds s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} i = 0 : \\ T_0^{\alpha+1} = 0, \\ \\ \forall i \in [1, I-1] : \\ T_i^{\alpha+1} = T_i^{\alpha} + \frac{\Delta t}{h^2}(T_{i-1}^{\alpha+1} - 2T_i^{\alpha+1} + T_{i+1}^{\alpha}) + \Delta t \Omega(T_i^{\alpha+1}) \\ \quad + \frac{\Delta t}{2h} V(t^{\alpha})(T_{i+1}^{\alpha} - T_{i-1}^{\alpha}), \\ \\ i = I : \\ T_I^{\alpha+1} = T_I^{\alpha} + \frac{\Delta t}{h^2}(T_{I-1}^{\alpha+1} - T_I^{\alpha+1}) + \Delta t \Omega(T_I^{\alpha+1}) \\ \quad + \frac{\Delta t}{h} V(t^{\alpha})(T_I^{\alpha+1} - T_{I-1}^{\alpha+1}), \\ \\ \text{avec: } T_i^{\alpha=0} = T_i^{\alpha}, \end{array} \right.$$

$$V(t^{\alpha}) = \frac{-\frac{h}{2}(\Omega(T_0^{\alpha+1}) + \Omega(T_I^{\alpha})) + \sum_{i=1}^{i=I-1} \Omega(T_i^{\alpha})h + T_1^{\alpha}h}{T_I^{\alpha} - \frac{T_1^{\alpha}}{2}},$$

la vitesse $V(t^{\alpha})$ est calculée à chaque étape de relaxation. Le terme source étant non linéaire, le système est résolu pour chaque point i par une méthode de Newton. Pour ce problème particulier, une seule itération de Newton s'est avérée suffisante (la présence du terme convectif stationnarise rapidement la solution).

VI.5.3 Résultats numériques

On choisit pour présenter les résultats numériques:

$$Le = 1, \quad \beta = 2, \quad \delta = 0.84, \quad X_0 = -15, \quad X_I = 20, \quad x_0 = 0 \quad \text{et} \quad I = 140.$$

Compte tenu de ces valeurs, le pas spatial vaut $h = 0.25$.

L'initialisation ainsi que la solution obtenue par un schéma totalement explicite sont présentées figure VI.3. Le nombre de Zeldovich β étant petit, on ne retrouve pas dans la zone de réaction les caractéristiques classiques d'une flamme (dérivée seconde de la température importante). La vitesse de flamme vaut: $V_f = 0.7460375$

La courbe de convergence figure VI.4 met en évidence l'impossibilité pour ce type de problème (pseudo-stationnaire) d'obtenir une solution parfaitement convergée. Le plateau de convergence qui apparaît est dû aux conditions limites.

Pour cette étude, on a obtenu des temps de calcul minima lorsque la solution est obtenue en une itération temporelle. Ceci est dû au fait que le problème que l'on considère est peu complexe (ce que confirment les courbes de convergence des schémas explicites).

Etant donnée la présence du terme convectif dans le système à résoudre, on choisit pour améliorer la convergence d'effectuer un double balayage dans le sens croissant puis dans le sens décroissant des noeuds.

On a représenté figure VI.5 la convergence de la phase de relaxation pour la solution obtenue en une itération temporelle en fonction du paramètre de sur-relaxation ω . Conformément à l'étude de convergence, on constate que l'utilisation d'une procédure de sur-relaxation accroît considérablement la convergence. En prenant les résultats établis dans la section précédente, et en ne considérant que les terme convectif et diffusif, on obtient (pour un grand nombre de points) $\omega_{opt} = 1.8$. Si par contre on ne considère que le terme diffusif et le terme source, en posant $b = \frac{\beta^2}{2Le}$, le résultat matricielle donne $\omega_{opt} = 1.5$. La valeur optimale observée numériquement ($\omega_{opt} = 1.45$) est tout à fait conforme aux résultats théoriques. Etant donnée la faible valeur de β , il n'est pas surprenant de trouver numériquement une valeur très proche de celle fournie pour un système réaction-diffusion.

Pour un résidu de 10^{-6} , le gain en temps de calcul (avec un code non vectorisé) par rapport au schéma explicite est alors voisin de 5. Pour un paramètre de relaxation $\omega = 1$, les temps sont comparables.

VI.5.4 Conclusion

Il ressort de cette étude, que le comportement du schéma implicite par relaxation non linéaire pour ce problème stationnaire permet d'avoir un gain voisin de 5 par rapport au schéma explicite. De plus les solutions obtenues sont de très bonne qualité. On a pu, par ailleurs, confirmer les résultats théoriques concernant la possibilité d'accroître la convergence par des méthodes de sur-relaxation. Pour les problèmes spécifiques liés à la combustion, les équations comportent des termes de diffusion qui sont prépondérants devant les termes convectifs; il semble alors intéressant (pour les raisons précitées) d'utiliser des dérivées centrées pour ces termes.

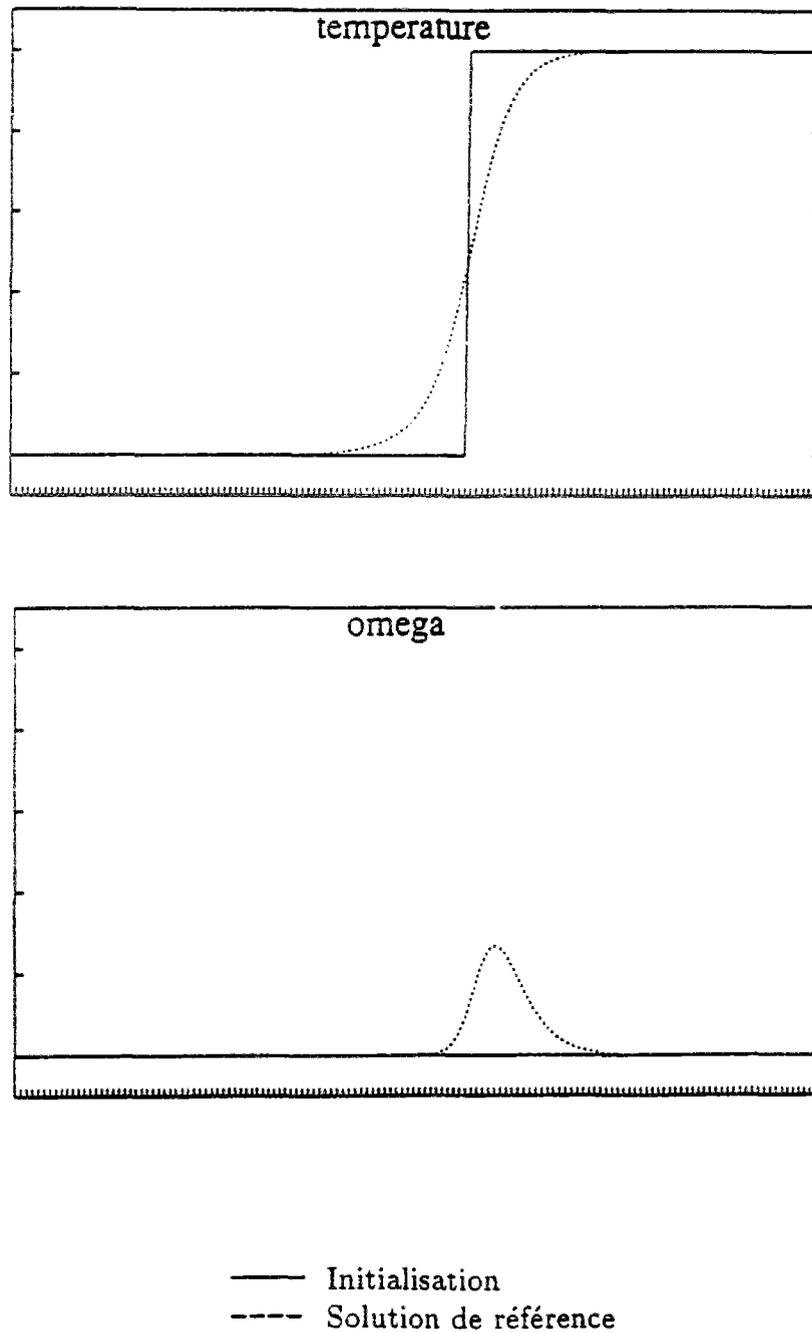


Figure VI.3 : Initialisation et solution de référence obtenue par le schéma explicite pour 4000 itérations ($V_f=0.7460375$)

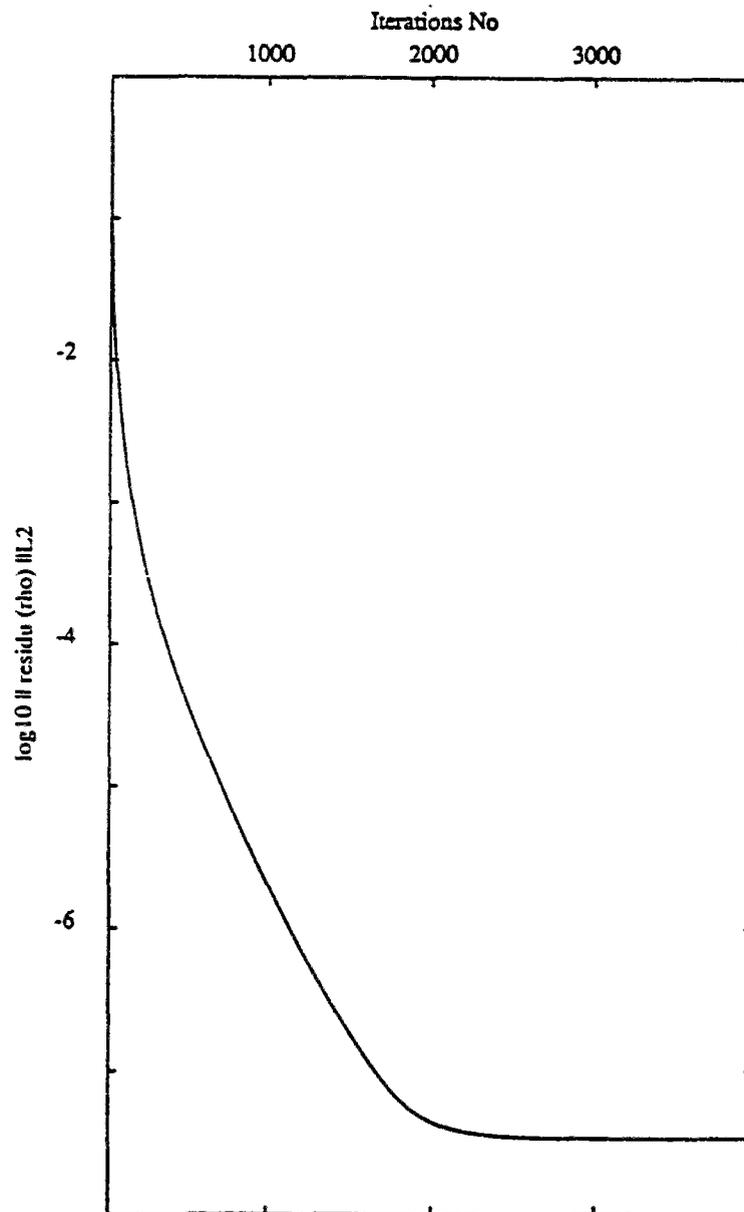
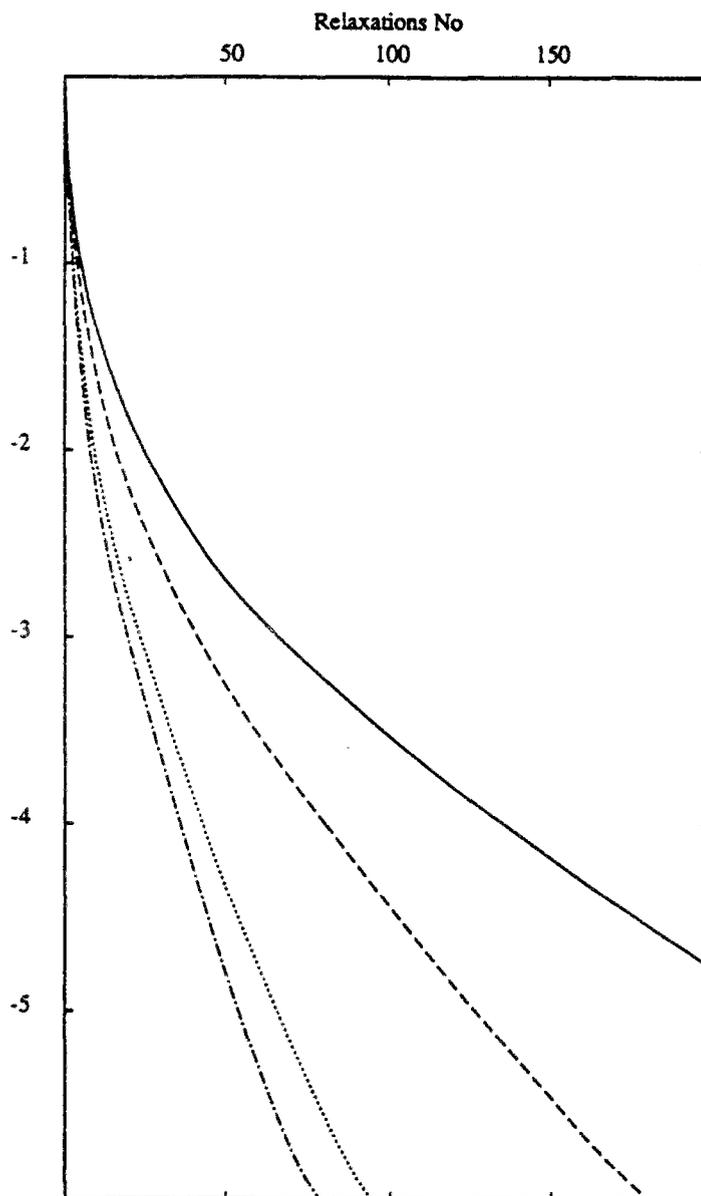


Figure VI.4 : Résidu normalisé de la température pour le schéma explicite



— $\Omega = 1, V_f = 0.74595$ ····· $\Omega = 1.4, V_f = 0.74595$
 - - - $\Omega = 1.2, V_f = 0.74597$ - · - · $\Omega = 1.45, V_f = 0.74595$

Figure VI.5 : Convergence de la phase de relaxation pour la solution obtenue par le schéma implicite en une itération temporelle en fonction du paramètre de sur-relaxation ω

VI.6 CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Dans la première partie de cette thèse, on a cherché à démontrer de façon rigoureuse, que le schéma implicite par relaxation non linéaire converge vers la solution faible du problème (108). Bien que nous n'ayons pu aboutir, nous avons quand même pu démontrer que ce type de schéma possède de bonnes propriétés (stabilité inconditionnelle, schéma TVD).

Contrairement aux autres schémas implicites, le schéma ainsi défini ne nécessite aucun stockage matriciel. Ce qui est très intéressant surtout pour la résolution d'équations multidimensionnelles.

Une étude de convergence sur une équation modèle a permis de mettre en évidence qu'il est possible dans certains cas d'accroître la convergence par utilisation d'une procédure de sur-relaxation.

Sur un cas test de flamme stationnaire, et par utilisation d'une procédure de sur-relaxation, ce schéma s'est avéré très robuste (obtention de la solution en une itération temporelle) et a permis d'obtenir des gains voisins de 5 par rapport à un schéma explicite.

On présente au chapitre suivant des résultats sur un problème instationnaire qui montre, là encore, l'efficacité de ce schéma.

VI.7 ANNEXE

L'objet de cette annexe est de montrer que si l'on suppose le théorème 4 vérifié (existence d'une sous suite convergente vers une fonction u), alors pour le cas $q = Cste$ avec g nulle, la limite u est solution faible de (108) et cette solution est entropique au sens de Kruskov.

VI.7.1 Convergence vers la solution faible pour $q = Cst$

Le problème de la convergence vers la solution faible pour $q = Cst$ a été traité par Stoufflet [63] pour un cas peu différent du nôtre; la démarche que nous allons suivre est identique à la sienne.

On va tout d'abord énoncer un théorème sur la composition des suites qui nous servira ultérieurement.

Théorème A1

Soit Ω un ouvert borné de \mathbb{R} et soient $\{v_m\}$ et $\{w_m\}$ deux suites de Cauchy de $L^1(\Omega)$. On suppose qu'il existe $M \geq 0$ tel que:

$$\forall m, \|v_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M \text{ et } \|w_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M$$

Soit ψ une fonction lipschitzienne de $[-M, +M]$ sur \mathbb{R} , si v et w sont les limites de $\{v_m\}$ et $\{w_m\}$ alors $\{\psi(v_m)w_m\} \rightarrow \psi(v)w$ dans $L^1(\Omega)$.

On peut maintenant établir le théorème suivant:

Théorème A2

Si $f \in C^1(\mathbb{R})$, $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap BV_{Loc}(\mathbb{R})$, $M = \|u_0\|_{L^\infty}$ avec u_0 définie sur un support compact et si, $\exists S \in \mathbb{R} / q \leq S$ et $q \geq \frac{1}{2}|f'(\xi)|$ avec $\xi \in [-M, +M]$; alors:

La fonction u obtenue à la limite est solution faible du problème de Cauchy (108), c'est à dire $\forall \phi \in C_0^2(\mathbb{R} \times]0, T[)$:

$$\iint_{\mathbb{R} \times]0, T[} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} u + \frac{\partial \phi}{\partial x} f(u) \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}} \phi(x, 0) u_0(x) dx = 0$$

Démonstration:

On sait d'après le théorème de convergence, que la suite u_i^α converge vers u_i^{n+1} solution de l'équation suivante ($g = 0$ et $q = Cst$):

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2} (f(u_{i+1}^{n+1}) - f(u_{i-1}^{n+1})) + \sigma q (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}). \quad (125)$$

On suppose que les hypothèses du théorème 4 sont vérifiées, on peut alors extraire de (125) une sous-suite $\{u_h\}$ qui converge lorsque $h \rightarrow 0$ vers une fonction u .

Soient $\phi \in C_0^2(\mathbb{R} \times]0, T[)$ et $h \in \{h_m\}_{m \in \mathbb{N}}$

On définit ϕ_h par:

$$\phi_h(x, t) = \phi_i^n \text{ si } (x, t) \in I_i \times V^n$$

$$\phi_i^N = 0, \forall i \text{ pour } h \text{ assez petit}$$

u_0 étant définie sur un compact, il existe un intervalle I_n de \mathbb{R} tel que:

$$\forall n, \forall i \notin I_n, u_i^n = 0.$$

On multiplie (125) par $\phi_i^n h$ et on somme cette relation pour $n \in [0, N-1]$ et pour $i \in \mathbb{Z}$.
On obtient:

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{n=0}^{n=N-1} [(u_i^{n+1} - u_i^n) \phi_i^n h + \frac{\sigma}{2} (f(u_{i+1}^{n+1}) - f(u_{i-1}^{n+1})) \phi_i^n h] = \sigma q (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) \phi_i^n h$$

On va évaluer successivement chaque terme de cette équation.

1^{er} terme:

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{n=0}^{N-1} [(u_i^{n+1} - u_i^n) \phi_i^n h] = \sum_{i \in \mathbb{Z}} [\sum_{n=1}^{n=N} u_i^n (\phi_i^{n-1} - \phi_i^n) \frac{\sigma h^2}{\sigma h} - u_i^0 \phi_i^0 h]$$

On applique maintenant le théorème A1 sur le deuxième membre de l'équation ainsi obtenue.

Pour cela on pose:

$$-\Omega = I_n \times]0, T]$$

$$-\{v_m\} = \{u_{h_m}\} \text{ avec } \{v_m\} \longrightarrow u \text{ et } \|u_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M$$

$$-\{w_m\} = \left\{ \frac{1}{\sigma h_m} (\phi_{h_m}(x, t) - \phi_{h_m}(x, t - \sigma h_m)) \right\} \text{ avec } \{w_m\} \longrightarrow \frac{\partial \phi}{\partial t},$$

$$\text{et } \|w_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\|_{L^\infty(\Omega)} \text{ borné.}$$

$$-\psi \text{ la fonction identité.}$$

On se trouve dans les conditions d'application du théorème A1, par passage à la limite on obtient:

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{n=1}^{n=N} u_i^n (\phi_i^{n-1} - \phi_i^n) \frac{\sigma h^2}{\sigma h} = \iint_{\Omega} -u_{h_m} w_{h_m} dx dt \longrightarrow \iint_{\Omega} -u \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dt$$

et

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}} -u_i^0 \phi_i^0 h = \int_{\mathbb{R}} -\phi_{h_m}(x, 0) u_{h_m} dx \longrightarrow \int_{\mathbb{R}} -\phi(x, 0) u_0(x) dx$$

2^{eme} terme:

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\sigma}{2} (f(u_{i+1}^{n+1}) - f(u_{i-1}^{n+1})) \phi_i^n h = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{n=1}^{n=N-1} f(u_i^{n+1}) (\phi_{i-1}^n - \phi_{i+1}^n) \frac{\sigma h^2}{2h}$$

Par un procédé identique à la phase précédente, on pose:

$$-\Omega = I_n \times]0, T]$$

$$-\{v_m\} = \{u_{h_m}\} \text{ avec } \{v_m\} \longrightarrow u \text{ et } \|u_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M$$

$$-\{w_m\} = \left\{ \frac{1}{2h_m} (\phi_{h_m}(x - h_m, t) - \phi_{h_m}(x + h_m, t)) \right\} \text{ avec } \{w_m\} \longrightarrow \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

et $\|w_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\|_{L^\infty(\Omega)}$ borné.
 - ψ la fonction f

On montre alors:

$$\sum_{i \in \mathbf{Z}} \sum_{n=0}^{n=N-1} f(u_i^{n+1}) \frac{\phi_{i-1}^n - \phi_{i+1}^n}{2h} \sigma h^2 = \iint_{\Omega} -f(u_{h_m}) w_m dx dt \longrightarrow \iint_{\Omega} -f(u) \frac{\partial \phi}{\partial x} dx dt$$

3^{eme} terme:

$$\sum_{i \in \mathbf{Z}} \sum_{n=0}^{N-1} \sigma q (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) \phi_i^n h = \sum_{n=0}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbf{Z}} \sigma q u_i^{n+1} (\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \frac{h^3}{h^2}$$

On pose:

$$-\Omega = I_n \times]0, T]$$

$$-\{v_m\} = \{u_{h_m}\} \text{ avec } \{v_m\} \longrightarrow u \text{ et } \|u_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M$$

$$-\{w_m\} = \left\{ \frac{1}{h_m^2} (\phi_{h_m}(x + h_m, t) + \phi_{h_m}(x - h_m, t) - 2\phi_{h_m}(x, t)) \right\} \text{ avec ,}$$

$$\{w_m\} \longrightarrow \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \text{ et } \|w_m\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right\|_{L^\infty(\Omega)} \text{ borné.}$$

- ψ la fonction identité.

Alors:

$$\sum_{n=0}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbf{Z}} q u_i^{n+1} \frac{(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n)}{h^2} (\sigma h^2) h = \iint_{\Omega} h_m u_m w_m q dx dt \longrightarrow 0$$

En sommant les trois termes, on retrouve l'expression souhaitée, le théorème est démontré.
 Montrons maintenant que cette solution faible u est unique, cela fait l'objet de la section suivante.

VI.7.2 Unicité de la solution au sens de Kruzkov

Théorème A3

Si les hypothèses du théorème A3 sont vérifiées, alors:

La suite de fonction $\{u_h\}$ construite à partir de (125) converge dans $L^1_{loc}(\mathbb{R} \times]0, T[)$ vers la fonction u qui est solution au sens de Kruzkov du problème de Cauchy (108).

D'après le théorème 3, la solution est unique.

Démonstration:

Il suffit de démontrer que la fonction u est solution faible au sens de Kruzkov, c'est à dire :

$$\forall k \in \mathbb{R}, \forall \phi \in C_0^2(\mathbb{R} \times]0, T[) \text{ positive}$$

$$\iint_{\mathbb{R} \times]0, T[} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} |u - k| + \frac{\partial \phi}{\partial x} \text{sign}(u - k) (f(u) - f(k)) \right) dx dt \geq 0$$

Soit k un réel quelconque, (125) se réécrit:

$$(1 + 2\sigma q)(u_i^{n+1} - k) = (u_i^n - k) - \frac{\sigma}{2}[f(u_{i+1}^{n+1}) - f(k) + f(k) - f(u_{i-1}^{n+1})] \\ + \sigma q(u_{i+1}^{n+1} - k) + \sigma q(u_{i-1}^{n+1} - k)$$

Deux cas sont à envisager suivant la valeur du réel k .

1. $|k| \leq M$

Alors $\exists k_i^{n+1} \in [-M, +M] / f(u_i^{n+1}) - f(k) = f'(k_i^{n+1})(u_i^{n+1} - k)$

Or $\sigma q - \frac{\sigma}{2}f'(k_{i+1}^{n+1}) \geq 0$ et $\sigma q + \frac{\sigma}{2}f'(k_{i-1}^{n+1}) \geq 0$, on obtient après majoration:

$$(1 + 2\sigma q)|u_i^{n+1} - k| \leq |u_i^n - k| - \frac{\sigma}{2}f'(k_{i+1}^{n+1})|u_{i+1}^{n+1} - k| + \frac{\sigma}{2}f'(k_{i-1}^{n+1})|u_{i-1}^{n+1} - k| \\ + \sigma q|u_{i+1}^{n+1} - k| + \sigma q|u_{i-1}^{n+1} - k|$$

Mais $[f(u_i^{n+1}) - f(k)]\text{sign}(u_i^{n+1} - k) = f'(k_i^{n+1})|u_i^{n+1} - k|$, en reportant ceci dans l'inégalité précédente on obtient:

$$(1 + 2\sigma q)|u_i^{n+1} - k| \leq |u_i^n - k| + \sigma q|u_{i+1}^{n+1} - k| + \sigma q|u_{i-1}^{n+1} - k| \\ - \frac{\sigma}{2}[f(u_{i+1}^{n+1}) - f(k)]\text{sign}(u_{i+1}^{n+1} - k) \\ + \frac{\sigma}{2}[f(u_{i-1}^{n+1}) - f(k)]\text{sign}(u_{i-1}^{n+1} - k) \quad (126)$$

2. $|k| \geq M$

Dans ce cas $\text{sign}(u_{i+1}^{n+1} - k) = \text{sign}(u_{i-1}^{n+1} - k)$, on vérifie aisément que (126) reste valable, l'inégalité étant remplacée par une égalité. En conclusion, $\forall k \in \mathbb{R}$ (126) est vérifiée.

On va sommer cette relation sur $i \in \mathbb{Z}$ et sur $n \in [1, N-1]$ après l'avoir multipliée par $\phi_i^n h$, les notations sont les mêmes que pour la démonstration précédente. (126) s'écrit:

$$\sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbb{Z}} (|u_i^{n+1} - k| - |u_i^n - k|) \phi_i^n h \leq \\ \sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbb{Z}} q\sigma (|u_{i+1}^{n+1} - k| - |u_i^{n+1} - k|) \phi_i^n h + q\sigma (|u_{i-1}^{n+1} - k| - |u_i^{n+1} - k|) \phi_i^n h \\ + \sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbb{Z}} \frac{\sigma}{2} [(f(u_{i-1}^{n+1}) - f(k))\text{sign}(u_{i-1}^{n+1} - k) - (f(u_{i+1}^{n+1}) - f(k))\text{sign}(u_{i+1}^{n+1} - k)] \phi_i^n h$$

1^{er} terme:

$$\sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbb{Z}} (|u_i^{n+1} - k| - |u_i^n - k|) \phi_i^n h = \sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbb{Z}} |u_i^{n+1} - k| \frac{\phi_i^n - \phi_i^{n+1}}{\sigma h} \sigma h^2$$

On procède de la même façon que pour le théorème précédent on montre alors que ce terme a pour limite lorsque $h \rightarrow 0$:

$$\iint_{\Omega} -|u - k| \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dt$$

2^{eme} terme:

$$\sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbf{Z}} q \sigma (|u_{i+1}^{n+1} - k| - |u_i^{n+1} - k|) \phi_i^n h + q \sigma (|u_{i-1}^{n+1} - k| - |u_i^{n+1} - k|) \phi_i^n h =$$

$$\sum_{n=1}^{n=N} \sum_{i \in \mathbf{Z}} q \sigma |u_{i+1}^{n+1} - k| \left(\frac{\phi_{i+2}^n - 2\phi_{i+1}^n + \phi_i^n}{h^2} \right) h^2 h$$

A la limite ce terme vaut:

$$\iint_{\Omega} h_m |u_{h_m} - k| w_m q dx dt \rightarrow 0$$

3^{eme} terme:

$$\sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbf{Z}} \frac{\sigma}{2} [(f(u_{i-1}^{n+1}) - f(k)) \text{sign}(u_{i-1}^{n+1} - k) - (f(u_{i+1}^{n+1}) - f(k)) \text{sign}(u_{i+1}^{n+1} - k)] \phi_i^n h =$$

$$\sum_{n=1}^{n=N-1} \sum_{i \in \mathbf{Z}} -\frac{\sigma}{2} (f(u_i^{n+1}) - f(k)) \text{sign}(u_i^{n+1} - k) \frac{\phi_{i-1}^n - \phi_{i+1}^n}{2h} 2h^2$$

A la limite ce terme vaut:

$$\iint_{\Omega} (f(u_{h_m}) - f(k)) \text{sign}(u_{h_m} - k) w_m dx dt \rightarrow \iint_{\Omega} (f(u) - f(k)) \text{sign}(u - k) \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dt =$$

On somme ces trois termes, on retrouve alors l'expression souhaitée. Ceci achève la démonstration.

Chapitre VII

ETUDE DE METHODES IMPLICITES POUR LA RESOLUTION DES EQUATIONS DE LA COMBUSTION

VII.1 INTRODUCTION

On s'intéresse dans ce chapitre à la simulation numérique d'écoulements réactifs à nombre de Mach moyen (compris entre 0.5 et 3 pour fixer les idées). Lorsque l'on utilise pour cette simulation des schémas explicites, les critères de stabilité des termes diffusifs et des termes sources sont en général plus restrictifs que ceux des termes convectifs, alors que pour les écoulements à petit nombre de Mach, ce sont au contraire les termes convectifs qui limitent le pas de temps (voir [23]).

Pour s'affranchir de ces critères, on souhaite résoudre numériquement les équations par une méthode par pas fractionnaires (ou encore par séparation des opérateurs). Afin de conserver une solution instationnaire de bonne qualité, les termes convectifs sont résolus par un schéma explicite tandis que les autres termes qui entraînent une réduction du pas de temps sont traités soit par un schéma explicite par sous-cyclage, soit par un schéma implicite.

Le but de ce travail est donc de mettre au point des méthodes implicites performantes pour la simulation d'écoulements réactifs transsoniques.

Pour étudier les problèmes posés par l'approximation numérique des termes de réaction et de diffusion, on va considérer dans la première et dans la seconde partie de cette étude le modèle isobare monodimensionnel (modèle présenté en détail au chapitre 1) que nous rappelons ici.

Ce modèle simplifié ne fait plus intervenir l'hydrodynamique; il ne conserve que la diffusion et la réaction. On considère de plus une chimie simple avec une seule réaction chimique et deux espèces. Le système que l'on étudie est alors parabolique et ne comporte comme

variable que la température (T) et la fraction massique du réactant (Y) (voir par exemple [39]).

$$\begin{cases} T_t = T_{xx} + YF(T), \\ Y_t = \frac{Y_{xx}}{Le} - YF(T). \end{cases} \quad (127)$$

$YF(T) = \Omega(Y, T)$ est le taux de réaction et Le le nombre de Lewis, rapport des diffusivités thermique et moléculaire.

La loi d'Arrhénius et la loi d'action de masse donnent pour le taux de réaction normalisé (voir [53], [39]):

$$\Omega(T, Y) = \frac{\beta^2}{2Le} Y \exp\left(\frac{-\beta(1-T)}{1-\delta(1-T)}\right),$$

où β est l'énergie d'activation réduite et δ le rapport entre l'élévation de température due à la réaction et la température des gaz brûlés. On suppose de plus que Le , β et δ sont constants. Si $Le = 1$ le système (127) se réduit à une seule équation puisque l'on a (avec la normalisation utilisée) la relation $Y + T = 1$.

Pour ce modèle, l'analyse asymptotique pour les grandes énergies d'activation donne des caractéristiques physiques de la flamme:

- Epaisseur de la flamme $L_f = 1$.
- Epaisseur de la zone de réaction $L_r \simeq \frac{2}{\beta}$.
- Temps de transit $t_f = 1$.

On note h le pas spatial utilisé dans les essais numériques, supposé constant.

Dans la première partie (Section VII.2), on traite séparément les termes diffusifs et réactifs. On présente pour cette approche les différents schémas numériques envisageables ainsi que les critères de stabilité qui en découlent. La résolution des termes diffusifs se fait par une méthode itérative de type Jacobi ou Gauss-Seidel. On présente en détail une procédure de sur-relaxation qui permet d'accroître considérablement la convergence de la méthode itérative et donc de réduire les temps de calcul.

Dans la seconde partie (Section VII.3), une étude similaire est effectuée en conservant couplés les effets diffusifs et réactifs.

Enfin, dans une dernière partie (Section VII.4), on applique les résultats précédents pour la simulation numérique monodimensionnelle de propagation d'une flamme dans un fluide compressible, en prenant en compte les effets convectifs, réactifs et diffusifs.

VII.2 SCHEMAS NUMERIQUES POUR LE SYSTEME DECOUPLE

On souhaite, dans le cadre d'une approche par pas fractionnaires, déterminer le rapport des critères de stabilité entre le schéma explicite et les différents schémas implicites envisageables pour chacun des termes composant le système d'équations considéré.

VII.2.1 Schéma explicite

Terme diffusif

En l'absence de termes réactifs, le système à résoudre est découplé et s'écrit après discrétisation:

$$\begin{cases} T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\Delta t}{h^2}(T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n), \\ Y_i^{n+1} = Y_i^n + \frac{\Delta t}{h^2 Le}(Y_{i-1}^n - 2Y_i^n + Y_{i+1}^n). \end{cases}$$

De manière immédiate, le schéma ainsi défini est stable si:

$$\Delta t_d^e \leq \min\left(\frac{h^2 Le}{2}, \frac{h^2}{2}\right).$$

Terme source

En l'absence de termes diffusifs, le système discrétisé s'écrit:

$$\begin{cases} T_i^{n+1} = T_i^n + \Delta t Y_i^n F(T_i^n), \\ Y_i^{n+1} = Y_i^n - \Delta t Y_i^n F(T_i^n). \end{cases}$$

Le schéma sera stable ($Y_i^{n+1} \geq 0$) si:

$$\Delta t_r^e \leq \min_i \frac{1}{F(T_i^n)} = \frac{2Le}{\beta^2} \max_i \left[\exp\left(\frac{-\beta(1-T_i^n)}{1-\delta(1-T_i^n)}\right) \right].$$

Cette dernière expression est une fonction croissante de la température T ($\beta > 0$), le maximum sera donc atteint pour $T = T_{max} = 1$ classiquement dans ce modèle. Par conséquent, la stabilité sera assurée si:

$$\Delta t_r^e \leq \frac{2Le}{\beta^2}.$$

Ce pas de temps est indépendant du maillage, il ne dépend que du nombre de Zeldovich β et du nombre de Lewis Le .

Remarque:

Comparons ces deux pas de temps pour le cas particulier où $Le \leq 1$, on a alors:

$$\frac{\Delta t_d^e}{\Delta t_r^e} = \frac{h^2 \beta^2}{4}$$

La largeur de la zone de réaction est en $\frac{2}{\beta}$, si on souhaite capter correctement cette zone, il faut qu'elle comporte plusieurs points. En conséquence, le rapport des pas de temps $\frac{\Delta t_d^e}{\Delta t_r^e}$

sera toujours inférieur à 1. Pour les exemples numériques considérés par la suite, on a pris $\beta = 10$ et $h = 0.05$ (4 points dans la zone de réaction), ce rapport $\frac{\Delta t_d^e}{\Delta t_r^e}$ vaut alors $\frac{1}{16}$.

De ce fait, si on souhaite utiliser des pas de temps de l'ordre de $10\Delta t_d^e$, une approche explicite pour les termes réactifs est envisageable. Pour des pas de temps plus importants, on peut soit utiliser une approche explicite par sous-cyclage soit utiliser un schéma implicite.

VII.2.2 Schéma implicite linéarisé

Terme diffusif

Les termes diffusifs étant linéaires, le schéma implicite linéarisé s'identifie à un schéma totalement implicite. Le système s'écrit:

$$\begin{cases} T_i^{n+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{h^2}\right) = T_i^n + \frac{\Delta t}{h^2} (T_{i+1}^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}), \\ Y_i^{n+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{h^2 Le}\right) = Y_i^n + \frac{\Delta t}{h^2 Le} (Y_{i+1}^{n+1} + Y_{i-1}^{n+1}). \end{cases}$$

Le système ainsi défini est découplé, la résolution peut se faire soit par une méthode directe soit par une méthode itérative de type Gauss-Seidel, ou Jacobi si on souhaite vectoriser le code numérique. Une analyse de stabilité montre que ce schéma est inconditionnellement stable.

La résolution par une méthode itérative est en général la plus avantageuse. Le système résolu étant linéaire, ce schéma s'identifie au schéma implicite par relaxation qui sera défini ultérieurement. On montrera alors un procédé de sur-relaxation qui permet d'accélérer considérablement la convergence de la méthode itérative.

Terme source

Le système à résoudre pour le terme source est un peu plus complexe dans la mesure où il y a un couplage entre l'équation de température et l'équation de fraction massique. Cependant, on remarque qu'en l'absence de termes diffusifs, on a $\forall i, Y_i(t) + T_i(t) = C_i$. On peut donc se ramener pour simplifier l'écriture du schéma à la résolution d'une seule équation. Choisissons d'écrire le schéma pour la fraction massique Y avec $C_i = 1$.

$$Y_i^{n+1} [1 + \Delta t (F(1 - Y_i^n) - Y_i^n F'(1 - Y_i^n))] = Y_i^n [1 - \Delta t Y_i^n F'(1 - Y_i^n)]. \quad (128)$$

Le schéma est stable si $Y_i^{n+1} \geq 0$ et si $\frac{Y_i^{n+1}}{Y_i^n} \leq 1$, ce qui revient à:

$$\begin{cases} 1 + \Delta t F(1 - Y_i^n) - \Delta t Y_i^n F'(1 - Y_i^n) > 0, \\ 1 - \Delta t Y_i^n F'(1 - Y_i^n) > 0. \end{cases}$$

La deuxième relation est la plus restrictive, la stabilité sera donc assurée pour:

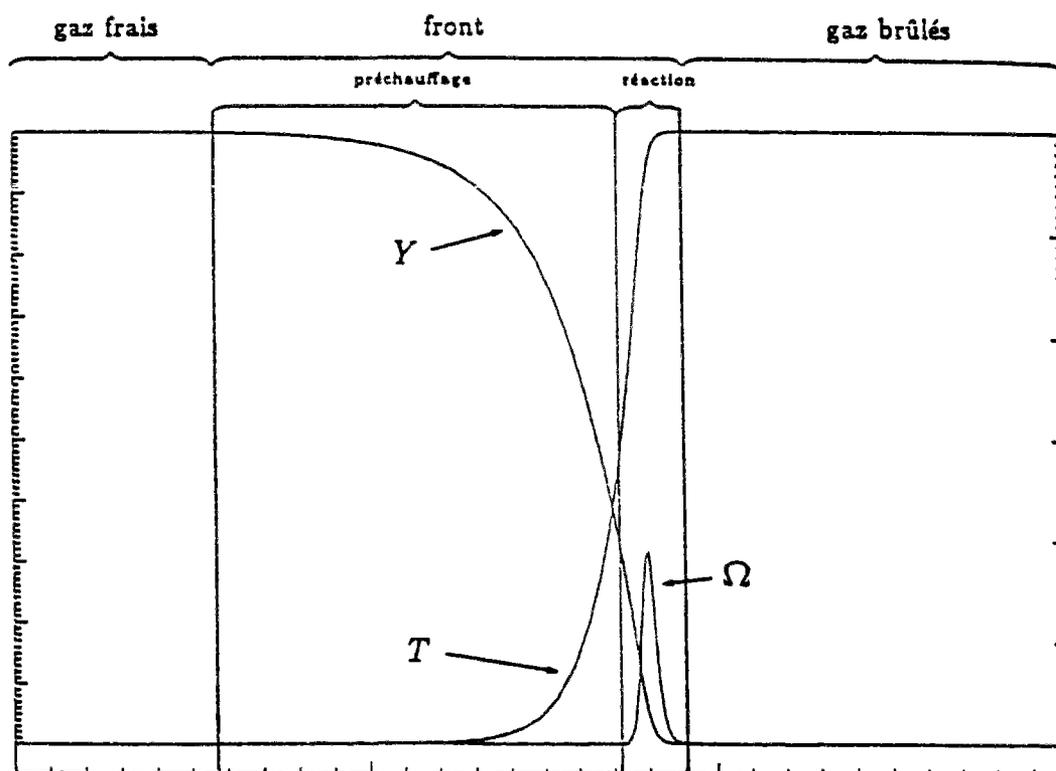
$$\Delta t_s^{ii} \leq \frac{1}{Y_i^n F'(1 - Y_i^n)}$$

Il convient de comparer ce pas de temps à celui obtenu par le schéma explicite. Formons la différence entre les valeurs locales de ces deux pas de temps:

$$\Delta t_s^e - \Delta t_s^{ii} = \frac{Y_i^n F'(1 - Y_i^n) - F(1 - Y_i^n)}{Y_i^n F'(1 - Y_i^n) F(1 - Y_i^n)}$$

On remarque que $\Delta t_s^e - \Delta t_s^{ii}$ a le signe de $Y_i^n F'(1 - Y_i^n) - F(1 - Y_i^n)$. Cette quantité n'est autre, au signe près, que $\frac{\partial}{\partial Y_i^n} [Y_i^n F(1 - Y_i^n)] = \frac{\partial \Omega(Y_i^n)}{\partial Y_i^n}$.

Or de par sa structure, on sait que dans une flamme stationnaire, $\Omega(Y, T)$ est croissante dans la zone de préchauffage et décroissante dans la zone des gaz brûlés (voir figure ci-dessous).



Profil de T, Ω et Y

Comme Y est alors décroissante en fonction de x , $\frac{\partial \Omega}{\partial Y}$ a le même signe que $-\frac{\partial \Omega}{\partial x}$ et on voit que la différence $\Delta t_s^e - \Delta t_s^{ii}$ n'a pas un signe constant. En particulier, la différence entre

les valeurs locales du pas de temps explicite et du pas de temps implicite linéarisé peut être positive.

En ce qui nous concerne, l'approche instationnaire nécessite l'utilisation d'un pas de temps global. De ce fait il convient de comparer non les valeurs locales mais les minima de ces deux pas de temps.

$$\Delta t_r^e = \min \frac{1}{F(1-Y)} = \frac{2}{\beta^2}, \quad \Delta t_r^{ii} = \min \frac{1}{YF'(1-Y)}.$$

Un calcul simple montre que Δt_r^{ii} est extrémal pour Y solution de l'équation du second degré:

$$\delta^2 Y^2 + \beta Y - 1 = 0$$

Des deux racines de cette équation, on ne garde que celle qui est positive. Si on suppose de plus que le rapport $\frac{\delta}{\beta}$ est petit (ce qui en pratique est vérifié), alors on détermine facilement cette racine. On obtient:

$$Y = \frac{1}{\beta} [1 + O(\frac{\delta^2}{\beta^2})].$$

On vérifie que cette racine donne Δt_r^{ii} minimal.

Le calcul du pas de temps Δt_r^{ii} est alors immédiat.

$$\Delta t_r^{ii} = \frac{2e(\beta - 2\delta)}{\beta^2(\beta - \delta)} + O(\frac{\delta^2}{\beta^4}).$$

Pour les valeurs numériques prises par la suite, ($\beta = 10$, $\delta = 0.84$, et $Le = 1$) on détermine le rapport des pas de temps:

- à l'ordre 0 en $\frac{\delta}{\beta} : \frac{\Delta t_r^{ii}}{\Delta t_r^e} = e = 2.71$ (voir Picon [55]),

- à l'ordre 1 en $\frac{\delta}{\beta} : \frac{\Delta t_r^{ii}}{\Delta t_r^e} = 2.47.$

Le calcul numérique a donné un rapport voisin de 2.5.

Par contre le rapport $\frac{\Delta t_r^{ii}}{\Delta t_d^e}$ est de l'ordre de 40, et l'utilisation de ce schéma implicite peut effectivement être intéressante si le pas de temps de référence est donné par les termes diffusifs. Mais dans tous les cas, il existe pour ce schéma une limitation du pas de temps.

Conclusion

Dans le cadre d'une approche par pas fractionnaires où les résolutions des termes diffusifs et du terme source sont découplées, le schéma implicite linéarisé ne peut être utilisé sans limitation de pas de temps.

Une autre possibilité consiste à utiliser le fait qu'une seule réaction a lieu. En effet, dans ce cas, même en présence de plusieurs espèces, on peut former une équation pour le terme source. On présente dans la section suivante les discrétisations possibles issues de cette remarque. On mettra en évidence que cette méthode ne permet pas de s'affranchir d'un critère de stabilité.

En conséquence, la solution pour s'affranchir d'une limitation du pas de temps, consiste à traiter le terme source par une méthode totalement implicite. Ce terme étant non linéaire, une méthode de Newton semble bien appropriée. On présentera par la suite l'implémentation de cette méthode pour le cas particulier où une seule réaction a lieu.

VII.2.3 Formation d'une équation pour le terme source

Le système que l'on souhaite résoudre est:

$$\begin{cases} T_t = \Omega(Y, T) \\ Y_t = -\Omega(Y, T) \end{cases} \quad (129)$$

Avec: $\Omega(Y, T) = YF(T)$

On écrit la dérivée temporelle du terme source $\Omega(Y, T)$:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} = \frac{\partial \Omega}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$$

On utilise le système (129) et l'expression du terme source pour évaluer chaque terme de cette équation. Deux écritures sont possibles:

$$\Omega_t(Y, T) = K(Y, T) \Omega(Y, T):$$

On obtient une équation de ce type en écrivant:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial Y} = F(T), \quad \frac{\partial \Omega}{\partial T} = YF'(T).$$

On obtient alors pour l'équation en Ω_t :

$$\Omega_t(Y, T) = [YF'(T) - F(T)]\Omega(Y, T).$$

Si l'on suppose localement $K(Y, T) = YF'(T) - F(T) = Cst$, on peut directement intégrer cette équation. Alors:

$$\Omega(t + \Delta t) = \Omega(t) \exp[K(Y, T)(t) \Delta t].$$

$\forall t, \Omega(t^{n+1}) \geq 0$, il n'y a pas de critère sur Δt pour préserver la positivité du terme source. Formons maintenant l'équation discrétisée obtenue pour la fraction massique Y , en écrivant $Y^{n+1} = Y^n - \Delta t \Omega^{n+1}$:

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n - \Delta t Y_i^n F(T_i^n) \exp[(Y_i^n F'(T_i^n) - F(T_i^n)) \Delta t].$$

La stabilité de ce schéma est assurée si:

$$\Delta t_s^o < \frac{1}{F(T_i^n) \exp[(Y_i^n F'(T_i^n) - F(T_i^n)) \Delta t]}$$

Comparons ce pas de temps au pas de temps obtenu par le schéma explicite.

$$\frac{\Delta t_s^o}{\Delta t_e} = \exp[(-Y_i^n F'(T_i^n) + F(T_i^n)) \Delta t].$$

Là encore, dans la zone de préchauffage ce rapport est inférieur à 1 et donc la stabilité de ce schéma est plus sévère que celle du schéma explicite.

$$\Omega_t(Y, T) = K(Y, T) \Omega^2(Y, T):$$

Par un procédé identique à ce qui a été fait, on écrit:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial Y} = \frac{\Omega}{Y}, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial T} = \frac{F'(T)}{F(T)} \Omega.$$

Ce qui donne:

$$\Omega_t(Y, T) = \left[\frac{F'(T)}{F(T)} - \frac{1}{Y} \right] \Omega^2(Y, T).$$

Si l'on suppose localement $K(Y, T) = \frac{F'(T)}{F(T)} - \frac{1}{Y} = Cst$, on intègre cette équation:

$$\Omega(t + \Delta t) = \frac{\Omega(t)}{1 - \left[\frac{F'(T)}{F(T)} - \frac{1}{Y} \right] (t) \Omega(t) \Delta t}.$$

Il est facile de voir, en écrivant l'équation discrétisée pour la fraction massique, que ce schéma est équivalent au schéma implicite linéarisé; sa stabilité est donc la même.

Conclusion

Ces deux méthodes s'avèrent inefficaces pour la résolution des équations considérées. Dans ces conditions, pour une approche découplée (termes diffusifs et source traités séparément), la seule façon de procéder consiste à utiliser pour le terme source un schéma totalement implicite.

VII.2.4 Schéma totalement implicite

Soit à résoudre:

$$\begin{cases} T_i^{n+1} = T_i^n + \Delta t Y_i^{n+1} F(T_i^{n+1}), \\ Y_i^{n+1} = Y_i^n - \Delta t Y_i^{n+1} F(T_i^{n+1}). \end{cases} \quad (130)$$

Pour le cas particulier où une seule réaction existe, on peut former une équation non linéaire pour la température ou pour la fraction massique. L'intérêt de procéder ainsi réside dans le fait que l'on traite par une méthode de Newton une équation scalaire. On réduit ainsi le coût de la méthode.

$\forall i, T_i^n + Y_i^n = C(i)$, Alors:

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n - \Delta t Y_i^{n+1} F(C(i) - Y_i^{n+1})$$

Après résolution de cette équation, on obtient directement la température T_i^{n+1} :

$$T_i^{n+1} = C(i) - Y_i^{n+1}$$

La stabilité de ce schéma est inconditionnelle.

Remarque:

Pour un système très général (comportant plusieurs réactions), il n'est pas en général possible de former une équation scalaire pour une seule variable. La solution consiste alors à résoudre le système complet, ce qui a pour conséquence d'augmenter le coût de la méthode numérique.

VII.2.5 Schéma implicite par relaxation non linéaire

On s'intéressera plus loin à la résolution des termes diffusifs et du terme source par un schéma implicite par relaxation non linéaire. Pour le terme réactif considéré seul, ce schéma s'identifiera au schéma totalement implicite. Pour des termes purement diffusifs, ce schéma s'identifie à un algorithme de type Gauss-Seidel pour lequel nous présentons maintenant un procédé de sur-relaxation qui permet d'accroître la convergence de la phase de relaxation. Nous verrons dans la partie suivante comment étendre ce procédé de sur-relaxation pour un système couplant les termes diffusifs et le terme source.

Terme diffusif

Les équations considérées sont linéaires, en conséquence ce schéma s'identifie au schéma implicite dont la résolution se fait par un algorithme de type Gauss-Seidel.

Notons T^α et Y^α la valeur de la température et de la fraction massique à l'étape de relaxation

α . Le schéma s'écrit en version Gauss-Seidel en supposant un balayage dans le sens des noeuds croissant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall \alpha > 0 : \\ T_i^0 = T_i^n, \\ T_i^{\alpha+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{h^2}\right) = T_i^n + \frac{\Delta t}{h^2} (T_{i+1}^\alpha + T_{i-1}^{\alpha+1}), \\ Y_i^0 = Y_i^n, \\ Y_i^{\alpha+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{h^2 Le}\right) = Y_i^n + \frac{\Delta t}{h^2 Le} (Y_{i+1}^\alpha + Y_{i-1}^{\alpha+1}). \end{array} \right. \quad (131)$$

La stabilité est inconditionnelle.

Pour réduire les temps de calcul, il est nécessaire d'améliorer la convergence de la phase de relaxation. On peut réaliser ceci par une méthode de sur-relaxation. Pour une équation purement diffusive avec des conditions aux limites de type Dirichlet, nous avons vu au chapitre précédent que la procédure de sur-relaxation est plus performante lorsque l'on réalise un seul balayage. Cependant, bien que légèrement moins performante, on préfère réaliser une procédure à double balayage; en effet cette dernière s'avère moins sensible au variation du paramètre de sur-relaxation. Ceci est d'autant plus vrai que dans le cas général, la détermination du paramètre de sur-relaxation optimal est approchée.

Procédé de sur-relaxation

Considérons l'équation:

$$u_t = a u_{xx}.$$

avec conditions aux limites de Dirichlet. On note ω le paramètre de sur-relaxation. Le schéma de relaxation s'écrit alors, $\forall \alpha > 0$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour } i \text{ croissant,} \\ \tilde{u}_i^{\alpha+\frac{1}{2}} = u_i^n + a \frac{\Delta t}{h^2} (u_{i-1}^{\alpha+\frac{1}{2}} - 2\tilde{u}_i^{\alpha+\frac{1}{2}} + u_{i+1}^\alpha), \\ u_i^{\alpha+\frac{1}{2}} = \omega \tilde{u}_i^{\alpha+\frac{1}{2}} + (1-\omega) u_i^\alpha. \\ \text{Pour } i \text{ décroissant,} \\ \tilde{u}_i^{\alpha+1} = u_i^n + a \frac{\Delta t}{h^2} (u_{i-1}^{\alpha+\frac{1}{2}} - 2\tilde{u}_i^{\alpha+1} + u_{i+1}^{\alpha+\frac{1}{2}}), \\ u_i^{\alpha+1} = \omega \tilde{u}_i^{\alpha+1} + (1-\omega) u_i^{\alpha+\frac{1}{2}}. \end{array} \right.$$

On pose $\mu = a \frac{\Delta t}{h^2}$ et I le nombre de points de la discrétisation spatiale.

L'analyse matricielle donne pour le paramètre optimal de sur-relaxation ω_{opt} si on suppose un seul balayage (voir Varga [70] ou chapitre précédent):

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2}}, \text{ avec } \rho = \frac{2\mu}{1 + 2\mu} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right).$$

(ρ est le rayon spectral de la matrice reliant u^α à $u^{\alpha+1}$ pour un algorithme de Jacobi).

Cette procédure de sur-relaxation a pour conséquence d'amortir de façon "quasi uniforme" toutes les fréquences.

Quel que soit le type de conditions aux limites envisagé, cette méthode s'est avérée très robuste et assez performante. A titre d'exemple pour un problème de diffusion pure avec des conditions aux limites de type Dirichlet et pour un résidu normalisé de la phase de relaxation fixé à 10^{-3} , le gain en temps CPU par rapport au schéma non sur-relaxé est de l'ordre de 4.

Pour la recherche d'une solution instationnaire (pour laquelle on se limite pour des raisons de précision à des pas de temps petits), ce gain n'est en général pas suffisant pour rendre performante la méthode par rapport au schéma explicite. On présente donc une autre méthode de sur-relaxation plus performante mais hélas moins robuste et qui n'est applicable que sous certaines conditions : les conditions aux limites doivent être du type Neumann et le pas de temps ne doit pas, pour des raisons de précision, être trop grand. L'utilisation de cette méthode nécessite de ce fait certaines précautions.

Ce schéma est identique en tout point au schéma précédent, mis à part la sur-relaxation qui est toujours faite par rapport à l'étape de relaxation α .

De plus, on n'effectue aucune sur-relaxation sur les bords du domaine.

Ce schéma est présenté ci-dessous:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour } i \text{ croissant,} \\ \tilde{u}_i^{\alpha+\frac{1}{2}} = u_i^n + a \frac{\Delta t}{h^2} (u_{i-1}^{\alpha+\frac{1}{2}} - 2\tilde{u}_i^{\alpha+\frac{1}{2}} + u_{i+1}^\alpha), \\ u_i^{\alpha+\frac{1}{2}} = \omega \tilde{u}_i^{\alpha+\frac{1}{2}} + (1-\omega)u_i^\alpha. \\ \text{Pour } i \text{ décroissant,} \\ \tilde{u}_i^{\alpha+1} = u_i^n + a \frac{\Delta t}{h^2} (u_{i-1}^{\alpha+\frac{1}{2}} - 2\tilde{u}_i^{\alpha+1} + u_{i+1}^{\alpha+1}), \\ u_i^{\alpha+1} = \omega \tilde{u}_i^{\alpha+1} + (1-\omega)u_i^\alpha. \end{array} \right.$$

Il n'est pas possible comme c'était le cas précédemment de déterminer le paramètre optimal de sur-relaxation.

Cette procédure de sur-relaxation crée une erreur proportionnelle au pas de temps et inversement proportionnelle au résidu de la phase de relaxation. Pour illustrer ceci, on a réalisé une expérience de diffusion pure monodimensionnelle. Le maillage considéré comporte $N=101$ points, on initialise par une marche. On prend sur les bords du domaine des conditions aux limites de type Dirichlet. Pour cette expérience, la solution stationnaire que l'on note u_{ex} est uniforme. On définit deux résidus, le premier mesure la convergence vers l'état stationnaire:

$$Res_n = \frac{\sum_i |u_i^{n+1} - u_i^n|}{\sum_i |u_i^1 - u_i^0|},$$

tandis que le second mesure la convergence de la phase de relaxation:

$$Res_\alpha = \frac{\sum_i |u_i^{\alpha+1} - u_i^\alpha|}{\sum_i |u_i^{\alpha=1} - u_i^{\alpha=0}|}.$$

On applique le schéma précédent pour différents pas de temps et ce jusqu'à ce que $Res_n < 10^{-6}$. Le nombre de relaxations est déterminé de façon à atteindre le résidu Res_α souhaité. Le paramètre de sur-relaxation utilisé est le même que celui défini dans la partie précédente. On définit alors l'erreur en pourcentage de la méthode de sur-relaxation par:

$$E\% = \frac{\sum_i u_i - Nu_{ex}}{Nu_{ex}}$$

La solution ainsi obtenue par utilisation de la procédure de sur-relaxation est décalée par rapport à la solution exacte. On a regroupé dans le tableau ci-dessous les erreurs obtenues pour différents pas de temps et pour deux résidus normalisés.

Res_α	$\Delta t = 100\Delta t_a^e$	$\Delta t = 1000\Delta t_a^e$	$\Delta t = 10000\Delta t_a^e$
10^{-2}	1.4	7.5	40
10^{-3}	0.2	1	4.3

Erreurs en % dues à la procédure de sur-relaxation sur la solution stationnaire d'un problème de diffusion pure.

Les limites d'utilisation de cette procédure apparaissent clairement: l'erreur relative obtenue pour des grands pas de temps n'est pas acceptable. Cependant, pour les pas de temps que nous sommes amenés à utiliser par la suite ($\Delta t < 1000\Delta t_a^e$) les erreurs commises sont acceptables. Ceci est d'autant plus vrai en présence de combustion, car le terme source supprime alors toute diffusion en dehors de la zone de combustion (en effet T et Y sont pratiquement constants).

Un tel procédé de sur-relaxation a donné par rapport au schéma non sur-relaxé des gains en temps CPU de 20 à 40.

Une analyse de Fourier de cette méthode a montré que cette procédure donne de bons résultats car les basses fréquences sont très bien amorties. C'est cette méthode qui a été utilisée par la suite. Malgré les imperfections observées pour un problème de diffusion pure à grand pas de temps, cette méthode a donné en pratique des résultats très satisfaisants pour les problèmes traités.

Terme source

Le schéma totalement implicite écrit pour l'équation de fraction massique ne fait intervenir comme inconnue que Y_i^{n+1} . De ce fait, le schéma de relaxation non linéaire s'identifie là encore au schéma implicite décrit dans la section précédente. La solution est obtenue pour ce cas particulier en une relaxation.

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n - \Delta t Y_i^{n+1} F(C(i) - Y_i^{n+1})$$

L'équation de température est immédiate.

Conclusion

Par rapport à un schéma explicite, ce schéma de relaxation présente l'inconvénient d'avoir un paramètre supplémentaire à gérer (pour les termes diffusifs). En effet, il faut faire un choix en ce qui concerne le nombre de relaxations. En toute logique l'état $n + 1$ est obtenu après une infinité de relaxations. Dans la pratique, ce nombre devrait être conditionné par un résidu normalisé (très petit) calculé à partir des étapes de relaxation α et $\alpha + 1$. On verra dans la partie concernant les résultats numériques l'influence du nombre de relaxations sur la qualité de la solution.

VII.2.6 Conclusion

Il ressort de cette étude que dans une approche par pas fractionnaires, telle que nous l'avons définie, la seule façon de traiter le terme source pour s'affranchir d'un critère de stabilité est d'utiliser un schéma totalement implicite où la phase non linéaire est résolue par une méthode de Newton.

Pour l'utilisation de pas de temps plus faible, ($\Delta t < 40\Delta t_d^c$) on peut par contre envisager l'utilisation d'un schéma implicite linéarisé pour les termes réactifs. Pour des pas de temps encore plus petits ($\Delta t < 10\Delta t_d^c$), un approche explicite est possible pour ces termes.

Il reste à vérifier numériquement si d'une part ces schémas implicites permettent d'obtenir un gain en temps de calcul et si d'autre part les solutions sont de qualité acceptable.

De plus, on souhaite savoir qu'elle est l'influence sur la solution de l'ordre d'intégration des termes diffusifs et du terme source.

VII.2.7 Résultats numériques

On se propose dans cette partie de tester les différents schémas implicites présentés que l'on comparera à la solution obtenue par le schéma explicite. En plus de ce qui a été dit précédemment, on souhaite déterminer en fonction du pas de temps considéré quel est le schéma le mieux adapté. Pour ce, on considérera des pas de temps égaux à 10, 100 et 1000 fois le pas de temps explicite obtenu pour les termes diffusifs.

Tous les temps de calcul définis dans cette section et la suivante ont été obtenus avec une compilation scalaire des codes numériques, sur le CONVEX-C2 de l'INRIA.

On choisit pour présenter les résultats numériques:

$$Le = 1, \quad \beta = 10, \quad \delta = 0.84$$

Le nombre de points considéré est de 400, le pas $h = 0.05$.

Le pas de temps du schéma explicite est pris égal à $0.9\Delta t_d^c$ soit : $\Delta t_e = 1.125 \cdot 10^{-3}$.

On prend comme solution initiale l'état présenté figure VII.1. Cet état est obtenu à partir du schéma explicite sans convergence.

Sur les bords gauche et droit du domaine de calcul, on prend des conditions limites du type

Neumann (gradients de température et de concentration nuls).

La vitesse de flamme est calculée comme dans [39]: on se place dans un repère fixe par rapport à la flamme, repère dont la vitesse de translation est calculée en imposant que l'énergie thermique contenue dans le domaine de calcul reste constante au cours du temps. Notons I le nombre de points ($I = 400$), la conservation discrète de l'énergie thermique donne alors:

$$V(t) = \frac{-\frac{h}{2}(\Omega(T_0) + \Omega(T_I)) - \sum_{i=1}^{i=I-1} \Omega(T_i)h}{T_I - T_0}$$

La vitesse pour l'initialisation est $V_0 = 0.8713$. On choisit pour tous les résultats de présenter la solution à $t = 1000\Delta t_e$.

Compte tenu de l'étude précédente, trois schémas sont susceptibles de convenir. Pour ces trois schémas, l'intégration des termes diffusifs est traitée par le schéma de relaxation (131). Pour traiter les termes réactifs, le premier utilise le schéma implicite linéarisé (128) tandis que le second utilise une approche explicite par sous-cyclage. Enfin, le troisième est le schéma totalement implicite (130).

Il n'a pas été possible de traiter par cette approche le cas $\Delta t_i = 1000\Delta t_e$ (solution obtenue en une itération temporelle), autrement qu'avec la méthode de sous-cyclage. En effet, pour ce cas l'algorithme de Newton ne converge pas, la solution initiale est trop éloignée de la solution à $t = 1000\Delta t_e$. Dans ces conditions, si on souhaite obtenir la solution en une itération, un schéma complet couplant les termes diffusifs et le terme source est nécessaire.

1. Schéma implicite non linéaire

L'utilisation du schéma implicite par relaxation offre une liberté supplémentaire concernant le nombre de relaxations pour la résolution des termes diffusifs. Pour mesurer la convergence de cette phase, on définit un résidu normalisé à partir de la température et de la fraction massique. On a représenté figures VII.2a et VII.2b les solutions obtenues en 10 et 100 relaxations. Le pas de temps considéré est $\Delta t_i = 100\Delta t_e$. On intègre les termes diffusifs puis le terme source par le schéma totalement implicite.

Les résultats sont présentés dans le tableau suivant, le résidu qui y apparait est le résidu normalisé obtenue à la dernière relaxation de la dernière itération temporelle:

Pas de temps	Schéma implicite			Schéma explicite
	$\Delta t = 100\Delta t_e$			$\Delta t = \Delta t_e$
Figure	-	VII.2a	VII.2b	-
Nbr de relax	5	10	100	-
Résidu	0.3	0.1	10^{-3}	-
Vitesse de flamme	0.4074	0.5741	0.8533	0.8994
Temps CPU	0.66	0.96	5.6	13.7
Efficacité	20.8	14.3	2.4	1

Comme nous pouvions le penser, la convergence de la phase de relaxation améliore considérablement la qualité de la solution. Cependant, cette convergence est très lente (100 relaxations soit 200 balayages, sont nécessaires pour atteindre un résidu de 10^{-3}). Ceci a pour conséquence de réduire l'efficacité du schéma.

On peut cependant remarquer que, même lorsque la convergence est atteinte, la solution obtenue s'éloigne sensiblement de la solution de référence.

Pour réduire ce nombre de relaxations, on utilise la méthode de sur-relaxation définie précédemment (la deuxième) que l'on applique à notre problème de combustion. Le paramètre de sur-relaxation optimum défini par l'analyse matricielle est effectivement celui qui minimise le nombre de relaxation pour notre algorithme.

Pour $\Delta t_i = 100\Delta t_e$, la solution est obtenue en 10 itérations temporelles. L'intégration des termes diffusifs se fait avec $\omega_{opt} = 1.75$, 3 relaxations (c'est à dire 6 balayages) suffisent pour atteindre un résidu normalisé de 10^{-3} . Par contre, l'algorithme de Newton converge difficilement (autour de 20 itérations). La solution (figure VII.3a) est tout à fait comparable à celle obtenue sans sur-relaxation (figure VII.2b).

L'ordre d'intégration (termes diffusifs et termes réactifs) modifie considérablement la solution (figure VII.3b). En effet, la diffusion étale le terme source. La vitesse de flamme étant définie à partir de l'intégrale du terme source, lorsque la diffusion se fait en deuxième position, il est alors normal de trouver une vitesse de flamme légèrement supérieure. Il semble préférable d'intégrer les termes diffusifs en premier.

Pour $\Delta t_i = 10\Delta t_e$, la solution est obtenue en 100 itérations temporelles. $\omega_{opt} = 1.4$ et avec seulement 2 relaxations le résidu moyen est de $3 \cdot 10^{-4}$. L'algorithme de Newton converge en 3 itérations pour les points les plus délicats (dans la zone de combustion).

Les mêmes remarques restent valables, le pas de temps plus faible atténue simplement les phénomènes et on n'observe pratiquement pas de différence avec la solution de référence.

Pas de temps	$\Delta t = 100\Delta t_e$			$\Delta t = 10\Delta t_e$		
	D/R	D/R	R/D	D/R	D/R	R/D
Ordre d'intégration	VII.2b	VII.3a	VII.3b	-	-	-
ω	1	1.75	1.75	1	1.4	1.4
Nbr de relax	100	3	3	20	2	2
Vitesse de flamme	0.8533	0.8573	1.6480	0.8952	0.8951	0.9872
Temps CPU	5.6	0.60	0.61	18	4.1	4
Efficacité	2.2	22.8	22.8	0.76	3.3	3.4

2. Schéma implicite linéarisé

D'après l'analyse faite plus haut, le schéma implicite linéarisé ne peut être utilisé que pour $\Delta t < 40\Delta t_e^*$. On a vérifié numériquement que c'est bien le cas.

On ne présente par la suite que les résultats obtenus en intégrant d'abord les termes diffusifs

puis les termes réactifs. L'intégration des termes diffusifs se fait toujours en utilisant la méthode de sur-relaxation.

On a représenté figure VII.4a pour $\Delta t = 10\Delta t_e$ la solution obtenue par le schéma implicite linéarisé. Cette solution est comparable à celle obtenue par le schéma totalement implicite (la première itération de Newton s'identifie au schéma implicite linéarisé) pour un coût bien moindre. Le pas de temps considéré est inférieur au pas de temps explicite des termes réactifs, de ce fait l'algorithme de Newton implémenté dans le schéma implicite non linéaire converge très vite; aussi il n'est pas surprenant d'avoir des solutions quasi identiques. Pour un pas de temps plus important $\Delta t = 40\Delta t_e$ (Δt proche de la limite de stabilité) le schéma implicite linéarisé s'avère insuffisant (figure VII.4b).

	Schéma implicite	Schéma implicite	Schéma explicite
Pas de temps	$\Delta t = 10\Delta t_e$	$\Delta t = 40\Delta t_e$	$\Delta t = \Delta t_e$
Figure	VII.4a	VII.4b	-
ω	1.4	1.62	-
Nbr de relax	2	3	-
Vitesse de flamme	0.8814	0.58206	0.8994
Temps CPU	2.6	0.78	13.7
Efficacité	5.3	17.6	1

3. Schéma mixte implicite/explicite

Pour $\Delta t = 10\Delta t_e$, les termes réactifs sont traités de manière explicite sans sous-cyclage (figure VII.5a). Contrairement à ce que l'on pouvait attendre, la solution ainsi obtenue est de moins bonne qualité que celle obtenue par le schéma implicite linéarisé (figure VII.4a). Pour $\Delta t = 100\Delta t_e$ et pour 6 sous-cyclages, on se trouve juste en dessous de la limite de la stabilité ($\Delta t = 15\Delta t_e^d$), les défauts précédents sont accentués et l'efficacité de ce schéma se détériore. La solution n'est pas assez diffusée.

On a regroupé dans le tableau suivant les résultats issus de ces calculs.

	Schéma mixte	Schéma mixte
Pas de temps	$\Delta t = 10\Delta t_e$	$\Delta t = 100\Delta t_e$
Figure	VII.5a	VII.5b
ω	1.4	1.75
Nbr de relaxation	2	3
Nbr de sous-cyclage	1	6
Vitesse de flamme	0.7754	0.3200
Temps CPU	2.14	0.55
Efficacité	6.4	24.9

4. Conclusions

Par utilisation du procédé de sur-relaxation, on a pu réduire les temps de calcul d'un facteur 10 tout en conservant une solution de même qualité. Les gains réalisés par rapport à l'explicite sont compris entre 3 et 20.

Pour les petits pas de temps, l'utilisation du schéma implicite linéarisé permet, tout en gardant une solution de qualité acceptable, des gains supérieurs à 6 par rapport au schéma explicite. L'approche mixte implicite/explicite permet d'améliorer l'efficacité, mais les solutions sont de mauvaise qualité. Pour le schéma totalement implicite, la vitesse de flamme est relativement proche de celle obtenue par le schéma explicite lorsque l'on intègre dans l'ordre les termes diffusifs puis le terme réactif. Quoiqu'il en soit, cette approche par pas fractionnaires rend inévitable les oscillations de vitesse.

De par sa structure, on constate que cette approche ne permet pas d'obtenir une solution très précise pour les grands pas de temps. De plus, pour $\Delta t = 1000\Delta t_e$, l'obtention de la solution en une itération temporelle ne peut se faire.

Pour ces raisons, on est intéressé par la mise au point de méthodes implicites globales intégrant ensemble les phases diffusives et réactives. Cela fait l'objet des sections suivantes.

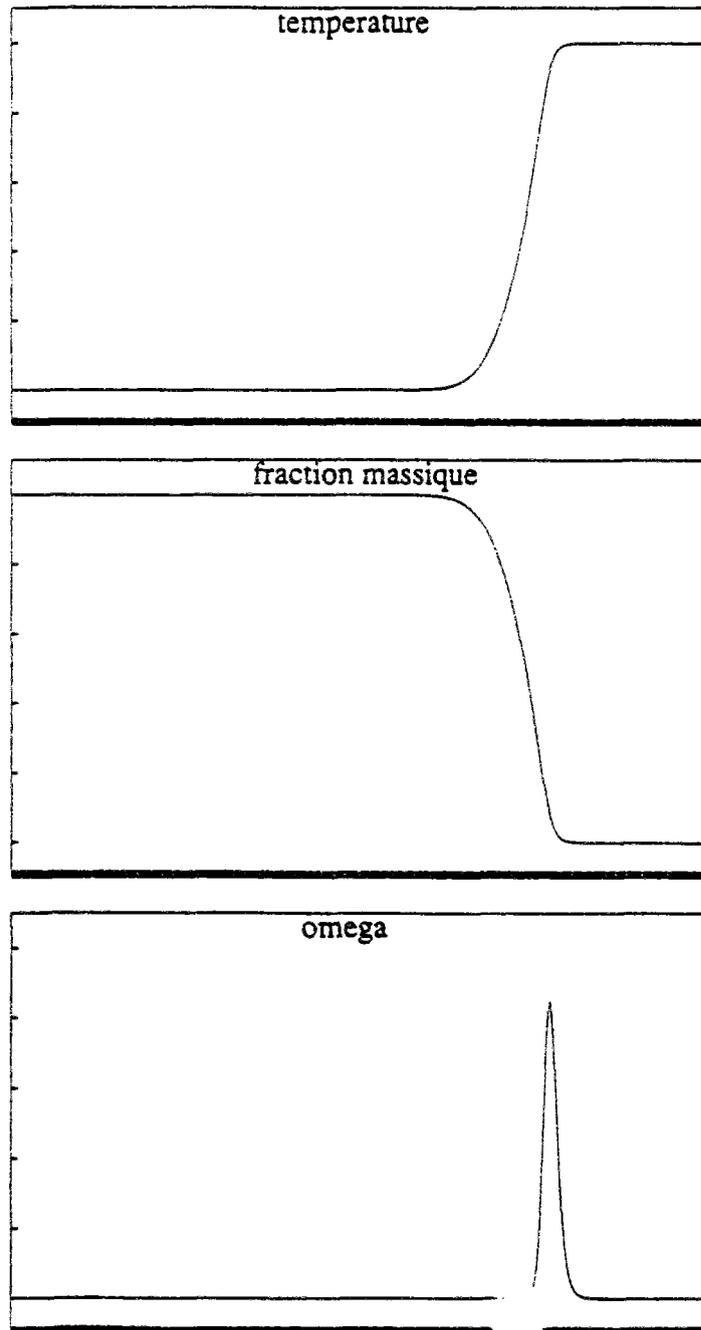
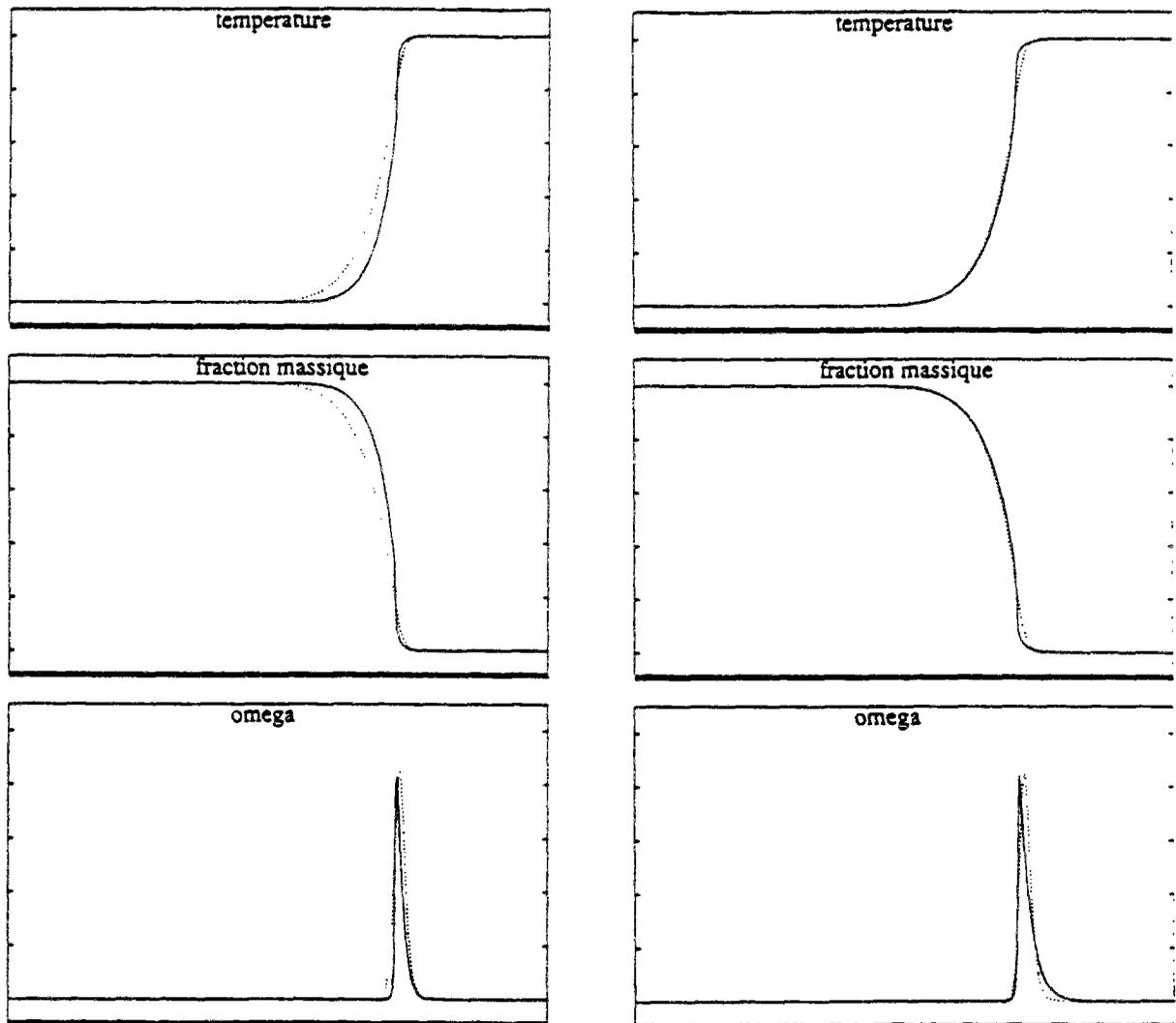


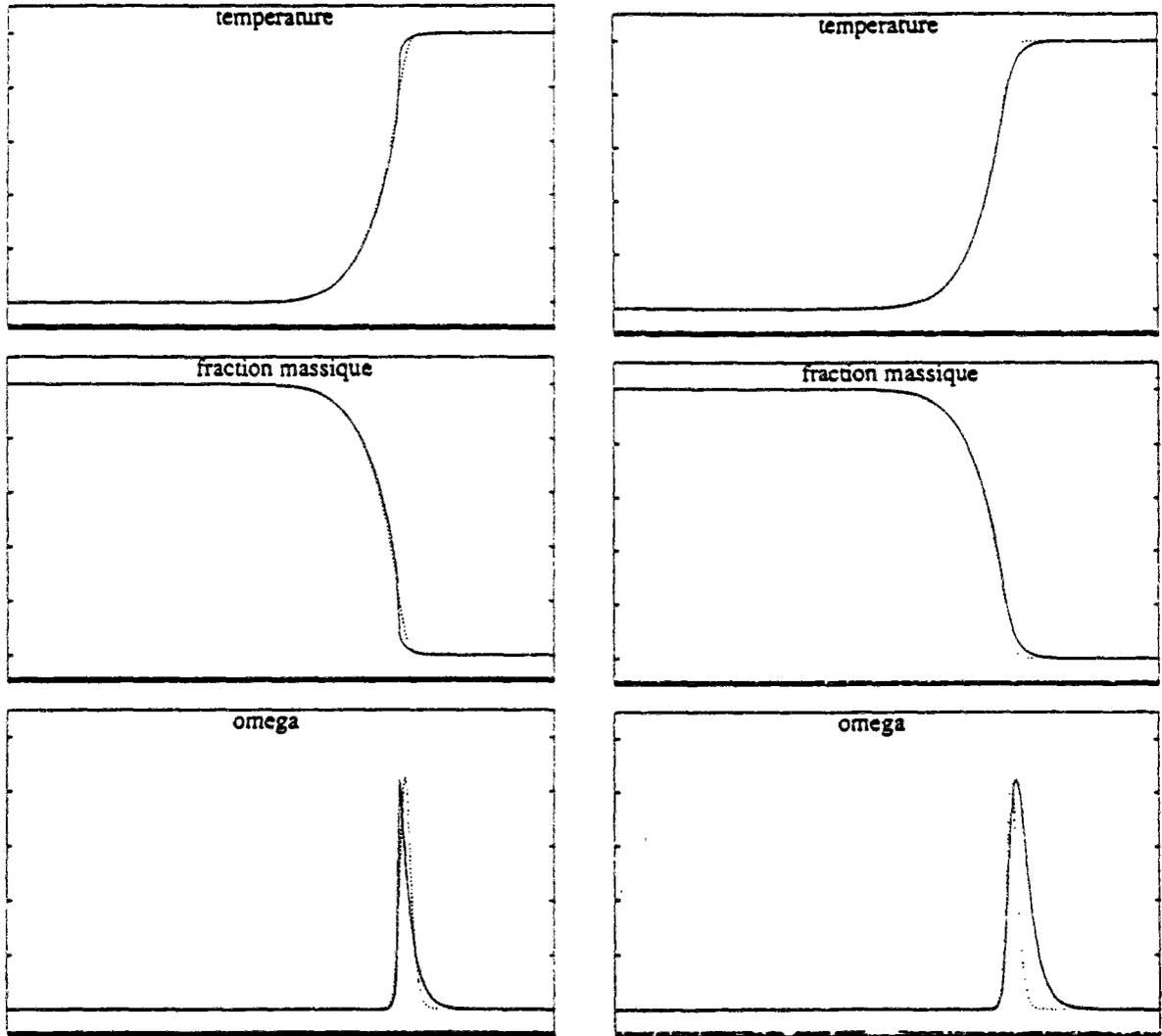
Figure VII.1 : Initialisation obtenue par le schéma explicite



a) Diffusion/Réaction
10 relaxations

b) Diffusion/Réaction
100 relaxations

Figure VII.2 : Schéma implicite de relaxation non linéaire, $\Delta t = 100\Delta t_e$



a) Diffusion Réaction

b) Réaction/Diffusion

Figure VII.3 : Schéma implicite de relaxation non linéaire, $\Delta t = 100\Delta t_e$, 3 relaxations, $\omega = 1.75$

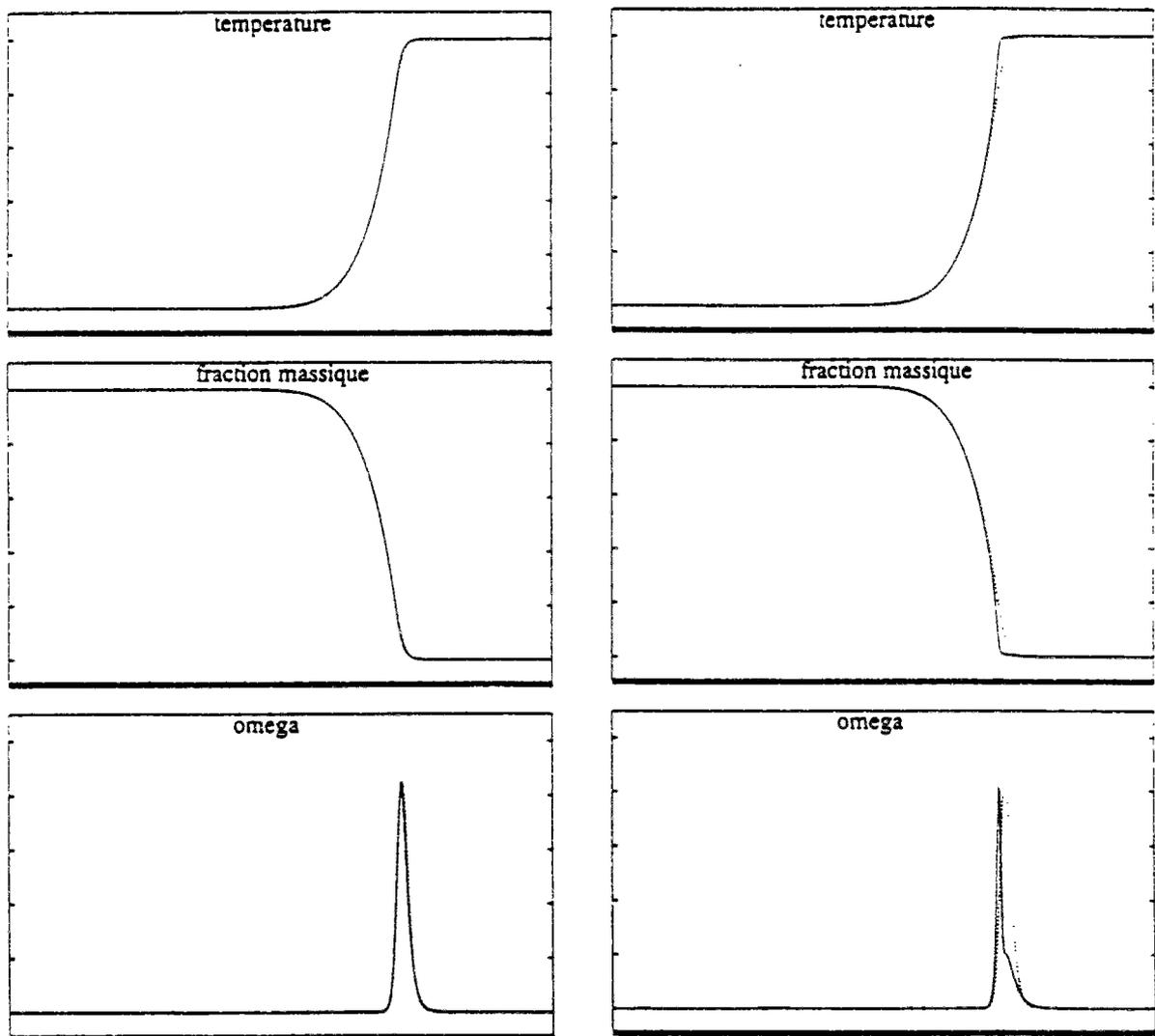
a) $\Delta t = 10\Delta t_e$ b) $\Delta t = 40\Delta t_e$

Figure VII.4 : Schéma implicite linéarisé

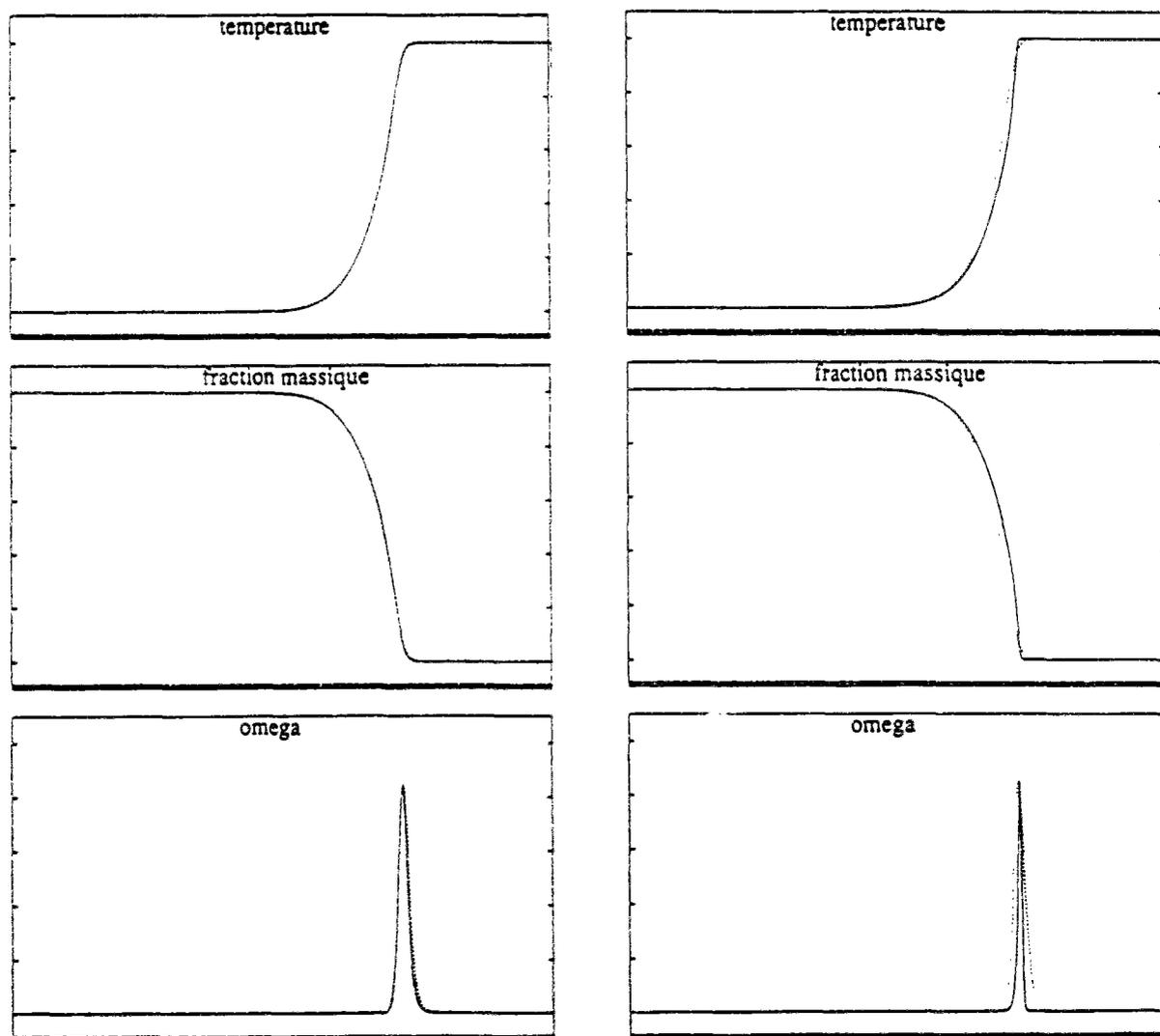
a) $\Delta t = 10\Delta t_e$ b) $\Delta t = 100\Delta t_e$

Figure VII.5 : Schéma mixte implicite-explicite

VII.3 SCHEMAS NUMERIQUES POUR LE SYSTEME COUPLE

On conserve toujours, dans l'optique d'une résolution globale équations d'Euler et équations de la combustion, une approche par pas fractionnaires: on va séparer maintenant d'une part les termes convectifs, d'autre part les termes de réaction et de diffusion. Pour ces derniers, on s'intéresse encore au système (127), que l'on va traiter dans cette partie sans séparer réaction et diffusion.

Deux types de schémas sont susceptibles de convenir.

Le premier est le schéma implicite linéarisé. L'effet stabilisateur de la diffusion peut sous certaines conditions liées à la physique du problème considéré, assurer une stabilité pour des critères moins restrictifs que pour le terme source seul. Nous verrons ce qu'il en est par la suite.

Le second schéma, le schéma implicite par relaxation non linéaire, assure quant à lui une stabilité inconditionnelle (voir chapitre 6). Pour cela, le terme source doit être pris à l'étape de relaxation $\alpha + 1$. De même que pour le précédent schéma, l'effet stabilisateur des termes diffusifs peut dans certains cas permettre de prendre le terme source à l'étape de relaxation α (on définit ainsi un schéma implicite par relaxation "linéaire"). On évite une méthode de Newton qui s'avère assez coûteuse. Les deux versions de ce schéma sont donc envisageables.

On va étudier ces différents schémas numériques et voir dans quelle mesure la stabilité reste inconditionnelle.

VII.3.1 Schéma implicite linéarisé

Pour le cas général où $Le \neq 1$, il n'est pas possible de former une équation scalaire de fraction massique (dans l'idée de ce qui a été fait précédemment). Aussi pour simplifier notre étude, on pose $Le = 1$. On se ramène ainsi à la résolution d'une équation scalaire ($Y + T = 1$):

$$Y_i^{n+1} \left[1 + \Delta t (F(1 - Y_i^n) - Y_i^n F'(1 - Y_i^n) + \frac{2}{h^2}) \right] = \frac{\Delta t}{h^2} (Y_{i+1}^{n+1} + Y_{i-1}^{n+1}) + Y_i^n [1 - \Delta t Y_i^n F'(1 - Y_i^n)]. \quad (132)$$

La stabilité du schéma sera assurée si le principe du maximum est vérifié, c'est à dire:

$$\forall n \geq 0, \forall i, \min_j Y_j^n \leq Y_i^{n+1} \leq \max_j Y_j^n$$

Pour étudier ceci, on effectue une analyse matricielle. Posons:

$$\mathcal{Y}^n = (Y_0^n, \dots, Y_i^n, \dots, Y_I^n)$$

avec $Y_0^n = Y_0^{n+1} = 1$ et $Y_I^n = Y_I^{n+1} = 0$: on impose des conditions de Dirichlet sur les bords du domaine de calcul.

Le schéma (132) s'écrit pour $i \in [0, I]$:

$$\mathcal{A}Y^{n+1} = \mathcal{B}Y^n$$

où les matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} sont définies comme suit:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ C & A_1 & C & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & C & A_{I-1} & C \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & B_1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & B_{I-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Les quantités définissant les matrices sont déterminées à partir du schéma:

$$A_i = 1 + \Delta t [F(1 - Y_i^n) - Y_i^n F'(1 - Y_i^n) + \frac{2}{h^2}]$$

$$B_i = 1 - \Delta t Y_i^n F'(1 - Y_i^n)$$

$$C = -\frac{\Delta t}{h^2}$$

Si la matrice \mathcal{A} est une M-matrice, elle est inversible et son inverse ne comporte que des coefficients positifs. Une condition nécessaire pour que le principe du maximum soit vérifié est que la positivité des espèces soit respectée. C'est à dire $\forall i, B_i \geq 0$. Soit:

$$\Delta t_{il} < \min\left[\frac{1}{Y F'(1 - Y)}\right].$$

On retrouve le critère de stabilité du schéma implicite linéarisé pour l'équation purement réactive.

Montrons que sous cette condition la matrice \mathcal{A} est une M-matrice. C'est à dire qu'elle vérifie $\forall i$:

$$\begin{cases} A_i > 0, \\ C < 0, \\ A_i + 2C > 0. \end{cases}$$

Posons $G(Y) = F(1 - Y) - Y F'(1 - Y)$, un calcul simple montre que $G(Y)$ atteint son minimum pour $Y_0 = \frac{2}{\beta + 2\delta}$. La quantité $G(Y_0)$ est alors négative et vaut:

$$G(Y_0) = -\frac{\beta}{2}(\beta + 4\delta)e^{-2}.$$

C étant négatif, la matrice \mathcal{A} est une M-matrice si la quantité suivante est positive:

$$\min_i (A_i + 2C) = 1 + \Delta t_{il} G(Y_0) > 0.$$

Sous les conditions précédemment définies (plusieurs points dans la zone de réaction et δ petit devant β), cette condition s'écrit à l'ordre 1 en $\frac{\delta}{\beta}$:

$$1 - \frac{1}{e} \left(1 - \frac{\delta}{\beta}\right) > 0.$$

Pour les valeurs numériques utilisées, cette quantité est bien positive puisque l'on a:

$$1 - \frac{1}{e} \left(1 - \frac{\delta}{\beta}\right) = 0.66.$$

Montrons maintenant que sous le critère de stabilité précédent (positivité de Y) le principe du maximum est toujours vérifié.

Posons $\mathcal{C} = \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}$, la matrice \mathcal{C} n'a que des coefficients positifs en vertu de ce qui précède. Posons U le vecteur de composantes égal à 1. $\forall i \in [0, I]$, on a $2C + A_i > B_i$. Par conséquence, on a: $\mathcal{A}U \geq \mathcal{B}U$ et donc $U \geq \mathcal{C}U$, soit $\forall i, \sum_j C_{ij} \leq 1$. Alors, puisque $Y_i^{n+1} = \sum_j C_{ij} Y_j^n$:

$$\forall i, 0 \leq Y_i^{n+1} \leq \max_j Y_j^n,$$

ce qui achève la démonstration.

Remarque:

Numériquement, on observe que ce schéma implicite linéarisé est stable pour des valeurs du pas de temps largement supérieures à Δt_{il} . Ceci provient du fait que cette étude nous donne une condition de stabilité suffisante et non nécessaire; de plus on ne prend pas en compte certaines caractéristiques physiques du problème considéré à savoir par exemple que Y est une fonction monotone. Pour ce schéma, l'étude de stabilité tenant compte de cette remarque ne peut pas être réalisée.

Dans la pratique, la résolution de ce schéma se fait par une méthode itérative. Aussi on peut utiliser un procédé de sur-relaxation pour améliorer la convergence. Une étude identique à celle déjà réalisée pour les termes diffusifs seuls donne:

$$\omega_{opt}(i) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(i)}}, \text{ avec } \rho(i) = \frac{2\mu}{A(i)} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right).$$

ou $\mu = \frac{\Delta t}{h^2}$, $A(i) = 1 + \Delta t[F(1 - Y_i^n) - Y_i^n F'(1 - Y_i^n) + \frac{2}{h^2}]$ et I le nombre de points de la discrétisation spatiale.

Contrairement au problème de diffusion pure, on définit ici un paramètre de sur-relaxation optimal pour chaque point i du maillage.

VII.3.2 Schéma implicite par relaxation

Ce schéma a déjà été présenté en détail pour résoudre le problème linéaire de diffusion pure. De même que pour l'étude précédente, on prend pour simplifier $Le = 1$ afin de former une équation scalaire ($T = 1 - Y$).

On prend un algorithme itératif de type Gauss-Seidel. Pour un balayage dans le sens croissant des noeuds, le schéma implicite par relaxation non linéaire s'écrit:

$$\begin{cases} \forall \alpha > 0 : \\ Y_i^{\alpha+1} \left(1 + \Delta t \frac{2}{h^2}\right) = Y_i^n + \frac{\Delta t}{h^2} (Y_{i+1}^\alpha + Y_{i-1}^{\alpha+1}) - \Delta t Y_i^{\alpha+1} F(1 - Y_i^{\alpha+1}), \\ Y_i^0 = Y_i^n. \end{cases}$$

Ce schéma assure une stabilité inconditionnelle (voir chapitre 6), mais il présente l'inconvénient d'avoir pour chaque point et pour chaque étape de relaxation un système non linéaire à résoudre qui rend la méthode coûteuse. L'étude numérique à venir confirme ceci, du moins pour la recherche de la solution instationnaire.

Le système non linéaire étant ponctuel, on le résout dans la pratique en utilisant une méthode de Newton.

Pour les mêmes raisons que précédemment (effet stabilisateur des termes diffusifs), on peut penser que ce schéma de relaxation "linéaire" (terme source pris à l'étape de relaxation α) peut assurer sous certaines conditions une stabilité inconditionnelle. On évite ainsi la résolution coûteuse du système non linéaire.

Ce nouveau schéma s'écrit alors sous les mêmes hypothèses (algorithme de Gauss-Seidel et balayage dans le sens croissant des noeuds):

$$\begin{cases} \forall \alpha > 0 : \\ Y_i^{\alpha+1} \left(1 + \Delta t \frac{2}{h^2}\right) = Y_i^n + \frac{\Delta t}{h^2} (Y_{i+1}^\alpha + Y_{i-1}^{\alpha+1}) - \Delta t Y_i^\alpha F(1 - Y_i^\alpha), \\ Y_i^0 = Y_i^n. \end{cases}$$

L'intérêt premier de ce type de schéma, en version linéaire, est qu'il évite, contrairement au schéma implicite linéarisé, le calcul des matrices Jacobiennes et le stockage des matrices implicites.

Il est immédiat que ce schéma n'est pas inconditionnellement stable pour un problème très général.

Sous l'hypothèse de monotonie, étudions si ce schéma (écrit avec un algorithme de Jacobi) permet d'obtenir la positivité des espèces. Pour les grands pas de temps ($\Delta t \rightarrow \infty$), le schéma s'écrit:

$$2Y_i^{\alpha+1} = Y_{i-1}^\alpha + Y_{i+1}^\alpha - h^2 Y_i^\alpha F(1 - Y_i^\alpha).$$

Une analyse matricielle directe montre que ce schéma ne préserve pas la positivité et donc est instable. Mais si l'on suppose que Y est une fonction monotone et si de plus cette monotonie est respectée au cours de chaque relaxation, on peut alors obtenir une condition de positivité

suffisante.

Prenons par exemple $Y_{i-1}^\alpha > Y_i^\alpha$ (on suppose la fraction massique Y décroissante) et $Y_{i+1} > 0$. La condition de positivité qui s'écrit $\forall \alpha, Y_i^{\alpha+1} > 0$ est vérifiée si:

$$\forall Y \in [0, 1], h^2 F(1 - Y) - 1 < 0$$

Or $\max[F(1-Y)] = \frac{\beta^2}{2}$. Donc l'inégalité précédente sera vérifiée si $h\beta \leq \sqrt{2}$. Ceci s'écrit aussi $h \leq \frac{\sqrt{2}}{2} L_r$, où L_r représente la largeur de la zone de réaction. On voit que sous l'hypothèse définie précédemment, à savoir quatre points dans la zone de réaction, ces inégalités sont vérifiées.

Remarque:

Cette hypothèse de monotonie de la fraction massique peut paraître sévère. Mais en pratique, ce schéma s'est effectivement avéré stable pour les pas de temps extrêmes que l'on a considérés ($\Delta t = 1000\Delta t_e$).

De même que pour les termes diffusifs seuls, un procédé de sur-relaxation peut accélérer la vitesse de convergence de ce schéma en version linéaire ou non. Cependant, la détermination du paramètre optimal est ici plus complexe et moins précise. En effet, l'analyse matricielle qui permet de déterminer le paramètre ne peut (pour des raisons de stabilité) se faire que sur le schéma en version non linéaire et de plus, cette analyse doit supposer $F(1 - Y) = Cste$. On pose comme cela a déjà été fait:

$\mu = \frac{\Delta t}{h^2}$ et I le nombre de points de la discrétisation spatiale.

L'analyse matricielle (avec condition de Dirichlet sur les bords) donne pour le paramètre optimal de sur-relaxation ω_{opt} :

$$\omega_{opt}(i) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(i)}}, \text{ avec } \rho(i) = \frac{2\mu}{1 + 2\mu(1 + 0.5h^2 F(1 - Y_i))} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right)$$

VII.3.3 Résultats numériques

On souhaite dans cette partie, valider les résultats théoriques précédents et voir comment évoluent les solutions par rapport aux schémas déjà présentés. On reprend les mêmes cas-tests.

1. Schéma implicite linéarisé

L'analyse théorique n'a permis de déterminer qu'une condition suffisante de stabilité de ce schéma. Numériquement, on a vérifié la stabilité pour $\Delta t < 250\Delta t_e$. Les résultats obtenus par ce schéma sont représentés dans le tableau ci-dessous. Contrairement aux schémas précédents, où le paramètre de sur-relaxation était global, le gain obtenu ici par sur-relaxation est moins

sensible. En effet, le paramètre de sur-relaxation étant local, il est nécessaire de le calculer à chaque itération et ceci pour chaque point. Cependant, le gain réalisé reste important et le paramètre défini théoriquement semble effectivement être le paramètre optimal.

Pour $\Delta t \leq 100\Delta t_e$ les solutions ainsi obtenues permettent un gain allant jusqu'à 14 par rapport à l'explicite. Les solutions sont de très bonne qualité et on n'observe pas de différence par rapport à la solution de référence.

A la limite de stabilité, ce gain passe à 27 mais alors la diffusion du schéma implicite détériore la précision de la solution (figure VII.6) qui reste cependant acceptable.

On peut ici faire une remarque sur les résultats obtenus. La zone de réaction ayant une épaisseur de $2/\beta$, et la vitesse de flamme valant approximativement 1, le temps nécessaire pour que la flamme se propage sur une distance égale à l'épaisseur de la zone de réaction vaut $t_0 = \frac{2}{\beta} = 0.2 \simeq 200\Delta t_e$. On peut alors penser que les schémas implicites (linéarisés ou non) donneront des solutions peu diffusées si le pas de temps n'excède pas cette valeur t_0 . Ceci est assez bien vérifié numériquement.

Remarque:

Pour les petits pas de temps, l'utilisation d'un paramètre de sur-relaxation global permet de réduire encore plus les temps de calcul. Mais cela nécessite l'ajustement du paramètre. Aussi préfère-t-on la procédure locale (par point) définie précédemment.

Pas de temps	$\Delta t = 10\Delta t_e$		$\Delta t = 100\Delta t_e$		$\Delta t = 200\Delta t_e$
	non	oui	non	oui	oui
Sur-relaxation	non	oui	non	oui	oui
Figure	-	-	-	-	VII.6
Nbr de relax	20	2	200	8	10
Résidu	$5 \cdot 10^{-4}$	$7 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-3}$
Vitesse de flamme	0.9008	0.9009	0.8802	0.8801	0.7867
Temps CPU	14.5	4.4	12.9	0.95	0.5
Efficacité	0.94	3.1	1.1	14.4	27.4

2. Schéma implicite par relaxation

En version linéaire, les résultats sont présentés dans le tableau ci-dessous. Aucune limite de stabilité n'a été constatée pour les pas de temps utilisés. Le paramètre de sur-relaxation est déterminé pour chaque point et pour chaque étape de relaxation. Les solutions obtenues sont de qualité équivalente à celles obtenues par le schéma implicite linéarisé. Par contre, ce schéma est plus diffusif puisqu'il donne une vitesse de flamme supérieure. Les gains réalisés sont moins importants.

Pas de temps	$\Delta t = 10\Delta t_e$		$\Delta t = 100\Delta t_e$		$\Delta t = 1000\Delta t_e$	
	non	oui	non	oui	non	oui
Sur-relaxation	non	oui	non	oui	non	oui
Figure	-	-	-	-	VII.7a	VII.7b
Nbr de relax	20	2	200	8	1000	30
Résidu	$5 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$
Vitesse de flamme	0.9012	0.9022	0.9170	0.9173	1.1390	1.1404
Temps CPU	25.3	5.5	24.6	1.9	12.4	0.7
Efficacité	0.54	2.5	0.55	7.2	1.1	19.6

En accord avec l'argument précédent, on observe qu'une précision acceptable des résultats n'est encore obtenue que pour les valeurs du pas de temps inférieures à $200\Delta t_e$.

Passons maintenant au schéma de relaxation non linéaire. Par rapport au schéma en version linéaire, il n'y a pas de modification notable de la convergence de la phase de relaxation. Les solutions sont équivalentes pour un coût bien évidemment supérieur. Les vitesses de flammes sont légèrement supérieures, ce qui laisse penser que ce schéma est plus diffusif. Les résultats sont présentés en utilisant la procédure de sur-relaxation (voir le tableau ci-dessous).

Pas de temps	$\Delta t = 10\Delta t_e$	$\Delta t = 100\Delta t_e$	$\Delta t = 1000\Delta t_e$
Sur-relaxation	oui	oui	oui
Nbr de relax	2	8	30
Résidu	$4.6 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$
Vitesse de flamme	0.9019	0.9175	1.145
Temps CPU	15.5	6.3	2.3
Efficacité	0.9	2.2	6

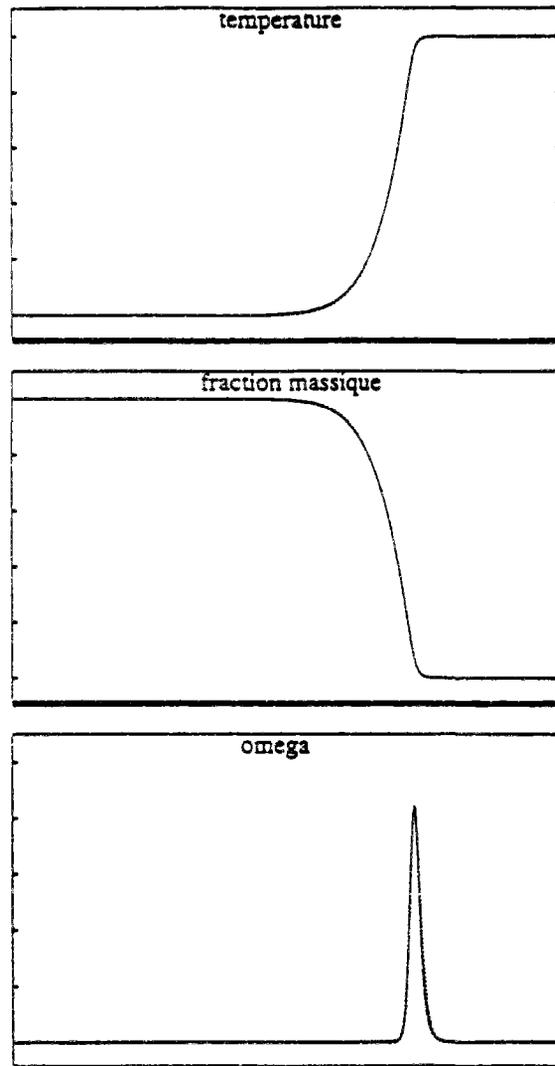
VII.3.4 Conclusion

Il ressort de cette étude que l'utilisation de la procédure automatique de sur-relaxation est très intéressante puisque dans certains cas elle permet de réduire par 10 les temps de calcul.

Bien que sa stabilité ne soit pas démontrée, le schéma implicite linéarisé s'avère le plus performant pour des pas de temps allant jusqu'à $200\Delta t_e$. Au delà, l'utilisation du schéma implicite par relaxation (en version linéaire) est nécessaire. La mauvaise qualité de la solution pour les grands pas de temps est inhérente à l'utilisation des schémas implicites. Ce schéma semble par contre très intéressant pour la recherche d'une solution stationnaire.

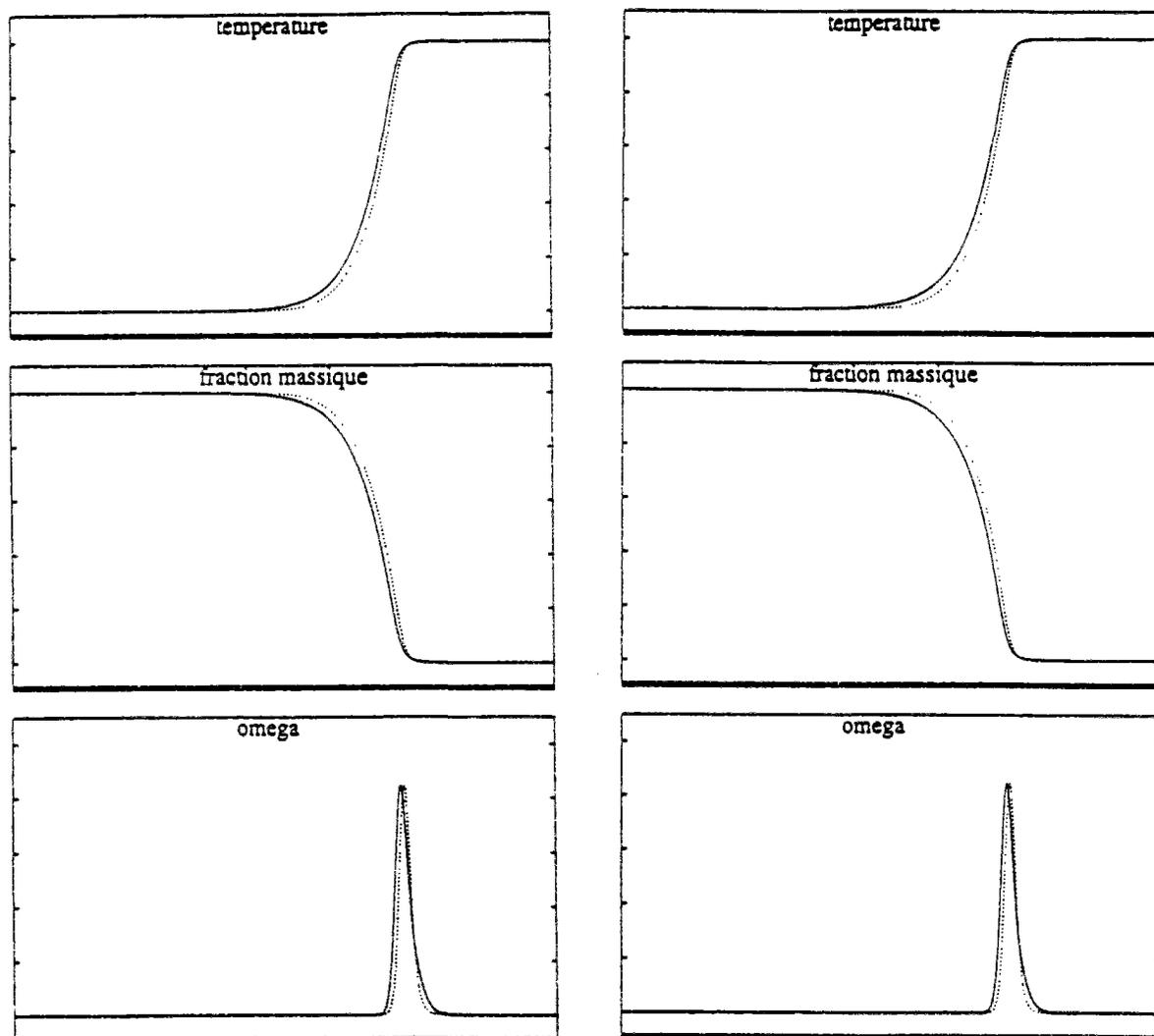
Pour le problème considéré, une approche globale couplant la résolution des termes diffusifs et des termes sources s'avère nécessaire pour l'obtention d'une solution de bonne qualité.

Il reste à voir sur le problème complet Euler-Combustion comment se comporte ce type de schéma à pas fractionnaires.



Avec sur-relaxation

Figure VII.6 : Schéma implicite linéarisé, $\Delta t = 200\Delta t_c$



a) Sans sur-relaxation

b) Avec sur-relaxation

Figure VII.7 : Schéma implicite par relaxation linéaire, $\Delta t = 1000\Delta t_e$

VII.4 APPLICATION A LA RESOLUTION DES ECOULEMENTS REACTIFS

VII.4.1 Introduction

On se propose dans ce qui suit d'étudier la propagation monodimensionnelle d'une flamme mince dans un fluide compressible. On s'intéresse plus particulièrement à une classe de problèmes où l'écoulement fluide est en régime subsonique à nombre de Mach voisin de 0.5. Pour cette classe de problèmes, les critères de stabilité des termes diffusifs et réactifs sont prédominants devant ceux obtenus pour les termes convectifs et acoustiques. Aussi, pour la recherche de la solution instationnaire, une méthode à pas fractionnaires est envisageable. Les termes hydrodynamiques sont traités par un schéma explicite tandis que les termes propres à la combustion (réaction, diffusion) sont traités par un schéma implicite ou par sous-cyclage en conservant une approche explicite.

En suivant cette idée, on souhaite donc étudier dans quelle mesure les schémas numériques implicites présentés précédemment sont utilisables et évaluer s'ils permettent d'obtenir un gain en temps de calcul par rapport à un schéma totalement explicite.

VII.4.2 Equation d'un mélange gazeux réactif à 2 espèces

On considère un écoulement monodimensionnel réactif comportant deux espèces R et P avec la réaction chimique simple:



On note:

Y : fraction massique de R (réactant).

$1 - Y$: fraction massique de P (produit de réaction).

R le réactant et P le produit de la réaction sont supposés avoir les mêmes caractéristiques physiques, notamment la même masse molaire ($m = m_R = m_P$) et la même chaleur spécifique à pression constante ($C_p = C_p^R = C_p^P$).

Les équations adimensionnées traduisant les lois de conservation s'écrivent alors (voir par exemple [31] ou le chapitre 4):

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ e_t + [u(e + p)]_x = \frac{\Delta T}{Ma^2 PR(\gamma - 1)} + Q\Omega \\ (\rho Y)_t + (\rho Y)_x = \frac{\Delta Y}{LePR} - \Omega \end{array} \right. \quad (133)$$

Avec les équations de fermeture:

$$\begin{cases} p = \frac{\rho T}{\gamma Ma^2} \\ e = \frac{1}{2}\rho u^2 + \frac{p}{\gamma - 1} \\ \Omega = \mathcal{A}\rho Y \exp\left(\frac{-\varepsilon_a}{T}\right) \end{cases}$$

Pour avoir une idée de la structure de la flamme issue du système (133), on utilise les résultats tirés du modèle isobare présentés au chapitre 1. On suppose que les gaz frais sont en $x = -\infty$ (à gauche), avec $T = T_u$ et $Y = Y_u$. En $x = +\infty$ (à droite), on a les gaz brûlés définis par $T = T_b$ et $Y = Y_b = 0$. On suppose que tous les gaz frais sont brûlés par la réaction chimique. On pose le nombre de Zeldovich $\beta = \frac{\varepsilon_a(T_b - T_u)}{T_b^2}$; on arrive alors aux résultats suivants exprimés à l'aide des variables adimensionnées:

$$\begin{cases} T_b = T_u + Ma^2(\gamma - 1)QY_u, \\ V_f = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{2\mathcal{A}LeT_u}{PRT_b\rho_u}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_a}{2T_b}\right), \\ L_f = \frac{1}{V_f PR\rho_u}. \end{cases} \quad (134)$$

où V_f représente la vitesse d'avancement du front de flamme et L_f représente l'épaisseur de la flamme. La largeur de la zone de réaction L_r vaut approximativement $\frac{2L_f}{\beta}$.

On va présenter maintenant l'approche à pas fractionnaires adoptée pour résoudre le système (133).

VII.4.3 Schéma explicite pour la partie Euler et la convection de l'espèce

Le système traitant les équations d'Euler et la convection de l'espèce s'obtient simplement en supprimant dans (133) les termes diffusifs et le terme source.

La résolution numérique est alors classique, elle utilise une formulation variationnelle basée sur la méthode des volumes finis (voir [26]). Le schéma utilisé est un schéma explicite, les flux convectifs sont traités par un flux numérique de Roe [57]. Le second ordre en temps est obtenu en utilisant un schéma prédicteur-correcteur, on obtient l'ordre deux spatialement en effectuant une interpolation linéaire des variables sur chaque intervalle $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ noté cellule C_i .

Une analyse linéaire permet simplement de déterminer la condition de stabilité. On note Δt le pas de temps, $c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$ la vitesse locale du son et h le pas spatial du maillage. On obtient

alors la stabilité sous la condition suivante:

$$\frac{\Delta t}{h} \max(|u+c|, |u|, |u-c|) \leq 1.$$

VII.4.4 Schéma explicite par sous-cyclage pour la diffusion et la réaction

L'étude réalisée sur le modèle thermodiffusif isobare a montré qu'une approche explicite pour les termes diffusifs et réactifs est en général moins performante qu'une approche implicite. Cependant, le système que l'on doit résoudre est plus complexe (absence de relation entre Y et T) et les gains en temps de calcul que l'on a mis en évidence ont été obtenus avec une compilation scalaire des codes numériques. Les schémas explicites se vectorisant mieux que les schémas implicites, une compilation vectorielle réduit ce gain. Pour ces différentes raisons, on va notamment étudier la résolution du système (133) par un schéma explicite avec sous-cyclage pour les termes diffusifs et réactifs. On résout tout d'abord la partie Euler telle que nous l'avons définie précédemment; notons Δt_e le pas de temps utilisé. On suppose alors la masse volumique ρ et la vitesse u constantes. Puis on résout le système suivant par n étapes explicites.

$$\begin{cases} e_t = \frac{\Delta T}{Ma^2 PR(\gamma - 1)} + Q \Omega, \\ Y_t = \frac{\Delta Y}{\rho Le PR} - \frac{\Omega}{\rho}. \end{cases} \quad (135)$$

Avec:

$$\Omega = A\rho Y \exp\left(\frac{-\varepsilon_a}{T}\right)$$

Notons Δt le pas temporel utilisé, alors $\Delta t_e = n\Delta t$

Une analyse de stabilité linéaire donne pour le système (135) lorsqu'il est résolu par un schéma explicite (voir [31] ou chapitre 4):

-Termes diffusifs:

$$\frac{2\Delta t}{h^2} \max\left(\frac{\gamma}{\rho PR}, \frac{1}{\rho PR Le}\right) \leq 1,$$

-Terme source:

$$\Delta t \leq \max \frac{1}{A \exp\left(\frac{-\varepsilon_a}{T}\right)}.$$

VII.4.5 Schémas implicites pour la diffusion et la réaction

Pour cette méthode, on va écrire l'équation de conservation de l'énergie en fonction de la température T et des variables hydrodynamiques u et ρ . On suppose que seules la température T et la fraction massique du réactant Y sont affectées par la réaction, c'est-à-dire que

l'on calcule les effets réactifs et diffusifs sur T et Y en supposant les autres variables (u et ρ) gelées. Moyennant ces hypothèses, le système à résoudre en température et fraction massique s'écrit:

$$\begin{cases} T_t = \frac{\gamma \Delta T}{\rho PR} + \frac{Q\gamma(\gamma-1)Ma^2}{\rho} \Omega \\ Y_t = \frac{\Delta Y}{\rho Le PR} - \frac{\Omega}{\rho} \end{cases}$$

Avec:

$$\Omega = A\rho Y \exp\left(\frac{-\varepsilon_a}{T}\right)$$

Remarques:

Ce modèle de combustion n'est pas tout à fait équivalent au modèle isobare étudié dans les sections précédentes. En effet, bien que faisant apparaître les effets de diffusion-réaction tirés des équations de l'énergie et de la conservation de l'espèce, l'hypothèse de pression constante n'est plus vérifiée. Cela se traduit par la présence de γ qui se trouve en facteur dans l'équation de température.

Si $\gamma Le = 1$, il existe (comme c'était le cas sur le modèle isobare pour $Le = 1$) une relation simple liant la température à la fraction massique:

$$T + Q\gamma(\gamma-1)Ma^2 Y = Cste$$

On peut donc se ramener à l'étude d'une équation scalaire. Par conséquent, toutes les études effectuées précédemment, notamment les études de stabilité des différents schémas implicites, peuvent être réalisées de la même façon pour ce cas particulier.

L'hypothèse $\gamma Le = 1$ n'étant pas vérifiée en pratique, on va présenter sur le système et non sur une équation scalaire la procédure de sur-relaxation adoptée.

Par souci de simplification, on ne présente la discrétisation que pour les points intérieurs au domaine de calcul; on rappelle que sur les bords on impose des gradients de température et de fraction massique nuls et qu'aucun procédé de sur-relaxation n'est utilisé (voir section 2).

1. Schéma implicite linéarisé

Posons \mathcal{I} la matrice identité et:

$$W_i^n = \begin{pmatrix} T_i^n \\ Y_i^n \end{pmatrix}, \quad \mathcal{K} = \begin{bmatrix} \frac{\gamma}{\rho PR} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho Le PR} \end{bmatrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} \frac{Q\gamma(\gamma-1)Ma^2}{\rho} \Omega_i^n \\ -\frac{1}{\rho} \Omega_i^n \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} \frac{\mathcal{Q}\gamma(\gamma-1)Ma^2}{\rho} \frac{\partial \Omega_i^n}{\partial T_i^n} & \frac{\mathcal{Q}\gamma(\gamma-1)Ma^2}{\rho} \frac{\partial \Omega_i^n}{\partial Y_i^n} \\ -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \Omega_i^n}{\partial Y_i^n} & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \Omega_i^n}{\partial T_i^n} \end{bmatrix}.$$

Alors le système discrétisé s'écrit:

$$[\mathcal{I} + \Delta t(\frac{2}{h^2}\mathcal{K} - \mathcal{J})]W_i^{n+1} = W_i^n + \frac{\Delta t}{h^2}\mathcal{K}(W_{i-1}^{n+1} + W_{i+1}^{n+1}) - \Delta t\mathcal{J}W_i^n + \Delta t\mathcal{S}^n. \quad (136)$$

On résout ce système linéaire par une méthode itérative du type Gauss-Seidel. Notons par α l'étape de relaxation, l'algorithme de résolution s'écrit en supposant un balayage dans le sens croissant des noeuds:

$$\begin{cases} \forall \alpha > 0: \\ [\mathcal{I} + \Delta t(\frac{2}{h^2}\mathcal{K} - \mathcal{J})]W_i^{\alpha+1} = \frac{\Delta t}{h^2}\mathcal{K}(W_{i-1}^{\alpha+1} + W_{i+1}^{\alpha}) + \mathcal{T}^n, \\ W_i^0 = W_i^n. \end{cases}$$

\mathcal{T}^n représente l'ensemble des termes du membre de droite de (136) n'évoluant pas au cours de la résolution.

Il est possible d'accroître la convergence de la méthode itérative par un procédé de sur-relaxation. La détermination du paramètre optimal de sur-relaxation telle qu'elle a été présentée dans la section précédente, pour un système linéaire, nécessite la détermination du rayon spectral de la matrice reliant l'étape de relaxation α à l'étape de relaxation $\alpha + 1$ pour un algorithme de Jacobi.

La détermination du paramètre de sur-relaxation est techniquement possible mais elle est très coûteuse: on est amené en effet à résoudre des équations du second degré pour chaque point du maillage.

On préfère alors définir un paramètre propre à chacune des deux équations en effectuant quelques simplifications. On considère tout d'abord un algorithme de résolution de type Jacobi, notons par l'indice α l'étape de relaxation. On s'intéresse alors à la résolution du système linéaire défini par:

$$\begin{cases} a_{11}T_i^{\alpha+1} + a_{12}Y_i^{\alpha+1} = b_1(T_{i+1}^{\alpha} + T_{i-1}^{\alpha}), \\ a_{21}T_i^{\alpha+1} + a_{22}Y_i^{\alpha+1} = b_2(Y_{i+1}^{\alpha} + Y_{i-1}^{\alpha}). \end{cases}$$

avec a_{ij} les composantes de la matrice $\mathcal{I} + \Delta t(\frac{2}{h^2}\mathcal{K} - \mathcal{J})$, $b_1 = \frac{\Delta t\gamma}{\rho PRh^2}$ et $b_2 = \frac{\Delta t}{\rho LePRh^2}$.

Après inversion de ce système et en supprimant le terme $Y_{i-1}^{\alpha} + Y_{i+1}^{\alpha}$ dans l'équation donnant $T_i^{\alpha+1}$ (resp. en supprimant $T_{i-1}^{\alpha} + T_{i+1}^{\alpha}$ dans l'équation donnant $Y_i^{\alpha+1}$), on se ramène à deux équations scalaires du types de celles déjà traitées. On définit alors un paramètre de sur-

relaxation optimal pour la température et pour la fraction massique. On a :

$$\omega_{opt}(T_i) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(T_i)}}, \text{ avec } \rho(T_i) = \frac{2b_1 a_{22}}{a_{22}a_{11} - a_{12}a_{21}} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right).$$

$$\omega_{opt}(Y_i) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(Y_i)}}, \text{ avec } \rho(Y_i) = \frac{2b_2 a_{11}}{a_{22}a_{11} - a_{12}a_{21}} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right).$$

2. Schéma implicite par relaxation non linéaire

Pour ce, on résout le schéma totalement implicite en décrivant un algorithme de relaxation non linéaire. On suppose un balayage dans le sens croissant des noeuds, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall \alpha > 0 : \\ T_i^{\alpha+1} \left(1 + 2 \frac{\Delta t \gamma}{h^2 \rho P R}\right) = T_i^\alpha + \frac{\Delta t \gamma}{h^2 \rho P R} (T_{i-1}^{\alpha+1} + T_{i+1}^\alpha) + \Delta t \frac{Q \gamma (\gamma - 1) M a^2}{\rho} \Omega_i^{\alpha+1}, \\ T_i^0 = T_i^n, \\ Y_i^{\alpha+1} \left(1 + 2 \frac{\Delta t}{h^2 \rho L e P R}\right) = Y_i^\alpha + \frac{\Delta t}{h^2 \rho L e P R} (Y_{i-1}^{\alpha+1} + Y_{i+1}^\alpha) - \frac{\Delta t}{\rho} \Omega_i^{\alpha+1}, \\ Y_i^0 = Y_i^n. \end{array} \right. \quad (137)$$

Le système non linéaire ainsi défini est résolu par une méthode de Newton, et ce pour chaque point i du maillage. De même que pour l'étude précédente, on peut par utilisation d'une procédure de sur-relaxation accroître la convergence de la phase de relaxation. Comme pour le schéma implicite linéarisé, on va définir de manière approchée un paramètre optimal pour la température et pour la fraction massique en réécrivant le système (137) sous une autre forme. Pour l'équation en température, on écrit de manière simplifiée $\Omega_i^{\alpha+1} = T_i^{\alpha+1} \frac{\Omega_i^\alpha}{T_i^\alpha}$

en supposant le rapport $\frac{\Omega_i^\alpha}{T_i^\alpha}$ constant. Une démarche identique est utilisée pour l'équation de fraction massique. On se ramène alors à l'écriture de deux équations linéaires du même type que celles présentées pour le schéma précédent. On obtient directement les paramètres de sur-relaxation optimaux :

$$\omega_{opt}(T_i) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(T_i)}} \text{ et } \omega_{opt}(Y_i) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(Y_i)}}$$

avec :

$$\rho(T_i) = \frac{2 \Delta t \gamma}{h^2 \rho P R + \Delta t (2 \gamma - h^2 P R Q \gamma (\gamma - 1) M a^2 \frac{\Omega}{T_i})} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right)$$

$$\rho(Y_i) = \frac{2 \Delta t}{h^2 \rho L e P R + \Delta t (2 + h^2 L e P R \frac{\Omega}{\rho Y_i})} \cos\left(\frac{\pi}{I}\right)$$

En toute logique, il convient de déterminer pour chaque point et pour chaque relaxation les paramètres précédemment définis en les calculant à partir des valeurs obtenues à l'étape de

relaxation précédente. Cette procédure donne de meilleures convergences, mais elle s'avère très coûteuse. Aussi on préfère définir ces paramètres pour chaque itération en temps et pour chaque point (comme c'est le cas pour le schéma implicite linéarisé). On réduit ainsi le temps de calcul.

3. Schéma implicite par relaxation "linéaire"

Ce schéma est le même que le précédent, mis à part le terme source qui, pour rendre le schéma linéaire, est pris à l'étape de relaxation α . La procédure de sur-relaxation utilise le même paramètre que celui défini pour le schéma par relaxation non linéaire.

VII.4.6 Paramètres numériques

Pour les différents essais numériques réalisés, on étudie la propagation d'une flamme dans un milieu clos aux parois non catalytiques et adiabatiques. Le fluide est supposé initialement au repos et à pression constante.

On choisit les quantités définissant la flamme de façon à obtenir un écoulement fluide en régime subsonique. On prend alors le nombre de Mach de référence $Ma = 1$.

On choisit arbitrairement la largeur de la flamme $L_f = 0.2$ et le nombre de Zeldovich $\beta = 10$. Dans ces conditions, la largeur de la zone de réaction, définie à partir du modèle isobare, est $L_r = 0.04$. Si on choisit 4 points dans la zone de réaction, le pas spatial doit être alors de $h = 0.01$. On se fixe aussi $T_u = 1$, $T_b = 5$, $Y_u = 1$ ainsi que $Le = 1$ et $\rho_u = 1.3$. On choisit une vitesse de flamme de $V_f = 0.2$.

Les quantités Q , PR et \mathcal{A} sont alors calculées par les relations présentées au chapitre 4.

Les paramètres adimensionnés utilisés pour cette expérience sont regroupés dans le tableau ci dessous:

β	T_u	T_b	ρ_u	Le	PR	ε_a	Y_u	Qh	\mathcal{A}
10	1	5	1.3	1	19.2	62.5	1	10	6.7110^7

A noter que pour cette expérience, la vitesse du fluide étant initialement nulle et la pression étant constante, c'est l'action combinée de la diffusion et de la réaction qui génère le mouvement du fluide.

VII.4.7 Résultats numériques

La mesure de la vitesse de flamme en fonction du temps permet de déterminer l'aptitude des différents schémas numériques à suivre un phénomène instationnaire.

Cette vitesse est calculée simplement par intégration entre deux instants t et $t + \Delta t$ de la fraction massique du réactant. On a:

$$V_f(t) = \frac{1}{\Delta t} \left(\int Y(x, t + \Delta t) dx - \int Y(x, t) dx \right) .$$

Tous les temps de calcul présentés par la suite ont été obtenus avec une compilation vectorielle des codes numériques.

1. Choix des pas de temps

On suppose que l'expérience numérique est stoppée avant que la flamme n'atteigne le bord du domaine. On évite ainsi des problèmes spécifiques aux boîtes fermées (en effet, près du bord, la flamme devient très mince du fait des hautes pressions et le pas spatial que l'on se fixe initialement n'est alors plus adapté).

Dans ces conditions, on obtient les limites de stabilité suivantes pour un schéma explicite:

$$\Delta t_{Euler} = 4 \cdot 10^{-3}$$

$$\Delta t_{Diff} = 10^{-4}$$

$$\Delta t_{Source} = 5 \cdot 10^{-4}$$

On choisit alors pour le schéma totalement explicite un pas de temps égal au pas de temps donné par les termes diffusifs. C'est aussi le pas de temps utilisé pour le schéma explicite par sous-cyclage. Soit:

$$\Delta t_{Exp} = 10^{-4}$$

Pour les schémas mixtes, le pas de temps est déterminé par la partie Euler. On choisit de présenter les résultats pour des nombres de CFL_{Euler} égaux à 0.5 et 0.75. On a ainsi respectivement:

$$\Delta t_{Imp} = 20 \Delta t_{Exp} \text{ et } \Delta t_{Imp} = 30 \Delta t_{Exp}$$

2. Résultats numériques

Le domaine de calcul a une longueur égale à 2. L'initialisation (solution à $t = 0$) est la suivante:

$$\text{Pour } x \leq 1.70 \text{ , } Y = 1 \text{ , } \rho = 1.30 \text{ , } u = 0 \text{ , } T = 1.$$

$$\text{Pour } x \geq 1.73 \text{ , } Y = 0 \text{ , } \rho = 0.26 \text{ , } u = 0 \text{ , } T = 5.$$

Entre ces deux états, on impose une évolution linéaire de la fraction massique du réactant Y et de la masse volumique ρ . La vitesse initiale est égale à 0 sur tout le domaine, la pression initiale est constante. Les autres quantités sont alors déterminées par la loi d'état.

Pour les pas de temps considérés, l'expérience numérique a montré qu'une convergence de la phase de relaxation à 10^{-2} est suffisante lorsque l'on adopte une procédure de sur-relaxation. Pour obtenir une solution équivalente lorsque l'on n'utilise pas cette procédure, il faut que ce résidu atteigne 10^{-3} .

Notons:

- IL le schéma implicite linéarisé
 - RL le schéma implicite par relaxation "linéaire"
 - RNL le schéma implicite par relaxation non linéaire
 - SC le schéma explicite par sous-cyclage
- et E le schéma totalement explicite

Les pas de temps que l'on considère pour les deux essais numériques sont relativement petits (par rapport au pas de temps explicite). Aussi, comme c'était le cas pour l'étude sur le modèle isobare, les différents schémas envisagés donnent des solutions comparables. On note simplement une petite variation de la vitesse de flamme (toujours inférieure à 1%) qui se traduit par un léger décalage entre les différentes solutions.

On choisit de ne présenter les solutions que pour le schéma implicite linéarisé (IL). On trouvera figure VII.8 les profils de la vitesse et de la pression obtenues pour un $CFL_{Euler} = 0.75$ aux temps $t_1 = 0.75$ et $t_2 = 1.5$; et figure VII.9 les profils de température et du taux de réaction aux mêmes instants. La solution de référence est tracée en trait continu, elle a été obtenue par le schéma totalement explicite (E). A noter que le nombre de Mach réel de l'écoulement est voisin de 0.6.

On a regroupé dans les tableaux ci-dessous les caractéristiques des différents schémas pour les deux essais réalisés. Les temps de calcul obtenus sans procédure de sur-relaxation sont représentés entre parenthèses. Ils ont été obtenus avec un résidu de la phase de relaxation de 0.001.

Schéma	IL	RL	RNL	SC	E
Vitesse de flamme	0.9448	0.9484	0.9488	0.9419	0.9441
Temps CPU D-R	13.6 (29.9)	17.9 (47.7)	55 (208)	27.6	-
Efficacité D-R	2 (0.92)	1.5 (0.6)	0.5 (0.13)	1	-
Temps CPU total	23.7 (40)	28 (57.8)	65 (218)	37.6	225
Efficacité totale	9.5 (5.6)	8 (3.9)	3.5 (1)	6	1

Tableau 1

Résultats obtenus par les différents schémas pour $CFL_{Euler} = 0.5$ et $t = 1.5$.

Schéma	IL	RL	RNL	SC	E
Vitesse de flamme	0.9474	0.9499	0.9522	0.9411	0.9441
Temps CPU D-R	11.4 (27.1)	14.3 (43.1)	44 (187)	27.6	-
Efficacité D-R	2.4 (1)	1.9 (0.75)	0.63 (0.15)	1	-
Temps CPU total	18.1 (33.8)	21 (49.8)	50.8 (195)	34.3	225
Efficacité totale	12.4 (6.7)	10.7 (4.5)	4.4 (1.2)	6.5	1

Tableau 2

Résultats obtenus par les différents schémas pour $CFL_{Euler} = 0.75$ et $t = 1.5$.

On constate que pour la résolution des équations propres à la combustion, l'efficacité des différents schémas implicites est considérablement réduite. En effet, pour $\Delta t = 20\Delta t_E$ l'efficacité du schéma implicite linéarisé n'est plus que de 2 alors que pour l'étude précédente elle était dans les mêmes conditions voisine de 5.

La vectorisation des schémas explicites et implicites que l'on compare, ainsi que la complexité du problème (système 2-2 à résoudre) ont certainement réduit l'efficacité de ces schémas. Mais en fait, cette réduction du gain est surtout due à la phase de sur-relaxation. Dans la première partie, les paramètres de sur-relaxation que l'on définissait étaient des paramètres exacts alors qu'ici ce sont des paramètres approchés. A solutions équivalentes, le rapport des temps CPU entre schéma sur-relaxé et schéma non sur-relaxé étaient de l'ordre de 5. Ici il n'est plus que de 3.

Quoi qu'il en soit, la procédure de sur-relaxation s'avère intéressante. Pour les faibles pas de temps que l'on utilise, elle permet aux schémas implicites (sauf le schéma RNL) d'être les plus performants.

Comme c'était le cas précédemment, l'efficacité des schémas croît lorsque l'on augmente le pas de temps. Bien évidemment, cela se traduit par une légère détérioration des solutions qui restent cependant très correctes.

On peut illustrer ceci par la figure VII.10 où sont représentées les évolutions de la vitesse de flamme en fonction du temps pour le cas $CFL_{Euler} = 0.75$. Tous les schémas implicites donnent une vitesse de flamme supérieure à celle obtenue par le schéma totalement explicite. Seul le schéma par sous-cyclage donne une vitesse inférieure. Cependant, comme cela a déjà été dit, ces écarts sont très faibles et voisin de 1%.

Les défauts qui apparaissent au temps $t = 0.75$ figures VII.8 et VII.9 sont présents pour tous les schémas implicites. Par contre, pour le schéma explicite par sous-cyclage, ces défauts sont amoindris.

Pour comparer les différents schémas, il convient d'analyser l'efficacité globale, c'est à dire celle qui prend en compte la résolution du système complet. Bien évidemment, cette efficacité est encore réduite. Le schéma implicite linéarisé permet un gain de 12.4 par rapport au schéma totalement explicite, ce gain n'est plus que de 1.9 par rapport au schéma explicite avec sous-cyclage.

Remarque:

Si on poursuit le calcul au delà de $t = 1.65$, la stabilité des différents schémas n'est plus assurée. Seul le schéma implicite par relaxation non linéaire est stable, mais alors la flamme est captée sur 1 point et le calcul n'a plus de sens.

On a ainsi pu vérifier les résultats de stabilité constatés dans la section précédente: le schéma implicite de relaxation non linéaire est plus stable que le schéma de relaxation "linéaire", lui-même plus stable que le schéma implicite linéarisé.

VII.4.8 Conclusion

Il ressort de cette étude que pour le problème considéré, l'utilisation des schémas implicites ne permet pas de gain en temps de calcul par rapport au schéma explicite par sous-cyclage lorsqu'aucune procédure de sur-relaxation n'est utilisée. Un gain de 2 est obtenu lorsque cette procédure est utilisée.

Cependant, dans l'optique d'une extension de ces schémas pour des écoulements *bidimensionnels*, il paraît difficile de conserver ce gain. En effet dans ces conditions, il n'est pas prouvé que le paramètre de sur-relaxation existe et s'il existe on ne sait pas actuellement le calculer.

Aussi pour les faibles pas de temps ($\Delta t \leq 30\Delta t_E$), ne serait-ce que par sa simplicité d'implémentation, on choisira le schéma explicite par sous-cyclage.

Pour des pas de temps plus importants, les schémas implicites (même sans sur-relaxation) permettent d'obtenir des gains en temps de calcul. Le schéma implicite linéarisé s'avère alors le plus performant. Si par contre on considère des pas de temps tels que ce schéma devient instable, on peut utiliser le schéma de relaxation en version linéaire.

Pour tous ces schémas, il existe des critères de stabilité difficiles à évaluer, notamment pour les schémas implicites. De plus, ces critères peuvent évoluer au cours du temps. L'utilisation d'une procédure d'adaptation automatique contrôlant le nombre de points dans la zone de réaction (voir par exemple [50], [39]) peut permettre à ces schémas de conserver leur stabilité pour un moindre coût.

Schéma implicite linéarisé

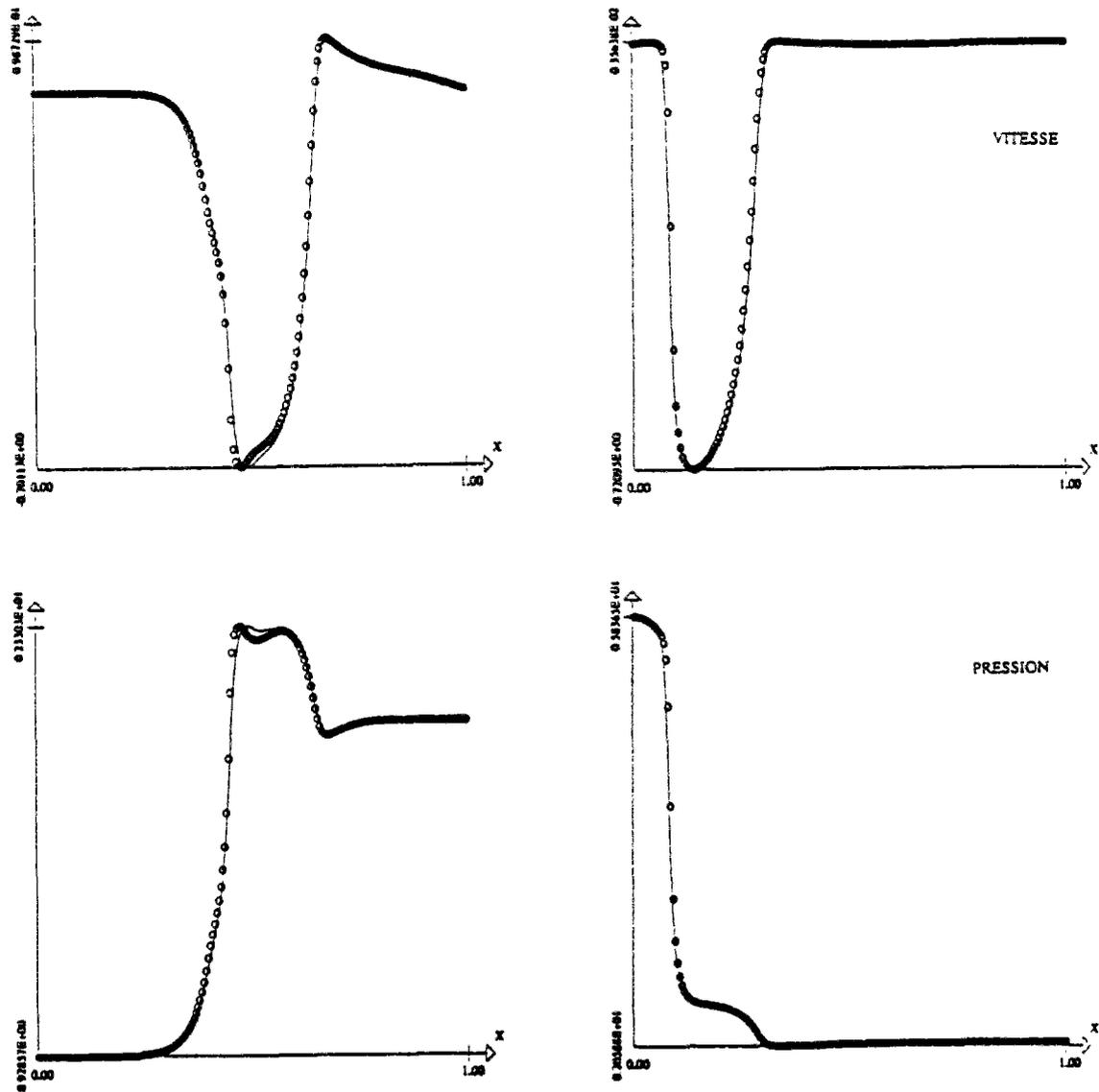
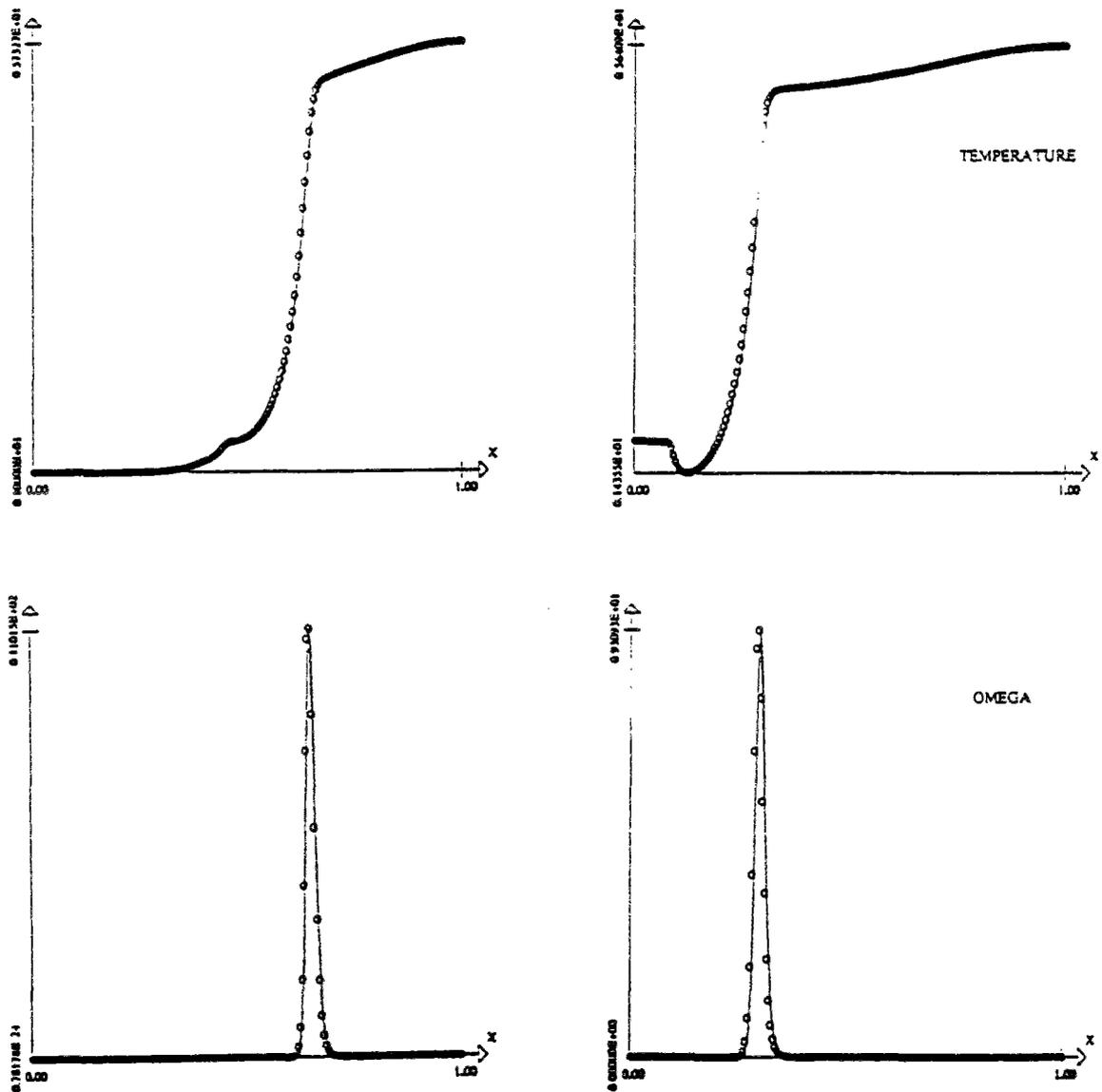


Figure VII.8 : Profil de la vitesse et de la pression aux temps $t = 0.75$ et $t = 1.5$

Schéma implicite linéarisé

Figure VII.9 : Profil de la température et du taux de réaction aux temps $t = 0.75$ et $t = 1.5$

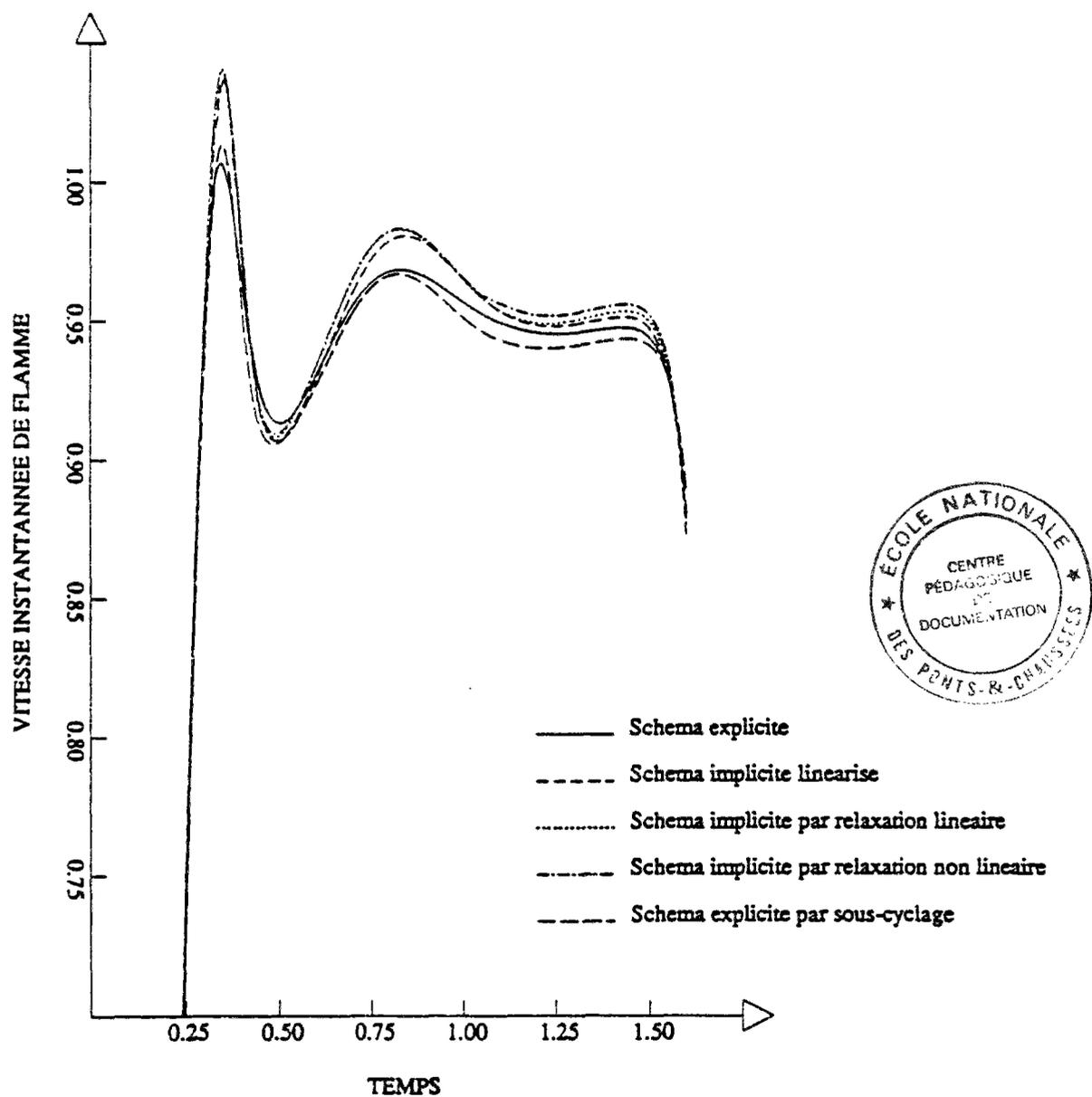


Figure VII.10 : Evolution de la vitesse instantannée de la flamme en fonction du temps pour $CFL_{Euler} = 0.75$

VII.5 CONCLUSION

Dans le cadre d'une approche à pas fractionnaires pour résoudre les équations d'Euler réactives, on s'est tout d'abord intéressé à la résolution par des schémas implicites d'un système monodimensionnel ne comportant que les termes diffusifs et réactifs. Pour ce problème particulier avec des conditions aux bords de type Neumann, on propose un procédé de sur-relaxation qui rend particulièrement performant l'utilisation de ces schémas. On met en évidence qu'il est nécessaire de résoudre dans une même phase les termes diffusifs et réactifs. A ce stade, le choix du schéma optimal dépend essentiellement du pas de temps choisi pour l'avancement en temps de la solution. Dans tous les cas, lorsque la précision est recherchée, ce pas de temps ne doit pas excéder le temps nécessaire pour que la flamme se propage sur une distance égale à l'épaisseur de la zone de réaction. Le schéma implicite linéarisé s'est avéré le plus performant mais aussi le moins stable, le schéma de relaxation "linéaire" un peu moins performant est en revanche très stable. Les gains en temps de calcul par rapport au schéma explicite sont alors compris entre 3 et 20 (avec des codes numériques non vectorisés).

Ensuite, on a appliqué ces schémas pour la résolution du système complet. Globalement, pour le cas test considéré ces schémas ont permis d'obtenir des solutions de bonne qualité. Bien évidemment, par rapport à l'étude précédente, l'efficacité globale (c'est à dire l'efficacité prenant en compte les résolutions du système diffusion-réaction et de la partie Euler) est réduite. Là encore, le schéma implicite linéarisé s'est avéré le plus performant.

Ces différents résultats doivent être replacés dans un contexte plus général. En effet, les méthodes que nous présentons sont très performantes du fait de la procédure de sur-relaxation; or pour des problèmes multidimensionnels avec des conditions aux limites a priori quelconques, cette procédure n'est pas forcément applicable. Cette étude a permis de valider l'approche implicite; pour conserver des temps de calcul acceptable en 2-D ou 3-D, la résolution des systèmes linéaires peut être réalisée par des méthodes plus performantes que celles que nous avons proposées (gradients congugués, multi-gradients).

CONCLUSIONS GENERALES

Le travail présenté dans cette thèse constitue les premières études numériques faites à l'INRIA pour résoudre des problèmes de combustion internes, instationnaires et stationnaires, en régime transsonique. Les résultats obtenus sur les divers cas tests que nous avons étudiés, permet de justifier et de valider l'approche numérique développée à l'INRIA pour l'étude de certains problèmes industriels concrets. Cette conclusion est d'autant plus vraie que cette approche a donné de très bons résultats dans de précédentes études portant sur des écoulements fortement subsoniques ainsi que sur des écoulements hypersoniques.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à l'extension au cas multi-espèces des solveurs de Riemann couramment utilisés pour les écoulements d'Euler mono-espèce. On propose une classe de solveurs qui permet de préserver le principe du maximum des différentes espèces.

Une difficulté concerne le traitement des conditions aux limites aval. On a pu traiter correctement ce problème en construisant, par analogie avec ce qui se fait pour l'aérodynamique externe, des flux numériques de bords adaptés aux différents problèmes rencontrés. Les flux ainsi construits présentent l'intérêt de traiter indifféremment les parties subsoniques et supersoniques. De plus ces flux se sont avérés très robustes.

La difficulté des cas test étudiés, avec des rapports de pression supérieurs à 30, prouve la robustesse de la méthode. De plus l'utilisation de la méthode MUSCL associée à des maillages suffisamment fins obtenus par raffinement statique ou dynamique conduit à des solutions précises et sans oscillations numériques. En particulier, cette méthode s'est montrée très performante pour la capture des phénomènes dus à la compressibilité du fluide.

Pour s'affranchir des difficultés liées à la disparité des échelles temporelles, et tout en conservant une solution instationnaire précise, on propose une classe de schémas implicites qui permettent des gains en temps de calcul voisin de 5 par rapport à l'explicite.

Cette première étude, même si elle apporte des réponses essentielles, met en évidence que de nombreux travaux restent encore à effectuer. On pourrait notamment considérer d'autres discrétisations numériques pour réduire les temps de calcul où améliorer les résultats et inclure des modèles physiques plus sophistiqués afin de mieux prédire les variables physiques essentielles de ces écoulements réactifs.

Bibliographie

- [1] R. ABGRALL, "Généralisation du schéma de Roe pour le calcul d'écoulements de mélanges de gaz à concentrations variables", *La Recherche Aérospatiale*, **6**, pp.31-43, (1988).
- [2] R. ABGRALL, "Extension of Roe's approximate Riemann solver to equilibrium and non equilibrium flows", *Proceedings of the eighth GAMM conference on numerical methods in fluid mechanics*, Wesseling ed., *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, **29**, pp. 1-10, Vieweg, Braunschweig, (1990).
- [3] R. ABGRALL & J. L. MONTAGNE, "Généralisation du schéma d'Osher pour le calcul d'écoulements de mélanges de gaz à concentrations variables et de gaz réels", *La Recherche Aérospatiale*, **4**, pp. 1-13, (1989).
- [4] R.M. BEAM & R.M. WARMING "An implicit finite difference algorithm for hyperbolic system in conservation law form", *J. Comp. Phys.*, **22**, pp 67-110, (1976).
- [5] H. BERESTYCKI & B. LARROUTUROU "Quelques aspects mathématiques de la propagation des flammes prémélangées", *Rapport de recherche INRIA N° 799*, (1988).
- [6] M. BEN ARTZI "The generalized Riemann problem for reactive flows", *J. Comp. Phys.*, **81**, pp. 70-101, (1989).
- [7] F. BENKHALDOUN, "Etude numérique de modèles mathématiques décrivant la propagation de flammes dans un milieu gazeux bidimensionnel", *Thèse, Université de Nice*, (1988).
- [8] A. BOURGEADE, "Le problème de Riemann généralisé", *Note CEA-N-2489*, (1986).
- [9] A. BOURGEADE, "Quelques méthodes numériques pour le traitement des écoulements réactifs", *Note CEA-N-2570*, (1988).
- [10] A. BOURLIOUX, A.MAJDA & V. ROYTBURD "Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonation", à paraître.
- [11] J.D. BUCKMASTER & G.S.S LUDFORD, "Theory of laminar flames", *Cambridge University Press, Cambridge*, (1982).

-
- [12] G. V. CANDLER & R. W. McCORMACK, "The computation of hypersonic flows in chemical and thermal nonequilibrium", Paper N° 107, Third National Aero-Space Plane Technology Symposium, (1987).
- [13] D. CHARGY, "Simulation numérique de l'interaction réactive de deux jets gazeux transsoniques", Rapport de DEA de turbulence et systèmes dynamiques, Université de Nice, (1988).
- [14] D. CHARGY, R. ABGRALL, L. FEZOUI & B. LARROUTUROU, "Comparison of several numerical schemes for multi-component one-dimensional flows", Rapport INRIA N° 1253, (1990).
- [15] D. CHARGY, A. DERVIEUX & B. LARROUTUROU, "Upwind adaptive finite-element investigations of the two-dimensional reactive interaction of supersonic gaseous jets", *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **11**, pp. 751-767, (1990).
- [16] D. CHARGY, A. DERVIEUX, B. LARROUTUROU, M. LORIOT, N. MAMAN, "Simulation numérique de l'interaction réactive de jets gazeux transsoniques", Rapport de contrat établi pour la SEP, (Juin 1990).
- [17] D. CHARGY, A. DERVIEUX, B. LARROUTUROU, M. LORIOT, "Simulation numérique de l'interaction réactive d'un mélange gazeux H₂-O₂ dans une tête de chambre", Rapport de contrat établi pour la SEP, (Novembre 1990).
- [18] P. CLAVIN, "Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows", *Prog. Energ. Comb. Sci.*, **11**, pp. 1-59, (1985).
- [19] P. COLELLA, A. MAJDA & V. ROYTBURD, "Theoretical and numerical structure for reacting shock waves", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7**, pp. 1059-1080, (1986).
- [20] R. COURANT & K.O. FRIEDRICHS, "Supersonic flow and shock waves", Springer Verlag, New-York, (1976).
- [21] A. DERVIEUX, L. FEZOUI & B. LARROUTUROU, "Upwind numerical methods for compressible flows", to appear.
- [22] J. A. DESIDERI, N. GLINSKY & E. HETTENA, "Hypersonic reactive flow computations", *Computers and Fluids*, **18**, (2), pp. 151-182, (1990).
- [23] G. FERNANDEZ, "Simulation numérique d'écoulements réactifs à petit nombre de Mach", Thèse, Université de Nice, (1989).
- [24] G. FERNANDEZ "Implicit conservative upwind schemes for strongly transient Flows", Rapport INRIA N° 873, (1988).

- [25] G. FERNANDEZ & B. LARROUTUROU, "Hyperbolic schemes for multi-component Euler equations", *Nonlinear hyperbolic equations - Theory, numerical methods and applications*, Ballmann & Jeltsch eds. pp. 128-138, *Notes on numerical Fluid Mechanics*, **24**, Vieweg, Braunschweig, (1989).
- [26] L. FEZOUI, "Résolution des équations d'Euler par un schéma de van Leer en éléments finis", *Rapport INRIA 358*, (1985).
- [27] L. FEZOUI, S. LANTERI, B. LARROUTUROU & C. OLIVIER, "Résolution numérique des équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible en maillage triangulaire", *Rapport INRIA N° 1033*, (1989).
- [28] W. FICKETT, W.C. DAVIS, "Detonation", University of California Press, Berkeley, (1979).
- [29] J. GLIMM, "Solutions in the large for non linear hyperbolic systems of equations", *Comm. Pure Appl. Math.*, **18**, pp. 697-715, (1965).
- [30] N. GLINSKY, L. FEZOUI, M. C. CICCOLI & J. A. DESIDERI, "Non-equilibrium hypersonic flow computations by implicit second-order upwind finite elements", *Proceedings of the eighth GAMM conference on numerical methods in fluid mechanics*, Wesseling ed., *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, **29**, pp. 159-168, Vieweg, Braunschweig, (1990).
- [31] A. HABBAL, A. DERVIEUX, H. GUILLARD & B. LARROUTUROU, "Explicit calculations of reactive flows with an upwind finite-element hydrodynamical code", *Rapport INRIA 690*, (1987).
- [32] A. HARTEN "High resolution scheme for hyperbolic conservation laws", *J. Comp. Phys.*, **49**, pp 357-393, (1983).
- [33] A. HARTEN, P.D. LAX & B. VAN LEER "On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws", *SIAM Review*, **25**, pp. 35-61, (1983).
- [34] A. HARTEN & J. M. HYMAN, "A self-adjusting grid for the computation of weak solutions of hyperbolic conservation laws", *J. Comp. Phys.*, **50**,(2), pp. 235-269, (1983).
- [35] K. KAILASANATH, E.S ORAN & J.P BORIS, "Numerical simulations of flames and detonations", *Lecture Notes in Physics (351)*, *Numerical Combustion*, A. Dervieux & B. Larrouturou (Eds), (1989).
- [36] R.J. KEE, J.A. MILLER, T. H. JEFFERSON, "CHEMKIN: A general-purpose, problem-independent, transportable, fortran chemical kinetics code package", (1980).
- [37] S.N. KRUSKOV, "First order quasi-linear equations in several independent variables", *Math. USSR Sbornik*, **10**, pp. 217-243, (1970).

-
- [38] M.H. LALLEMAND, "Schémas décentrés multigrilles pour la résolution des équations d'Euler en éléments finis", Thèse, Université de Provence, (1988).
- [39] B. LARROUTUROU, "Etude mathématique et modélisation numérique de phénomènes de combustion", Thèse, Université Paris XIII, (1987).
- [40] B. LARROUTUROU, "Modèle de la combustion en phase gazeuse", cours de DEA de turbulence et système dynamique, (non publié).
- [41] B. LARROUTUROU, "How to preserve the mass fraction positivity when computing compressible multi-component flows", *J. Comp. Phys.*, to appear.
- [42] B. LARROUTUROU, "Recent progress in reactive flow computations", *Computing methods in applied sciences*, Glowinski ed., SIAM, (1990), to appear.
- [43] B. LARROUTUROU & L. FEZOU, "On the equation of multi-component perfect or real gas inviscid flow", "Non linear hyperbolic problems", Carasso Charrier Hanouzet & Joly eds., *Lecture Notes in Mathematics*, **1402**, pp. 69-98, Springer Verlag, Heidelberg, (1989).
- [44] A. LERAT, "Propriété d'homogénéité et décomposition des flux en dynamique des gaz", *J. Méc. Théor. Appl.*, **2**, N° 2, pp.185-213, (1983).
- [45] A. LE ROUX, "Approximation de quelques problèmes hyperboliques non linéaires", Thèse, Université de Rennes, (1979).
- [46] R.J. LEVEQUE & H.C. YEE, "A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms", NASA Technical Memorandum 100075, 1988.
- [47] R.W. Mc CORMACK, "A numerical method for solving the equation of compressible viscous flows", *AIAA journal* **20**, p 1275-1281, (1982).
- [48] A. MAJDA, "High Mach number combustion", *Combustion and chemical reactors*, Ludford ed., *Lecture in Appl. Math.*, **24**, (1), pp. 109-184, AMS, Providence, (1986).
- [49] A. MAJDA, "A qualitative model for dynamic combustion", *SIAM J.Appl.Math*, **41**, N° 1, (1981).
- [50] N.. MAMAN & B. LARROUTUROU, "On the use of dynamical finite-element mesh adaptation for 2D simulation of unsteady flame propagation", To appear.
- [51] J. L. MONTAGNE, H. C. YEE & M. VINOKUR, "Comparative study of high-resolution shock capturing schemes for a real gas", NASA Technical memorandum 100004, (1987).
- [52] S. OSHER & F. SOLOMON, "Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws", *J. Math. Comp.*, **38**, (158), pp. 339-374, (1982).

-
- [53] N. PETERS, "Discussion of test problem A", Numerical methods in laminar flame propagation, Peters & Warnatz eds., pp. 1-14, Notes on Numerical Fluid Mechanics, **6**, Vieweg, Braunschweig, (1982).
- [54] N. PETERS, "Introduction to combustion science", Lecture Course, INRIA, Paris, (March 1989).
- [55] F. PICON, "Etude de schémas implicites pour un écoulement monodimensionnel réactif", Rapport de stage de DEA, (1988), (non publié).
- [56] J. REGERE, "Simulation numérique d'écoulements visqueux compressibles tridimensionnels", Rapport de stage de fin d'études D.E.S.S I.S.I, (1988), (non publié)
- [57] P. L. ROE, "Approximate Riemann solvers, parameters vectors and difference schemes", J. Comp. Phys, **43**, p. 357, (1981).
- [58] P. L. ROE, "Some contributions to the modeling of discontinuous flows", Proc. AMS/SIAM Seminar, San Diego, (1983).
- [59] G.A. SOD "A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws", J. Comp. Phys., **27**, pp. 1-31, (1977).
- [60] S. P. SPEKREIJSE, "Multigrid solution of the steady Euler equations", Thesis, Delft University of Technology, (1987).
- [61] J. STEGER & R.F. WARMING, "Flux vector splitting for the inviscid gas dynamic with applications to finite difference methods", J. Comp. Phys., **40**, N^o2 pp. 263-293, (1981).
- [62] H. STEVE, "Schémas implicites linéarisés décentrés pour la résolution des équations d'Euler en plusieurs dimensions", Thèse, Université de Marseille, (1988).
- [63] B. STOUFFLET, "Résolution numérique des équations d'Euler des fluides parfaits compressibles par des schémas implicites en éléments finis", Thèse, Université PARIS VI (1984).
- [64] B. STOUFFLET, J. PERIAUX, L. FEZOUÏ & A. DERVIEUX, "Numerical simulation of 3-D hypersonic Euler flow around space vehicles using adapted finite elements", AIAA paper 87-0560, (1987).
- [65] P. K. SWEEBY, "High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws", SIAM J. Num. Anal., **21**, pp. 995-1011, (1984).
- [66] B. VAN LEER, "Towards the ultimate conservative difference scheme II - Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme", J. Comp. Phys., **14**, pp. 361-370, (1974).

-
- [67] B. VAN LEER, "Upstream - Centered Finite Difference Schemes for Ideal Compressible Flow", *J. Comp. Phys.*, **23**, pp. 263-275 (1977).
- [68] B. VAN LEER, "Flux-vector splitting for the Euler equations", Eighth international conference on numerical methods in fluid dynamics, Krause ed., pp. 507-512, Lecture notes in physics, **170**, Springer-Verlag, (1982).
- [69] B. VAN LEER, J. L. THOMAS, P. L. ROE & R. W. NEWSOME, "A comparison of numerical flux formulas for the Euler and Navier-Stokes equations", AIAA paper 87-1104, (1987).
- [70] R. S. VARGA, "Matrix iterative analysis", Prentice Hall, (1962).
- [71] D.H WAGNER, "The existence and behavior of viscous structure for plane detonation waves", *SIAM J. Math. Anal.*, **20**—, N^o5, pp. 1035-1054, (1989).
- [72] F.A WILLIAMS, "Combustion theory", second edition, Benjamin Cummings, Menlo Park, (1985).
- [73] H. C. YEE, "Upwind and symmetric shock capturing schemes", NASA Technical memorandum 89464, (1987).

ABSTRACT

The work presented in this thesis deals with numerical studies of transonic reactive flows. The mathematical modelling used to solve these flows is built on the multi-species Euler equations written for mixed perfect gases where terms modelling diffusion and combustion effects are taken into account. In order to numerically solve the system of equations, we use a mixed finite volume/finite element formulation based upon MUSCL methodology with upwind numerical fluxes. The boundary conditions are treated by means of fluxes, adapted to multi-species flows, and solving boundaries where the flow is either subsonic or supersonic.

With the help of this scheme, several one-dimensional problems of stable and unstable detonation are studied, as well as two-dimensional problems of reactive interaction of jets and diffusion flames. The difficulty of the test cases, with pressure ratios sometimes larger than 30, proves the robustness of the method. Moreover, the use of a MUSCL method, associated with fine meshes obtained by either static or dynamic refinements, leads to precise numerical solutions with no oscillation.

In order to get rid of the difficulties linked with the time scales disparities that appear in those flows, we propose various explicit and implicit schemes using operator decompositions which increases by a factor of 5 the efficiency (whilst keeping a good quality unsteady solution) in comparison with the explicit scheme.

Keywords: reactive fluid Mechanics - deflagration - detonation - multi-species Euler equations - Numerical analysis - Finite elements - Finite volumes - Upwind schemes - Adapted meshes

RESUME

Le travail présenté dans cette thèse porte sur l'étude numérique d'écoulements réactifs en régime transsonique. Le modèle mathématique pour résoudre ces écoulements est constitué des équations d'Euler multi-espèces écrites pour un mélange de gaz parfaits auxquelles nous ajoutons les termes modélisant les effets diffusifs et les effets dus à la combustion. Pour résoudre numériquement le système d'équations ainsi défini, nous utilisons une formulation mixte éléments finis - volumes finis basée sur la méthodologie MUSCL et utilisant des fonctions de flux numériques décentrés. Pour le traitement des conditions aux limites, on utilise des flux numériques adaptés aux écoulements multi-espèces qui traitent les frontières où l'écoulement est subsonique ou supersonique.

A l'aide de ce schéma on étudie différents problèmes monodimensionnels de détonation stable et instable ainsi que des problèmes bidimensionnels d'interaction réactive de jets et de flammes de diffusion. La difficulté des cas tests étudiés avec des rapports de pression parfois supérieurs à 30 prouve la robustesse de la méthode. De plus l'utilisation de la méthode MUSCL associée à des maillages fins obtenus par raffinement statique ou dynamique conduit à des solutions numériques précises et sans oscillations.

Pour s'affranchir des difficultés liées à la disparité des échelles temporelles qui apparaissent dans ces écoulements, on propose différents schémas explicites et implicites par décomposition des opérateurs qui permettent (tout en conservant une solution instationnaire de bonne qualité) des gains supérieurs à 5 par rapport à l'explicite.

Mots clés: Mécanique des fluides réactifs - Déflagration - Détonation - Equations d'Euler multi-espèces - Analyse numérique - Eléments finis - Volumes finis - Schémas décentrés - Maillages adaptés