HAL
open science

Comparaison de schémas numériques pour la simulation d'écoulements turbulents réactifs

Ludivine Gougeon

To cite this version:

Ludivine Gougeon. Comparaison de schémas numériques pour la simulation d'écoulements turbulents réactifs. Modélisation et simulation. Université d'Orléans, 2007. Français. NNT : . tel-00282242

HAL Id: tel-00282242

https://theses.hal.science/tel-00282242v1

Submitted on 26 May 2008

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.

THÈSE

présentée à l'Université d'Orléans

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

Discipline : MÉCANIQUE DES FLUIDES – ÉNERGÉTIQUE
THERMIQUE – COMBUSTION – ACOUSTIQUE

par

Ludivine GOUGEON

Comparaison de schémas numériques pour la simulation d'écoulements turbulents réactifs

Soutenue le 24 septembre 2007, devant le jury composé de :

M. François JAMES	Président du jury, représentant de l'EDST / Professeur à l'Université d'Orléans
M. Alexandre ERN	Rapporteur / Directeur de recherche, CERMICS-ENPC, Marne la Vallée
M. Pierre HALDENWANG	Rapporteur / Professeur à l'Université de Provence, Marseille
M. Nicolas LARDJANE	Examinateur / Chercheur au CEA-DAM, Bruyères-le-Châtel
M. Pierre SAGAUT	Examinateur / Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie, Paris
M. Denis VEYNANTE	Examinateur / Directeur de recherche, EM2C-CNRS, Châtenay-Malabry
M. Iskender GÖKALP	Directeur de thèse / Directeur de Recherche, directeur de ICARE-CNRS, Orléans
M. Ivan FEDIOUN	Directeur de thèse / Maître de Conférences à Polytech'Orléans, Orléans

THÈSE

présentée à l'Université d'Orléans

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

Discipline : MÉCANIQUE DES FLUIDES – ÉNERGÉTIQUE
THERMIQUE – COMBUSTION – ACOUSTIQUE

par

Ludivine GOUGEON

Comparaison de schémas numériques pour la simulation d'écoulements turbulents réactifs

Soutenue le 24 septembre 2007, devant le jury composé de :

M. François JAMES	Président du jury, représentant de l'EDST / Professeur à l'Université d'Orléans
M. Alexandre ERN	Rapporteur / Directeur de recherche, CERMICS-ENPC, Marne la Vallée
M. Pierre HALDENWANG	Rapporteur / Professeur à l'Université de Provence, Marseille
M. Nicolas LARDJANE	Examinateur / Chercheur au CEA-DAM, Bruyères-le-Châtel
M. Pierre SAGAUT	Examinateur / Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie, Paris
M. Denis VEYNANTE	Examinateur / Directeur de recherche, EM2C-CNRS, Châtenay-Malabry
M. Iskender GÖKALP	Directeur de thèse / Directeur de Recherche, directeur de ICARE-CNRS, Orléans
M. Ivan FEDIOUN	Directeur de thèse / Maître de Conférences à Polytech'Orléans, Orléans

Remerciements

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ont été effectués au sein de l'équipe Combustion Turbulente de l'Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement. Je remercie en premier lieu mes directeurs de thèse : Iskender Gökalp pour m'avoir accueillie au sein de son laboratoire, et Ivan Fedioun pour la qualité de son encadrement et pour sa disponibilité ainsi que sa compréhensibilité. Je les remercie pour leur confiance et la possibilité qu'ils m'ont offerte de découvrir le monde de la recherche.

Je remercie messieurs Alexandre Ern et Pierre Haldenwang pour le temps passé sur la lecture de ce mémoire en tant que rapporteurs et messieurs Nicolas Lardjane, François James, Pierre Sagaut et Denis Veynante pour avoir bien voulu évaluer mon travail en tant qu'examinateurs. La pertinence de leurs remarques et la qualité de leurs commentaires m'ont permis de mener à terme ce travail dans de bonnes conditions.

Que Nicolas Lardjane trouve ici ma sincère gratitude pour son aide précieuse dans cette étude. Sa disponibilité, son soutien ainsi que ses conseils avisés dispensés à travers de nombreuses heures passées au téléphone m'ont été essentiels. Je remercie également Dmitry Davidenko pour sa sollicitude et pour ses conseils fort utiles.

Merci également à Christian Chauveau pour son assistance informatique, ainsi qu'à toute l'équipe administrative : Murielle, Pâquerette et Jeannine pour leur présence et leur bonne humeur. Une petite dédicace à Maribel « ma copine de bague » ainsi qu'à toute sa petite famille. Je remercie également Jojo pour ses conseils typographiques et informatiques.

Je remercie très chaleureusement les doctorants actuels et anciens du laboratoire et d'ailleurs, pour avoir rendu très agréables ces années passées au laboratoire : Angèle (assurément la meilleure coach de rédaction de thèse), Bibou (parce qu'il me fera toujours rire), Homan (maintenant, tu vas pouvoir m'apprendre à jouer aux échecs ?), Manu (mon alter ego), Nico (l'américain), Ludo (et son pot de crème fraiche), les deux Thomas D., les deux turques Baris et Cem, Cécile, Fabien, Pablo, Yohan (le Jean Roucas orléanais), la clique de l'ISTO/BRGM et tous les autres. La plupart, plus que des collègues, sont devenus de véritables amis.

Je remercie ma famille, mes parents Léopold et Chantal ainsi que mes frères Victorien et Anatole pour leur soutien et pour leur venue à ma soutenance. Je fais un petit clin d'œil à Piyounou et Jeannette. Enfin je remercie Fred pour tout l'amour qu'il me donne au quotidien et pour le soutien tant psychologique que logistique qu'il m'a apporté pendant la rédaction de ce mémoire.

Le bonheur c'est de chercher.

Extrait de son *Journal*

Jules Renard

Table des matières

Table des figures **1**

Liste des tableaux **3**

Introduction générale **5**

Chapitre 1 Équations de bilan pour les écoulements réactifs multi-espèces **11**

1.1 Propriétés thermodynamiques des mélanges 11

1.1.1 Fractions massiques, fractions molaires, concentrations 11

1.1.2 Loi de mélange, équation d'état 12

1.1.3 Énergie interne, enthalpie, chaleurs spécifiques 12

1.2 Équations de bilan 14

1.2.1 Conservation de la masse et des espèces chimiques 14

1.2.2 Équation de l'énergie 14

1.2.3 Équations pour la quantité de mouvement 15

1.3 Cinétique chimique 16

1.3.1 Production par les termes sources chimiques 16

1.3.2 Schémas cinétiques 18

1.4 Modèle de transport moléculaire 18

1.4.1 Diffusion multi-composantes 18

1.4.2 Contraintes visqueuses 20

1.4.3 Flux de chaleur 20

1.4.4 Coefficients de transport d'une espèce pure - diffusion binaire 21

1.5 Équations de Navier-Stokes : choix de la forme 23

1.5.1 Formulation convective 23

1.5.2 Formulation conservative 24

1.6 Validation des modèles de thermodynamique et de cinétique chimique 24

Chapitre 2 Simulation numérique directe : le code Compact **27**

2.1 Les schémas compacts aux différences finies 28

2.1.1 État de l'art 28
2.1.2 Schéma compact de Lele 29
2.2 Modèle mathématique, mise en œuvre 32
2.2.1 Adimensionnement 32
2.2.2 Métriques 33
2.2.3 Conditions aux limites 33
2.2.4 Intégration en temps 37
2.3 Implémentation 38
2.3.1 Arbre programmatique 38
2.3.2 Optimisation 39
2.4 Validations du code de calcul 40
2.4.1 Flammes de prémélange 1D 40
2.4.2 Interaction tourbillon/conditions aux limites 44
2.5 Applications 48
2.5.1 Flamme-jets subsoniques 48
2.5.2 Flamme turbulente 3D 55

Chapitre 3 Simulation des Grandes Échelles Implicite : le code WENO 63
3.1 Introduction 63
3.2 La méthode WENO 65
3.2.1 Méthode de base 65
3.2.2 Variantes 72
3.2.3 Autres spécificités 78
3.2.4 Calcul des termes sources 79
3.2.5 Évaluation de la température 79
3.3 Les différentes approches : nomenclature et coûts respectifs 80
3.4 Modèle mathématique, mise en œuvre 80
3.4.1 Termes visqueux 80
3.4.2 Conditions aux limites 81
3.4.3 Intégration en temps 82
3.5 Implémentation dans un code 2D 82
3.5.1 Arbre programmatique 82
3.5.2 Optimisation 83
3.6 Analyse linéaire du pouvoir de résolution 84
3.7 Cas test numériques élémentaires 92
3.7.1 Tests 1D mono-espèces 92
3.7.2 Tests 1D bi-espèces : tests d'Abgrall et Karni 124

3.7.3 Synthèse 139
3.7.4 Tests 2D de Riemann 139
3.8 Cas test numériques évolués 148
3.8.1 Instabilités de Rayleigh-Taylor 148
3.8.2 Flammes cylindriques 2D 152
3.8.3 Interaction choc-bulle 153
3.8.4 Synthèse 156

Chapitre 4 Comparaison des codes Compact et WENO **157**
4.1 Flamme laminaire de prémélange unidimensionnelle 157
4.1.1 Front de flamme 157
4.1.2 Vitesse de flamme laminaire 159
4.1.3 Simulations Euler 161
4.2 Flamme bidimensionnelle de diffusion H_2/air 161
4.2.1 Conditions initiales 162
4.2.2 Champs 2D moyennés 162
4.2.3 Influence du maillage 163
4.2.4 Influence de l'ordre du schéma WENO 165
4.2.5 Conclusion 165

Chapitre 5 Exemples d'applications du code WENO **171**
5.1 Détonation 2D 171
5.1.1 Conditions initiales 171
5.1.2 Résultats 173
5.2 Interaction choc-bulle 176

Conclusion générale **183**

Annexes **185**

Annexe A Bases thermodynamiques **187**

Annexe B Coefficients de transport **191**

Annexe C Schémas cinétiques **193**

Annexe D Matrices de passage **197**
D.1 Matrices de passage des variables primitives aux variables conservatives 197
D.2 Matrices de passage des variables primitives aux variables caractéristiques 198

D.3 Matrices de passage des variables conservatives aux variables caractéristiques . . 199

Bibliographie **203**

Table des figures

1 Schéma de la chambre de combustion d'un véhicule hypersonique. 5
2 Structure d'une flamme de diffusion. 6
3 Schéma du positionnement de la présente étude parmi les différentes approches numériques en écoulement turbulent et/ou réactif. 8

1.1 Viscosité de H_2 en fonction de la température. 21
1.2 idem fig. 1.1 : O_2. 21
1.3 Conductivité thermique de H_2 en fonction de la température. 22
1.4 idem fig. 1.3 : O_2. 22
1.5 Coefficient de self-diffusion de H_2 en fonction de la température. 23
1.6 Coefficient de diffusion de H_2 dans O_2 en fonction de la température. 23
1.7 De gauche à droite, et de haut en bas : T, p, Y_{H_2} et Y_{H_2O} en fonction de la température initiale. 26
1.8 Délai d'inflammation en fonction de la température initiale. 26

2.1 Nombres d'onde modifiés des schémas du code Compact. 32
2.2 Arbre programmatique simplifié du code Compact. 38
2.3 Structure d'une flamme de prémélange. 40
2.4 Structure du front de flamme : T. 42
2.5 Structure du front de flamme : Y_{H_2} et Y_{H_2O}. 42
2.6 Vitesse laminaire de flamme H_2/air en fonction de la richesse. 43
2.7 Idem fig. 2.6 : zoom sur les basses richesses. 43
2.8 Test de la sortie x=L parfaitement non-réflective. 45
2.9 Test de la frontière x=L. Champ de dilatation Θ (à gauche) et de vorticité ω (à droite) à 3 instants : ct/L=0 (a), ct/L=1 (b) et ct/L=2 (c). 46
2.10 Test du coin (L,L). Champ de dilatation Θ (à gauche) et de vorticité ω (à droite) à 3 instants : ct/L=0 (a), ct/L=1 (b) et ct/L=4/3 (c). 47
2.11 Distribution des fractions massiques d'H_2, d'O_2 et de température en fonction de la fraction de mélange Z pour les écoulements réactif laminaire (à gauche) et turbulent (à droite). 50
2.12 Température moyenne sur l'axe du jet pour les 4 simulations. 51
2.13 Fraction massique moyenne d'O_2 sur l'axe du jet pour les 4 simulations. 51
2.14 Fraction massique moyenne d'H_2O sur l'axe du jet pour les 4 simulations. 51
2.15 Champ de température instantané pour le cas laminaire/non-réactif (a), turbulent/non-réactif (b), laminaire/réactif (c) et turbulent/réactif (d). 51
2.16 Champ de fraction massique instantané d'H_2O pour le cas réactif laminaire (en haut) et turbulent (en bas). 51

2.17 Demi-épaisseur dynamique δ (gauche) et décroissance axiale (droite). 52
2.18 Champ 2D et évolution axiale du terme source modifié d'énergie. 53
2.19 Champ du terme source modifié de production pour H_2 (a), O_2 (b), OH (c) et H_2O (d). Pour chaque espèce α, en haut : $\Omega_\alpha(\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y_\beta})$, en bas : $\overline{\Omega_\alpha}(\rho, T, Y_\beta)$ . . . 54
2.20 Évolution axiale du terme source modifié de production pour H_2, O_2, OH et H_2O. 54
2.21 Spectre d'énergie à $t = 0$ et après 10 retournements. 58
2.22 Évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente. 58
2.23 Une composante du champ de vitesse (isotrope) après 10 retournements. 58
2.24 Profils de température à $t_1 = 0,0232$ ms (cercles) et à $t_2 = 0,032$ ms. 59
2.25 idem figure 2.24 : fraction massique d'H_2O. 59
2.26 Champ de température à $t = 0,0232$ ms. 60
2.27 idem figure 2.26 : $t = 0,032$ ms. 60
2.28 Champ de fraction massique d'H_2O à $t = 0,0232$ ms. 60
2.29 idem figure 2.28 : : $t = 0,032$ ms. 60

3.1 Grille de reconstruction. 66
3.2 Résultats du tube à choc bi-espèce de Sod. Densité. 74
3.3 Résultats du tube à choc bi-espèce de Sod. Température. 75
3.4 Profil de fraction massique des espèces 1 et 2 à t=0.2s. $N_x = 200$. 78
3.5 Comparaison des temps d'exécution entre code Compact et WENO pour la simulation d'un écoulement réactif (gauche) et non-réactif (droite). 81
3.6 Arbre programmatique simplifié du code WENO. 83
3.7 Temps de restitution, speed up et efficacité parallèle du code WENO. 85
3.8 Partie réelle du nombre d'onde modifié optimal des schémas WENO d'ordre 3 à 11. 87
3.9 Partie imaginaire du nombre d'onde modifié optimal des schémas WENO d'ordre 3 à 11. 87
3.10 Partie réelle du nombre d'onde modifié effectif des schémas WENO d'ordre 3 à 11. 88
3.11 Partie imaginaire du nombre d'onde modifié effectif des schémas WENO d'ordre 3 à 11. 88
3.12 Partie réelle et imaginaire de la vitesse de phase des schémas WENO d'ordre 3 et 5. 90
3.13 Partie réelle et imaginaire de la vitesse de phase des schémas WENO d'ordre 7, 9 et 11. 91
3.14 Résultats du test du tube à choc de SOD (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. 94
3.15 Résultats du test du tube à choc de SOD (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. 94
3.16 Profil de densité du tube à choc de SOD à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 95
3.17 Profil de température du tube à choc de SOD à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 95
3.18 Résultats du test 1 de Liska (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. 96
3.19 Résultats du test 1 de Liska (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. 96
3.20 Profil de densité du test 1 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 97
3.21 Profil de température du test 1 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 97
3.22 Résultats du test 2 de Liska (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. 99
3.23 Résultats du test 2 de Liska (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. 99
3.24 Profil de température du test 2 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 100

3.25 Profil de densité du test 2 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 100
3.26 Résultats du test de Noh (#4) à t=1. Schéma WENO d'ordre 5. 102
3.27 Profil de densité (à gauche) et de température (à droite) du test de Noh à t=1. N_x=500. 102
3.28 Profil de vitesse du test de Noh à t=1. N_x=500. 102
3.29 Résultats du test 3a de Liska (#1) à t=0,012. Schéma WENO d'ordre 5. 104
3.30 Résultats du test 3a de Liska (#4) à t=0,012. Schéma WENO d'ordre 5. 104
3.31 Profil de densité du test 3a de Liska à t=0,012. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 105
3.32 Profil de température du test 3a de Liska à t=0,012. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 105
3.33 Profil de vitesse du test 3a de Liska à t=0,012. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 105
3.34 Résultats du test 4 de Liska (#1) à t=0,035. Schéma WENO d'ordre 5. 107
3.35 Résultats du test 4 de Liska (#4) à t=0,035. Schéma WENO d'ordre 5. 107
3.36 Profil de densité du test 4 de Liska à t=0,035. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 108
3.37 Profil de température du test 4 de Liska à t=0,035. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 108
3.38 Résultats du test 5 de Liska (#1) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5. 110
3.39 Résultats du test 5 de Liska (#4) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5. 110
3.40 Profil de température du test 5 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 111
3.41 Profil de densité du test 5 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 111
3.42 Résultats du test 6 de Liska (#1) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5. 113
3.43 Résultats du test 6 de Liska (#4) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5. 113
3.44 Profil de température du test 6 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 114
3.45 Profil de densité du test 6 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 114
3.46 Résultats du test du pic de Liska (#1) à t=0,0039. Schéma WENO d'ordre 5. . . 116
3.47 Résultats du test du pic de Liska (#4) à t=0,0039. Schéma WENO d'ordre 5. . . 116
3.48 Profil de densité du test du pic de Liska à t=0,039. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 117
3.49 Profil de température du test du pic de Liska à t=0,0039. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 117
3.50 Profil de vitesse du test du pic de Liska à t=0,0039. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 117
3.51 Résultats du test de Woodward et Collela (#1) à t=0,038. Schéma WENO d'ordre 5. 119
3.52 Résultats du test de Woodward et Collela (#4) à t=0,038. Schéma WENO d'ordre 5. 119
3.53 Profil de densité du test de Woodward et Collela à t=0,038. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 120
3.54 Profil de température du test de Woodward et Collela à t=0,038. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 120
3.55 Profil de vitesse du test de Woodward et Collela à t=0,038. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 120

3.56 Résultats du test de Deiterding (#1) à t=0,08. Schéma WENO d'ordre 5. 122
3.57 Résultats du test de Deiterding (#4) à t=0,08. Schéma WENO d'ordre 5. 122
3.58 Profil de densité du test de Deiterding à t=0,08. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 123
3.59 Résultats du test 1 d'Abgrall et Karni (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. . 125
3.60 Résultats du test 1 d'Abgrall et Karni (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. . 126
3.61 Profil de densité du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 127
3.62 Profil de température du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 127
3.63 Profil de fraction massique de l'espèce 1 du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 127
3.64 Résultats du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. Schéma WENO d'ordre 5.128
3.65 Résultats du test 2 d'Abgrall et Karni (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. . 130
3.66 Résultats du test 2 d'Abgrall et Karni (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. . 131
3.67 Profil de densité du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 132
3.68 Profil de pression du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 132
3.69 Profil de fraction massique de l'espèce 1 du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 132
3.70 Résultats du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. Schéma WENO d'ordre 5.133
3.71 Résultats du test 3 d'Abgrall et Karni (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. . 135
3.72 Résultats du test 3 d'Abgrall et Karni (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5. . 136
3.73 Profil de densité du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 137
3.74 Profil de température du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 137
3.75 Profil de fraction massique de l'espèce 1 du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1). 137
3.76 Résultats du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. Schéma WENO d'ordre 5.138
3.77 Résultats du test 3 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b). 142
3.78 Résultats du test 4 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b). 143
3.79 Résultats du test 6 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b). 144
3.80 Résultats du test 12 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b). 145
3.81 Résultats du test 15 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b). 146
3.82 Résultats du test 17 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b). 147
3.83 Condition initiale de la simulation des instabilités de Rayleigh-Taylor. 148
3.84 Densité. Reconstruction #1. 150
3.85 Densité. Reconstruction #4. 150
3.86 Densité. Reconstruction #1. 151
3.87 Densité. Reconstruction #3. 151
3.88 Densité. Reconstruction #4. 151
3.89 Champ de température à t=0,1 ms pour les reconstructions #2 (a), #3 (b), #4 (c) et #5 (d). 152
3.90 Schéma de l'interaction choc-bulle. 153

3.91 Zoom sur le champ de S à t=150 ms : délimitation de deux zones. (a) : décomposition de flux Lax-Friedrichs globale, (b) : décomposition de flux Lax-Friedrichs locale. 154
3.92 Champ de S à différents instants : t=20 ms (1), t=30 ms (2), t=50 ms (3), t=60 ms (4), t=100 ms (5), t=150 ms (6), t=170 ms (7). En haut : décomposition de flux Lax-Friedrichs globale ; en bas : décomposition de flux Lax-Friedrichs locale. . . . 155

4.1 Effet de la résolution : Profils de température à t=0,105 ms. Cas B, schéma WENO d'ordre 5, reconstruction #4. 158
4.2 idem fig.4.1 : Profils de Y_{H_2} et Y_{H_2O}. 158
4.3 Effet de la reconstruction : Profils de température à t=0,105 ms. Cas B, schéma WENO d'ordre 5, N=400. 158
4.4 idem fig.4.3 : Profils de Y_{H_2} et Y_{H_2O}. 158
4.5 Effet de l'ordre du schéma : Profils de température à t=0,105 ms. Cas B, schéma WENO d'ordre 5, N=400. 159
4.6 idem fig.4.5 : Profils de Y_{H_2} et Y_{H_2O}. 159
4.7 Vitesse de flamme laminaire H_2/air en fonction de la richesse pour différents maillages. 160
4.8 Profils de T, Y_{H_2} et Y_{H_2O} à t=0,105 ms pour des simulations Euler sur différents maillages. Schéma WENO d'ordre 5, reconstruction #4. 161
4.9 Vitesse de flamme laminaire H_2/air en fonction du maillage pour les simulations MILES Euler et Navier-Stokes. Schéma WENO d'ordre 5, reconstruction #4. . . 162
4.10 Profil initial de vitesse à l'entrée du jet pour les différentes simulations. 163
4.11 Champ moyen de température (1420 K<T<2670 K). En haut : Compact, en bas : WENO ordre 7 avec maillage 2. 164
4.12 Champ moyen de fraction massique de OH (0<Y_{OH}<0,0234). En haut : Compact, en bas : WENO ordre 7 avec maillage 2. 164
4.13 Champ moyen de fraction massique de H_2O (0<Y_{H_2O}<0,232). En haut : Compact, en bas : WENO ordre 7 avec maillage 2. 164
4.14 Influence du maillage sur les profils axiaux des variables primitives T, U_x, Y_{H_2}, Y_{O_2}, Y_{H_2O} et Y_{OH}. 166
4.15 Influence du maillage sur la demi-épaisseur dynamique et la décroissance axiale du jet. 166
4.16 Influence du maillage sur les profils radiaux des variables primitives T, Y_{H_2}, Y_{H_2O} et Y_{OH}. 167
4.17 Influence de l'ordre du schéma WENO sur les profils axiaux des variables primitives T, U_x, Y_{H_2}, Y_{O_2}, Y_{H_2O} et Y_{OH}. 168
4.18 Influence de l'ordre du schéma WENO sur la demi-épaisseur dynamique et la décroissance axiale du jet. 168
4.19 Influence de l'ordre du schéma WENO sur les profils axiaux des variables primitives T, Y_{H_2} et Y_{H_2O} et Y_{OH}. 169

5.1 Champ initial de densité. 172
5.2 Profils longitudinaux de la densité et de la température à t=0. 172
5.3 Profils longitudinaux des fractions massiques (à gauche) et de la composante longitudinale de la vitesse (à droite) à t=0. 172
5.4 Champ de S à différents instants pour les simulations avec le maillage 1. 174
5.5 Champ de S à différents instants pour les simulations avec le maillage 2. 175

5.6 Diagramme schématique du concept d'interaction choc/mélange tridimensionnel (a) et de l'analogue bidimensionnel (b). Image tirée de l'article de Ton *et al.* [126] 176
5.7 Schéma de l'interaction choc-bulle. 177
5.8 Pression (couleur) et fraction massique de H2 (iso-contours) à différents instants. 179
5.9 Pression (couleur) et fraction massique de H2 (iso-contours) à différents instants. 180
5.10 Température (iso-contours) à différents instants. 181
5.11 Vorticité et fractions massiques de H_2O, O, HO_2, OH, H à t=14 μs. 182

Liste des tableaux

2.1 Paramètres physiques des flammes 1D H_2/air simulées. 42
2.2 Paramètres numériques des différentes simulations. 48
2.3 Paramètres physiques et numériques du jet réactif. 49

3.1 Coefficients c_{rj} pour k=1 à 6. 66
3.2 Coefficients d_r pour k=1 à 6. 68
3.3 Données initiales du test des différentes formulations de matrices. 73
3.4 Données initiales du tube à choc de Sod. 92
3.5 Données initiales du test 1 de Liska. 93
3.6 Données initiales du test 2 de Liska. 98
3.7 Données initiales du test de Noh. 101
3.8 Données initiales du test 3a de Liska. 103
3.9 Données initiales du test 4 de Liska. 106
3.10 Données initiales du test 5 de Liska. 109
3.11 Données initiales du test 6 de Liska. 112
3.12 Données initiales du test de pic de Liska. 115
3.13 Données initiales du test de Woodward-Colella. 118
3.14 Données initiales du cas test de Deiterding. 121
3.15 Données initiales du test 1 d'Abgrall et Karni. 124
3.16 Données initiales du test 2 d'Abgrall et Karni. 129
3.17 Données initiales du test 3 d'Abgrall et Karni. 134
3.18 État initial dans les quadrants gauche/droite-haut/bas des problèmes 2D de Riemann. 139

4.1 Vitesse de flamme laminaire pour différentes simulations. 160

A.1 Format des bases thermodynamiques. 187
A.2 Base thermodynamique de Burcat. 188
A.3 Base thermodynamique de CHEMKIN. 189

B.1 Coefficients de la régression polynomiale pour la conductivité thermique. 191
B.2 Coefficients de la régression polynomiale pour la viscosité. 191
B.3 Coefficients de la régression en puissance pour la diffusion binaire. 192

C.1 Efficacité des espèces intervenant dans les schémas cinétiques. 193
C.2 Schéma cinétique H_2/air de l'ONERA. 194
C.3 Schéma cinétique H_2/air de Dagaut. 195
C.4 Schéma cinétique H_2/air de Maas et Warnatz. 196

Introduction générale

Le travail présenté dans ce mémoire a été entièrement réalisé au sein d'ICARE[1], UPR 3021 du CNRS. Cet établissement de recherche orléanais résulte de la fusion des laboratoires LCSR[2] et Aérothermique, ex UPR 4211 et 9020 respectivement. Le premier s'intéresse aux systèmes réactifs en général et à la combustion en particulier. On y développe des modèles de cinétique chimique et on y étudie expérimentalement la structure des flammes laminaires et turbulentes. Le second, autrefois implanté à Meudon, s'occupe des écoulements à haute vitesse, haute enthalpie et en déséquilibre thermique, chimique, et radiatif, que l'on rencontre par exemple lors des rentrées atmosphériques. Parallèlement aux expériences en souffleries hypersoniques, certains outils numériques ont été développés pour les écoulements raréfiés (méthodes de Monte-Carlo), les études relevant du régime continu restant principalement expérimentales.

Dans les années 2000, les deux laboratoires se sont engagés dans le CNRT « Propulsion du futur », avec l'étude de la combustion supersonique H_2/air pour les vols hypersoniques aérobies (propulsion par superstatoréacteur).

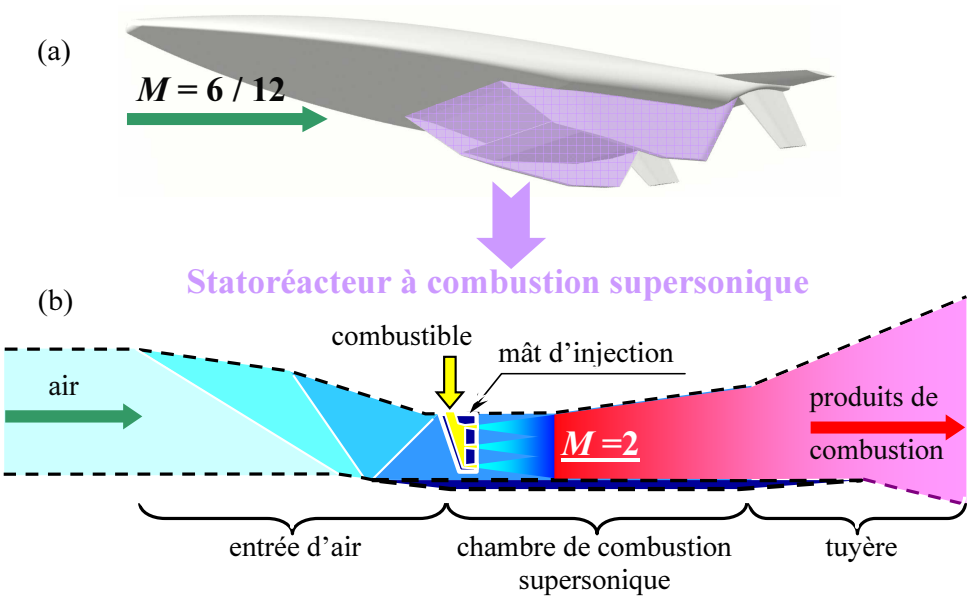


FIG. 1: Schéma de la chambre de combustion d'un véhicule hypersonique.

[1]Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement
[2]Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs

Le principe consiste à faire voler un démonstrateur de taille réduite ($\approx$ 4 m) à Mach 8, dont l'allure générale est représentée par une vue d'artiste sur la figure 1a. L'avant-corps du réacteur sert de compresseur en générant une succession d'ondes de choc en vue de ralentir l'écoulement de Mach 8 à Mach 2 à l'entrée de la chambre de combustion (fig. 1b). On injecte alors l'hydrogène dans l'écoulement supersonique, celui-ci se mélange avec l'air capté et s'enflamme instantanément au vu des conditions de pression et de température. Le temps de résidence de l'écoulement réactif est de l'ordre de la milliseconde dans la chambre de combustion. On compte sur la turbulence pour optimiser le mélange, et éventuellement sur un système de chocs internes pour en améliorer encore l'efficacité. La chambre de combustion est ainsi le lieu d'une interaction entre deux phénomènes complexes : un écoulement turbulent supersonique et un dégagement de chaleur important. Les échelles caractéristiques présentes dans un écoulement de ce type sont donc multiples : échelles spatio-temporelles de la turbulence (de l'échelle de Kolmogorov aux échelles intégrales) et de la combustion (épaisseur de flamme de 0,1 à 1 mm, cf. fig. 2).

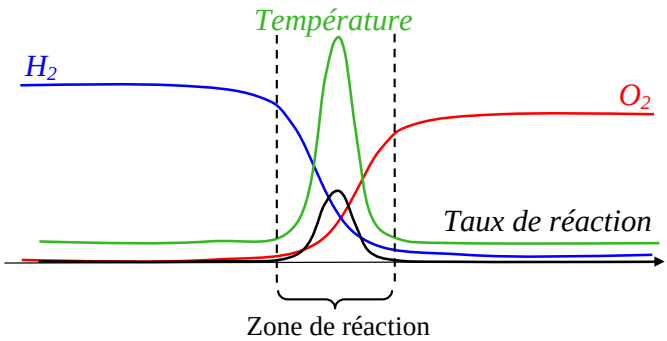


FIG. 2: Structure d'une flamme de diffusion.

Sous l'impulsion d'Iskender Gökalp, directeur du LCSR, il a été décidé de développer une activité numérique dans le domaine. Les bases en ont été jetées avec les thèses de Nicolas Lardjane [82] et de Dmitry Davidenko [30]. Lardjane a développé deux codes à vocations très différentes : un code non-dissipatif basé sur des schémas hermitiens d'ordre élevé (différences finies compactes centrées d'ordre 6 [86]) servant de référence pour des études fondamentales en Simulation Numérique Directe (SND ou DNS pour *Direct Numerical Simulation*), et un code de portée plus générale basé sur les schémas WENO d'ordre 5 [90] permettant de capturer à la fois des écoulements choqués et turbulents. Ces deux codes, hautement optimisés numériquement et portés avec succès sur diverses plate-formes informatiques (calculateur vectoriel NEC-SX5, cluster de PC linux, stations Unix DEC Compaq,...) étaient limités au cas d'écoulements **binaires non-réactifs**. Parallèlement, Davidenko a étudié la combustion turbulente supersonique CH_4/H_2/air dans le cadre du projet LEA [42] développé en commun par l'ONERA et MBDA France et faisant suite au programme PROMETHEE[114], en modélisant la chambre expérimentale LAERTE à l'aide du code MSD de l'ONERA. Les travaux de Davidenko ont montré la difficulté d'étendre les modèles de turbulence (e.g. k-ϵ, k-ω,...) des codes RANS industriels aux écoulements réactifs, compressibles, choqués, les paramètres et constantes des modèles devant être adaptés pratiquement au cas-par-cas sur l'expérience.

Simultanément, on a vu naître dans ces mêmes années un nombre croissant d'études portant sur deux aspects distincts de la simulation numérique des écoulements multi-espèces inertes ou réactifs :

– la Simulation des Grandes Échelles (SGE ou LES pour *Large Eddy Simulation*) d'écoulements réactifs en configuration réaliste avec un certain succès (e.g. [50], voir aussi [104], chap. 10 pour une revue), parfois à l'aide de codes industriels où les modèles RANS sont remplacés par des modèles sous-maille (Smagorinsky le plus souvent). Dans ces simulations, il est difficile de faire la part des choses entre la contribution du modèle sous-maille et celle de la dissipation du schéma numérique à la stabilité globale du calcul. De plus, la notion même de SGE sur maillage non-régulier, voire non-structuré reste peu claire sur le plan théorique, les erreurs de commutation [51] ou de troncature [43] pouvant être du même ordre de grandeur que la contribution du modèle sous-maille. Néanmoins, traiter le calcul de façon tridimensionnelle et instationnaire, comme l'autorisent les moyens de calcul actuels, permet de capturer la dynamique des structures turbulentes, c'est à dire des échelles spatio-temporelles absentes des simulations RANS. Ces informations sont précieuses pour prévoir les couplages acoustiques et les instabilités de flamme.
– des études théoriques sur le comportement des solveurs de Riemann exacts ou approchés pour les équations d'Euler, aux interfaces multi-fluides, ou aux discontinuités de contact de composition chimique dans les écoulements multi-espèces à rapport de chaleurs spécifiques très différentes [1][70][72][95]. Dans ces études, seule la partie hyperbolique des équations est prise en compte et les phénomènes de transport moléculaire sont négligés. Des problèmes en physique complexe, comme les interactions bulle/onde de choc [12] en réactif ou non, ont pu être simulés avec succès.

Par ailleurs, d'autres auteurs ont poursuivi les recherches sur la méthode de Simulation des Grandes Échelles Implicite (ILES ou MILES) [46][55], où la dissipation numérique intrinsèque des schémas à capture de choc tient lieu de modèle sous-maille lors du calcul d'écoulements turbulents. Cette méthode, décriée notamment dans la communauté des *combustionistes* pour son manque de fondement physique, commence progressivement à s'imposer après plus de 15 ans de pratique, suite à de récentes études théoriques sur l'analogie formelle entre modèles sous-maille explicites et implicites [56][93].

La présente étude vise à mettre au point un outil numérique à la fois performant, évolutif, robuste et précis de simulation MILES d'écoulements compressibles réactifs visqueux.

La figure 3 schématise le positionnement de ce travail parmi les méthodes qui viennent d'être citées. Il ne s'agit pas d'opposer la modélisation sous-maille implicite à la modélisation conventionnelle par un modèle basé sur des arguments physiques, mais partant de la constatation que tous les codes d'application industrielle sont construits sur des schémas robustes donc dissipatifs, d'évaluer l'impact de cette dissipation numérique sur la physique de la combustion turbulente, et si possible d'en contrôler les effets.

Le code développé dans cette optique serait ainsi de portée très générale, applicable aussi bien à la simulation d'écoulements turbulents réactifs à basse vitesse (mais pas dans l'approximation bas nombre de Mach...) qu'aux problèmes d'aérodynamique hypersonique où les écoulements choqués sont le siège de réactions de dissociation des molécules. Il s'agit là de poser les bases de la plate-forme numérique ICARE, à l'intersection des préoccupations des deux anciens laboratoires dont résulte le nouvel institut. Les schémas WENO sont de bons candidats pour une telle entreprise. Ils ont montré leur efficacité à modéliser implicitement la turbulence dans le cas mono-espèce [49], et sont assez facilement extensibles aux problèmes multi-espèces. Il s'agit donc d'étendre le code binaire existant au cas multi-espèce et réactif. Il faut en outre une référence pour évaluer rationnellement les qualités et défauts de la méthode envisagée. On a donc égale-

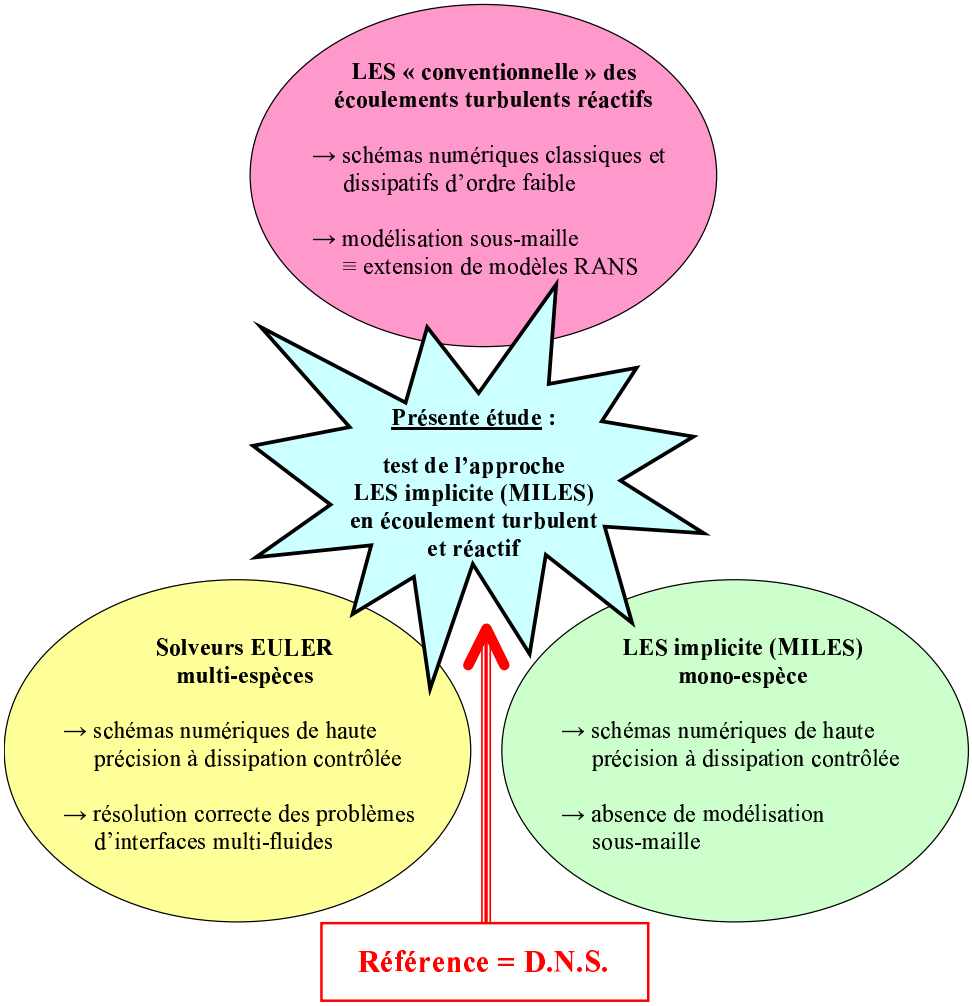


FIG. 3: Schéma du positionnement de la présente étude parmi les différentes approches numériques en écoulement turbulent et/ou réactif.

ment étendu le code non-dissipatif (sans filtrage explicite) au cas réactif, afin d'avoir un outil de DNS fiable.

C'est le résumé de ce travail qui est rassemblé dans ce mémoire. Le premier chapitre décrit les équations résolues ainsi que les modèles thermo-chimiques et de transports retenus. Le chapitre 2 détaille le code Compact de DNS, et prouve la cohérence des modèles physico-chimiques par une validation sur la vitesse fondamentale de flamme en prémélange H_2/air. On présente également, sur un cas 2D de jet réactif non-prémélangé, comment cet outil peut être utile à l'élaboration de modèles sous-maille explicites par analyse *a priori*. On expose enfin un calcul de flamme turbulente 3D. Le chapitre 3 décrit le code WENO. On rappelle d'abord le principe de la méthode de base, puis on en précise les variantes possibles quant aux différentes reconstructions et au traitement du cas multi-espèces. Toutes ces combinaisons sont ensuite évaluées sur une série de cas test académiques 1D et 2D, avant d'être appliquées à des configurations plus réalistes. Les deux codes sont confrontés au chapitre 4 sur le problème de la détermination d'une vitesse fondamentale laminaire, puis sur le problème du jet turbulent réactif. Enfin, le chapitre 5

montre quelques possibilités de l'approche MILES sur des cas extrêmes, inaccessibles à la DNS : propagation d'une détonation H_2/air et interaction réactive onde de choc/bulle d'hydrogène.

Chapitre 1

Équations de bilan pour les écoulements réactifs multi-espèces

Dans tout ce mémoire, on s'intéresse au mélange d'espèces gazeuses intervenant dans la combustion H_2/air. On suppose être à la fois loin des conditions critiques (gaz peu dense) et loin du régime moléculaire libre (nombre de Knudsen $<< 1$). On suppose aussi l'équilibre vibrationnel, *i.e.* une énergie interne nulle pour les molécules, d'où une unique température (de translation et de rotation) pour chaque gaz composant le mélange considéré alors comme un mélange idéal de gaz parfaits (mais non-calorifiquement parfaits). L'extension à des écoulements hors-équilibres, ainsi que les effets des gaz réels ne sont donc pas pris en compte dans cette étude mais ils pourraient être introduits par la suite.

Les équations de transport et de thermo-chimie sont bien connues et détaillées par exemple dans [104]. On les rappelle d'abord ici brièvement, puis on précise et on justifie le choix des modèles de transport sur la base d'un compromis entre précision et coût de calcul. La forme des équations (convective ou divergente), et le choix des variables résolues (primitives ou conservatives) dépend du type de méthode numérique envisagée pour les résoudre : le passage de l'une à l'autre est rappelé en annexe (D).

1.1 Propriétés thermodynamiques des mélanges

On considère un mélange, localement homogène, composé de N_{esp} espèces indicées $\alpha = 1, ..., N_{esp}$ en équilibre de pression p (Pa) et température T (K).

1.1.1 Fractions massiques, fractions molaires, concentrations

La masse volumique du mélange est obtenue à partir de la conservation de la masse :

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \rho_\alpha \qquad (\mathrm{kg.m^{-3}}) \tag{1.1}$$

où ρ_α est la masse volumique partielle - ou concentration massique - de l'espèce α dans le mélange. On en déduit l'expression des fractions massiques Y_α par :

$$\rho_\alpha = \rho Y_\alpha \qquad ; \qquad \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} Y_\alpha = 1 \tag{1.2}$$

Soit M_α la masse molaire (kg.mol^{-1}) de l'espèce α. Sa concentration molaire dans le mélange, variable utilisée dans l'évaluation des termes sources chimiques, s'exprime de la façon suivante :

$$C_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{M_\alpha} = \frac{\rho Y_\alpha}{M_\alpha} \qquad (\text{mol.m}^{-3}) \tag{1.3}$$

et la concentration molaire totale C du mélange est :

$$C = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} C_\alpha \tag{1.4}$$

Les fractions molaires X_α s'en déduisent directement :

$$C_\alpha = CX_\alpha \qquad ; \qquad \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} X_\alpha = 1 \tag{1.5}$$

La masse molaire M du mélange est alors :

$$M = \frac{\rho}{C} = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} X_\alpha M_\alpha = \left(\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \frac{Y_\alpha}{M_\alpha} \right)^{-1} \tag{1.6}$$

et la relation entre fraction massique et fraction molaire s'écrit simplement comme :

$$X_\alpha M_\alpha = Y_\alpha M \tag{1.7}$$

1.1.2 Loi de mélange, équation d'état

La loi de Dalton permet de relier la pression partielle de chaque espèce à la pression dans le mélange :

$$p = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} p_\alpha \tag{1.8}$$

Chaque espèce vérifie la loi d'état des gaz parfaits :

$$p_\alpha = \rho_\alpha \frac{\mathcal{R}}{M_\alpha} T = \rho_\alpha r_\alpha T \tag{1.9}$$

où $\mathcal{R} = 8,31451$ (J.mol^{-1}.K^{-1}) est la constante universelle des gaz parfaits, et $r_\alpha = \mathcal{R}/M_\alpha$ (J.kg^{-1}.K^{-1}) la constante massique du gaz. De (1.6), (1.8) et (1.9), on déduit la loi d'état et la constante du mélange, également parfait :

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \frac{Y_\alpha}{M_\alpha} = \rho r T \tag{1.10}$$

1.1.3 Énergie interne, enthalpie, chaleurs spécifiques

Pour chaque espèce, on suppose que l'énergie interne e_α, l'enthalpie $h_\alpha = e_\alpha + p_\alpha/\rho_\alpha$, et les chaleurs spécifiques ne dépendent que de la température :

$$de_\alpha = Cv_\alpha(T)dT \tag{1.11}$$

$$dh_\alpha = Cp_\alpha(T)dT \tag{1.12}$$

L'enthalpie de l'espèce α est obtenue en intégrant (1.12) à partir d'une température de référence T_0. Elle représente la somme de l'enthalpie sensible $h_{s\alpha}$ et de l'enthalpie de formation $\Delta h^0_{f,\alpha}$ à la température de référence T_0=298,15 K :

$$\begin{aligned} h_\alpha(T) &= h_{s\alpha}(T) + \Delta h^0_{f,\alpha} \\ &= \int_{T_0}^{T} Cp_\alpha(\theta)d\theta + \Delta h^0_{f,\alpha} \end{aligned} \tag{1.13}$$

On obtient de même l'énergie interne de l'espèce α à la température T par intégration de (1.11). En faisant usage de (1.9), il vient :

$$e_\alpha(T) = \int_{T_0}^{T} Cv_\alpha(\theta)d\theta + \Delta e^0_{f,\alpha} \tag{1.14}$$

$$= \int_{T_0}^{T} Cv_\alpha(\theta)d\theta - \frac{\mathcal{R}}{M_\alpha}T_0 + \Delta h^0_{f,\alpha} \tag{1.15}$$

$$= \int_{T_0}^{T} Cp_\alpha(\theta)d\theta - \frac{\mathcal{R}}{M_\alpha}T + \Delta h^0_{f,\alpha} \tag{1.16}$$

La première égalité fait apparaître l'énergie sensible $e_{s\alpha}(T)$ et l'énergie de formation $\Delta e^0_{f,\alpha}$:

$$e_{s\alpha}(T) = \int_{T_0}^{T} Cv_\alpha(\theta)d\theta = h_{s\alpha} - p_\alpha/\rho_\alpha \tag{1.17}$$

Les chaleurs spécifiques des espèces vérifient la relation de Mayer :

$$r_\alpha = Cp_\alpha(T) - Cv_\alpha(T) \tag{1.18}$$

et le rapport de leurs chaleurs spécifiques dépend de la température :

$$\gamma_\alpha(T) = \frac{Cp_\alpha(T)}{Cv_\alpha(T)} \tag{1.19}$$

L'énergie interne (*resp.* l'enthalpie) du mélange (supposé idéal) par unité de masse s'obtiennent de même à partir de (1.14) (*resp.* (1.13)) :

$$e = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} e_\alpha Y_\alpha \quad ; \quad h = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} h_\alpha Y_\alpha \tag{1.20}$$

Ces relations permettent de définir les chaleurs spécifiques du mélange à partir des relations de pondération par les fractions massiques :

$$Cp = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} Cp_\alpha Y_\alpha \quad ; \quad Cv = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} Cv_\alpha Y_\alpha \tag{1.21}$$

et aussi

$$r = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} r_\alpha Y_\alpha = Cp - Cv \quad ; \quad \gamma = \frac{Cp}{Cv} \tag{1.22}$$

On rappelle que dans un mélange non-homogène, le coefficient γ dépend non seulement de la température mais aussi de sa composition. Ceci se répercute directement sur la vitesse du son dans le mélange :

$$c = \sqrt{\gamma r T} = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}} \tag{1.23}$$

et introduit des difficultés supplémentaires lors de la simulation numérique d'écoulements faisant intervenir des espèces ayant des γ différents [1] [72]. Ce point sera détaillé au chapitre 4 .

1.2 Équations de bilan

1.2.1 Conservation de la masse et des espèces chimiques

L'équation de conservation des espèces chimiques s'écrit, de façon générale (e.g. [38]) :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha \left(u_j + V_{\alpha j}\right)}{\partial x_j} = \dot{\omega_\alpha} \tag{1.24}$$

où u_j et $V_{\alpha j}$ (m.s^{-1}) sont respectivement la vitesse du fluide (du mélange) et la vitesse de diffusion de l'espèce α (dans le mélange) dans la direction x_j, et où $\dot{\omega_\alpha}$ (kg.m^{-3}.s^{-1}) est le taux de production de l'espèce α par les processus chimiques (explicitée au § 1.3). Ces deux dernières quantités sont cruciales en simulation numérique d'écoulements réactifs et ont fait l'objet de nombreuses études afin de trouver un compromis entre précision et coût de calcul. Une remarquable synthèse en a été faite par Hilbert *et al.* [66]. En sommant (1.24) sur toutes les espèces, on retrouve l'équation de continuité pour le mélange :

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} (1.24) \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{1.25}$$

On peut écrire (1.24) en introduisant le flux de masse $J_{\alpha j}$ de l'espèce α dans la direction x_j

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} + \dot{\omega_\alpha} \tag{1.26}$$

avec

$$J_{\alpha j} = \rho Y_\alpha V_{\alpha j} \quad (\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}) \qquad ; \qquad \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} J_{\alpha j} = 0 \tag{1.27}$$

Cette dernière condition doit être satisfaite par le modèle de diffusion retenu (voir § 1.4.1).

1.2.2 Équation de l'énergie

L'équation de l'énergie traduit le premier principe de la thermodynamique, à savoir que la variation de l'énergie totale (*i.e.* la somme des énergies interne, cinétique et potentielle) d'un élément de fluide est due à la somme des travaux des forces appliquées à l'élément et au flux de chaleur apporté ou retiré à ce même élément. En négligeant l'énergie potentielle de pesanteur, l'énergie totale par unité de masse de fluide est :

$$e_t = e + \frac{1}{2} u_i u_i \tag{1.28}$$

où l'énergie interne du mélange est donnée par (1.20). En faisant usage de (1.16), il vient :

$$e_t = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \left(\Delta h^0_{f,\alpha} + \int_{T_0}^{T} Cp_\alpha(\theta) d\theta \right) Y_\alpha - rT + \frac{1}{2} u_i u_i \tag{1.29}$$

qui est régie par l'équation de transport :

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho e_t + p \right) u_j}{\partial x_j} = \rho f_i u_i - \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.30}$$

où $\dot{q}_j$ est le flux de chaleur dans la direction x_j et τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses. Pour la suite, nous introduisons l'équation pour l'énergie interne e sous forme nécessairement non-conservative (ou au mieux conservative faible) :

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_j \frac{\partial e}{\partial x_j} \right) = -p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T" \tag{1.31}$$

Le taux de dégagement de chaleur par les réactions chimiques, (qui était inclus dans la définition de e_t dans (1.30), et n'y figurant donc pas explicitement) est :

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_T" &= -\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} e_\alpha \dot{\omega_\alpha} \\ &= -\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} (h_\alpha - r_\alpha T) \dot{\omega_\alpha} \\ &= -\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \left(\Delta h^0_{f,\alpha} + \int_{T_0}^{T} Cp_\alpha(\theta) d\theta - \frac{\mathcal{R}}{M_\alpha} T \right) \dot{\omega_\alpha} \end{aligned} \tag{1.32}$$

Choix de la base thermodynamique

Le choix de la base thermodynamique pour le calcul des chaleurs spécifiques et des enthalpies de formation est dicté par le schéma cinétique retenu. Les schémas de Dagaut et de Maas et Warnatz sont associés à la base NASA-Glenn de la suite CHEMKIN [77]. Le schéma de l'ONERA est associé à la base thermodynamique de Burcat [15]. Ces différentes bases sont données en annexe A.

1.2.3 Équations pour la quantité de mouvement

Les équations pour la quantité de mouvement traduisent le principe fondamental de la dynamique. Nous les rappelons ici pour les formulations conservative et convective. Bien que ces formulations soient mathématiquement équivalentes (pour des champs suffisamment réguliers), leur comportement est très différent lors de leur résolution numérique. L'utilisation de méthodes numériques à haut pouvoir de résolution (méthodes spectrales [17], schémas compacts centrés d'ordre élevé [86]) associés à la forme divergente peut conduire à des erreurs d'*aliasing* importantes dans le cas de champs ayant un contenu spectral très riche, comme c'est le cas pour les DNS et surtout pour les LES. On préférera alors la forme convective, conduisant à des simulations plus stables en l'absence de viscosité numérique [43]. En revanche, la forme divergente met en avant la sous-caractéristique hyperbolique forte des équations de Navier-Stokes et sera

préférée dans le cas d'écoulements choqués où des méthodes intrinsèquement dissipatives sont indispensables pour résoudre les discontinuités (schémas à capture de choc, TVD, WENO, ...). On reviendra plus en détail sur ce point à la section 1.5 où le choix du système final à résoudre sera discuté en fonction de l'approche envisagée (DNS, LES, MILES) et des méthodes numériques retenues.

La formulation non-conservative ou convective est :

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)+\frac{\partial p}{\partial x_i}=\rho f_i+\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.33}$$

où la pression p est donnée par (1.10), la masse volumique ρ vérifie (1.25) et f_i sont les forces à distance par unité de masse (e.g. pour la pesanteur, $f_i=-g_i$).
La formulation conservative, ou divergente, est :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t}+\frac{\partial\left(\rho u_i u_j+p\delta_{ij}\right)}{\partial x_j}=\rho f_i+\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.34}$$

1.3 Cinétique chimique

La manière la plus simple de décrire une réaction chimique de combustion est :

$$\nu'_F\mathrm{F}+\nu'_O\mathrm{O}\rightarrow\mathrm{P} \tag{1.35}$$

où

- ν'_F et ν'_O sont respectivement les coefficients stœchiométriques du combustible F et de l'oxydant O
- P représente les produits issus de cette réaction.

Ce bilan, global et irréversible, ne détaille pas les mécanismes mis en jeu au cours du processus chimique et ne peut donner qu'une estimation de l'état final et des caractéristiques des flammes : délai d'inflammation, vitesse fondamentale, structure des fronts de flamme, limite d'extinction etc. Pour connaître avec précision ces caractéristiques, il faut s'intéresser au mécanisme réel de la combustion, composé de plusieurs réactions élémentaires réversibles faisant intervenir toutes les espèces produites au cours de la combustion : c'est le schéma cinétique.

1.3.1 Production par les termes sources chimiques

Considérons un système chimique de N_{esp} espèces réagissant selon R réactions chimiques élémentaires du type :

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}}\nu'_{\alpha r}\mathrm{A}_\alpha\rightleftharpoons\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}}\nu"_{\alpha r}\mathrm{A}_\alpha \qquad r=[1,...,R] \tag{1.36}$$

où A_α symbolise l'espèce chimique α et où $\nu'_{\alpha r}$ et $\nu"_{\alpha r}$ sont les coefficients stœchiométriques de l'espèce α dans la réaction r parmi R réactions au total.

La constante de vitesse de la réaction élémentaire r (sans dimension) dépend de la température *via* la loi d'Arrhenius généralisée :

$$K_r = A_r T^{b_r} \exp\left(-\frac{E_r}{\mathcal{R}T}\right) \tag{1.37}$$

où A_r est le facteur pré-exponentiel et E_r l'énergie d'activation de la réaction.

La vitesse d'avancement de la réaction est fonction des concentrations molaires des espèces réagissant

$$\dot{\omega}_r = K_r \prod_{\beta=1}^{N_{esp}} C_\beta^{\nu'_{\beta r}} \qquad (\mathrm{mol.m^{-3}.s^{-1}}) \tag{1.38}$$

On note respectivement K_r^d et K_r^i les constantes de réaction directe et inverse de la réaction r. Ces constante de réaction sont reliées par la constante d'équilibre K_r^e :

$$K_r^i = \frac{K_r^d}{K_r^e} \qquad ; \qquad K_r^e = \left(\frac{p_a}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \nu_{\alpha r}} \exp\left(\frac{\Delta S_r^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_r^0}{\mathcal{R}T}\right) \tag{1.39}$$

où ΔH_r^0 et ΔS_r^0 représentent respectivement les variations d'enthalpie et d'entropie au cours de la réaction, à pression atmosphérique.

La vitesse d'avancement globale est alors :

$$\dot{\omega}_r = K_r^d \prod_\beta C_\beta^{\nu'_{\beta r}} - K_r^i \prod_\beta C_\beta^{\nu"_{\beta r}} \tag{1.40}$$

Dans certaines réactions de dissociation/recombinaison dites « avec troisième corps », une troisième espèce chimique intervient pour en modifier la vitesse d'avancement, mais pas l'issue finale (espèces produites, quantités finales). Par exemple :

$$\mathrm{H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M}$$

Les espèces chimiques M sont caractérisées par leur efficacité $e_{\beta r}$. Celle-ci dépend de l'espèce et de la réaction considérées. On modifie alors (1.40), ou éventuellement (1.38), de la façon suivante :

$$\dot{\omega}_r = \left(\sum_{\beta=1}^{N_{esp}} e_{\beta r} C_\beta\right) \left[K_r^d \prod_\beta C_\beta^{\nu'_{\beta r}} - K_r^i \prod_\beta C_\beta^{\nu"_{\beta r}}\right] \tag{1.41}$$

Finalement, la quantité d'espèce α produite ($\nu'_{\alpha r} = 0$) ou consommée ($\nu"_{\alpha r} = 0$) au cours de la réaction r est :

$$\dot{\omega}_{\alpha r} = M_\alpha \left(\nu"_{\alpha r} - \nu'_{\alpha r}\right) \dot{\omega}_r \qquad (\mathrm{kg.m^{-3}.s^{-1}}) \tag{1.42}$$

et pour l'ensemble des réactions du mécanisme cinétique,

$$\dot{\omega}_\alpha = \sum_{r=1}^{R} \dot{\omega}_{\alpha r} \tag{1.43}$$

Dans le cas où la réaction n'est pas une réaction élémentaire, les exposants des concentrations molaires $C_\alpha = \rho Y_\alpha / M_\alpha$ ne sont pas égaux aux coefficients stœchiométriques, mais à des constantes fournies avec le schéma cinétique.

1.3.2 Schémas cinétiques

Nous avons testé trois schémas cinétiques H_2/O_2. Le premier a été développé par Maas et Warnatz [91] et ajusté sur certaines constantes selon [133]. Ce schéma contient 37 réactions élémentaires (18 réactions réversibles + 1 réaction directe) dans lesquelles participent 9 espèces chimiques : H, H_2, O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2 et N_2. L'azote N_2 est supposé inerte et n'intervient qu'en tant que troisième corps. Ce schéma cinétique a été utilisé par Stoukov [122] et nous a servi à vérifier numériquement le bon comportement des codes en 0D (§ 1.6).
Le second schéma a été élaboré au sein d'ICARE-CNRS par Dagaut [28]. Il comporte 17 réactions réversibles et fait intervenir les mêmes 9 espèces que celui de Maas et Warnatz. Ce schéma est adapté pour la propagation de flammes laminaires (c.f. § 2.4.1). Enfin, nous avons utilisé un modèle cinétique réduit provenant de l'ONERA. Ce schéma a été appliqué avec succès lors de calculs de combustion supersonique [29]. Il est composé de 6 espèces réactives : H, H_2, O, O_2, OH et H_2O et d'une espèce inerte Ar qui interviennent dans 7 réactions réversibles. Les schémas cinétiques de Dagaut et de l'ONERA donnent des résultats comparables en termes de délais d'auto-inflammation dans des conditions au-dessous de la limite d'explosion [30]. Davidenko a montré que le schéma de l'ONERA est bien adapté pour la simulation de détonations [31]. Les trois mécanismes sont détaillés en annexe (C).

1.4 Modèle de transport moléculaire

Du point de vue de la mécanique des fluides, les interactions au niveau moléculaire entre les constituants du gaz se traduisent par des coefficients macroscopiques mesurables. Le passage du microscopique au macroscopique est l'objet de la théorie cinétique des gaz [20][69]. Schématiquement, ce passage se fait à partir d'un *modèle collisionnel* (sphère rigide, Lennard-Jones, Stockmayer...) visant à décrire les interactions entre les molécules. Dans un gaz peu dense, on se limite aux collisions binaires, les collisions entre trois molécules ou plus étant trop peu probables. On définit par ailleurs une fonction de densité de probabilité pour la répartition des vitesses dans le gaz, régie par l'équation de Boltzmann. En multipliant l'équation de Boltzmann par la masse m_α de la molécule d'espèce α, par $m_\alpha \overrightarrow{v}_\alpha$ ou par $1/2 m_\alpha v_\alpha^2$, on obtient respectivement les équations de Enskog pour le transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Ces équations sont résolues par la méthode de Chapman-Enskog dans le cas proche équilibre pour lequel la fonction de distribution est la gaussienne de Maxwell-Boltzmann. De la théorie découlent les expressions des flux de masse, des flux de chaleur et des contraintes de viscosité. Les coefficients de transport pour les espèces pures sont déterminés à partir du modèle d'interaction sous forme d'intégrales collisionnelles. On rappelle ci-après l'essentiel des résultats de la théorie et les modèles retenus.

1.4.1 Diffusion multi-composantes

Les vitesses de diffusion [39] dans (1.24) sont :

$$V_{\alpha j} = -\sum_{\beta=1}^{N_{esp}} D_{\alpha\beta} d_{\beta j} - D_\alpha^T \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} \tag{1.44}$$

et en l'absence de forces extérieures agissant différemment sur chaque espèce :

$$d_{\alpha j} = \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + (X_\alpha - Y_\alpha) \frac{\partial \ln p}{\partial x_j} \tag{1.45}$$

Le premier terme au second membre de (1.44) représente la diffusion due aux gradients de fraction molaire et de pression, et le second terme l'effet Soret, ou diffusion thermique, ayant pour effet de faire migrer les espèces légères vers les régions chaudes et les espèces lourdes vers les régions froides. Bien que l'effet Soret puisse ne pas être négligeable dans certains cas, notamment sur les vitesses de flammes laminaires calculées, il n'est pas pris en compte dans les codes développés au cours de cette thèse pour des raisons de simplicité. De même, on négligera la diffusion barotrope (dernier terme à droite dans (1.45)).

La matrice de diffusion binaire $D = [D_{\alpha\beta}]$ s'exprime comme une série convergente difficile à calculer à partir des équations de Stefan-Maxwell-Boltzmann [38][39], le déséquilibre thermodynamique pouvant également être pris en compte [61]. On se limitera ici à l'approximation dite « d'ordre zéro » de Hirschfelder-Curtiss, qui semble être à l'heure actuelle un compromis souvent retenu dans la communauté numéricienne en écoulement multi-composants. On trouvera une étude détaillée des (faibles) conséquences de ce modèle simplifié sur la structure de flammes H_2/air dans [40] et dans la thèse de J. de Charentenay (modèle M1 *vs.* M2) [32].

L'approximation de Hirschfelder-Curtiss revient à définir, dans une approximation en premier gradient (ou fickienne), un coefficient de diffusion multi-composants $\mathcal{D}_{\alpha m}$ pour l'espèce α dans le mélange. On a alors :

$$V_{\alpha j} = -\frac{\mathcal{D}_{\alpha m}}{X_\alpha}\frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} \tag{1.46}$$

avec

$$\mathcal{D}_{\alpha m} = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\beta=1_{\beta\neq\alpha}}^{N_{esp}} X_\beta / D_{\alpha\beta}} \tag{1.47}$$

Cette expression présente une singularité en 0/0 dans le cas mono-espèce, qui peut être contournée par divers artifices numériques (par exemple, par ajout d'une quantité négligeable d'une ou plusieurs espèces).

On peut écrire globalement le flux de masse de l'espèce α :

$$J_{\alpha j} = \rho Y_\alpha V_{\alpha j} = -\rho \mathcal{D}_{\alpha m}\frac{M_\alpha}{M}\frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} \qquad (\mathrm{kg.m^{-2}.s^{-1}}) \tag{1.48}$$

L'inconvénient de cette approche est que la conservation de la masse (1.25) n'est plus assurée :

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} J_{\alpha j} \neq 0 \tag{1.49}$$

sauf si toutes les espèces ont le même coefficient de diffusion (comme dans le cas binaire, $N_{esp} = 2$, où $D_{\alpha\beta} = D_{\beta\alpha}$). Une méthode classique pour pallier cette lacune est d'ajouter une vitesse de correction :

$$V_j^c = -\sum_{\beta=1}^{N_{esp}} Y_\beta V_{\beta j} = \sum_{\beta=1}^{N_{esp}} \mathcal{D}_{\beta m}\frac{M_\beta}{M}\frac{\partial X_\beta}{\partial x_j} \tag{1.50}$$

à la vitesse de diffusion (1.46) dans l'équation (1.24), ce qui revient à définir des flux de masse corrigés :

$$J_{\alpha j}^c = \rho Y_\alpha \left(V_{\alpha j} + V_j^c\right) \qquad ; \qquad \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} J_{\alpha j}^c = 0 \tag{1.51}$$

dans (1.24) qui devient :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial J^c_{\alpha j}}{\partial x_j} + \dot{\omega_\alpha} \tag{1.52}$$

1.4.2 Contraintes visqueuses

On s'intéresse uniquement aux lois de comportement newtoniennes, soit :

$$\tau_{ij} = \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu\right)\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.53}$$

L'impact de la viscosité volumique κ ne se fait sentir que dans les cas extrêmes d'écoulements fortement compressibles [12], sur la structure des ondes de chocs par exemple, et est négligeable dans la plupart des cas. On adopte donc l'hypothèse de Stokes $\kappa = 0$.

La formule empirique de Wilke est une loi appropriée pour évaluer la viscosité μ d'un mélange de gaz [75][76], bien que d'autres approches basées sur la théorie cinétique des gaz soient plus rigoureuses [38]. On adopte donc cette relation :

$$\mu = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \frac{X_\alpha \mu_\alpha}{\sum_{\beta=1}^{N_{esp}} X_\beta \phi_{\alpha\beta}} \tag{1.54}$$

où la fonction de corrélation

$$\phi_{\alpha\beta} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{\mu_\alpha}{\mu_\beta}}\left(\frac{M_\beta}{M_\alpha}\right)^{1/4}\right)^2}{\sqrt{8(1 + M_\alpha/M_\beta)}} \tag{1.55}$$

peut être pré-calculée et tabulée pour chaque couple $\{\alpha, \beta\}$, seul le rapport des viscosités partielles μ_α/μ_β des constituants du mélange devant être évalué en cours de calcul.

1.4.3 Flux de chaleur

Selon la théorie cinétique [39][41], l'expression du flux de chaleur $\dot{q_j}$ est (en négligeant les flux radiatifs) :

$$\dot{q_j} = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \rho h_\alpha Y_\alpha V_{\alpha j} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - p \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} D^T_\alpha d_{\alpha j} \tag{1.56}$$

Le premier terme correspond au flux d'enthalpies partielles et est nul dans le cas mono-espèce ou en situation homogène (prémélangée). Le second terme est le flux de chaleur par conduction selon la loi de Fourier où λ (W.m^{-1}.K^{-1}) est le coefficient de conductivité[3] thermique du mélange. Le dernier terme correspond à l'effet Dufour, de même origine que l'effet Soret, et est négligeable dans tous les cas [66]. La conductivité thermique d'un mélange de gaz peut être évaluée par la formule de Wilke (1.54)(1.55) en remplaçant μ_α par λ_α. La variante de Wassiljewa consiste à remplacer (1.55) par la fonction de corrélation de Mason et Saxena [109]. Il est également possible d'utiliser la formule de Mathur [96], recommandée par Kee [75] :

$$\lambda = \frac{1}{2}\left[\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} X_\alpha \lambda_\alpha + \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} X_\alpha/\lambda_\alpha}\right] \tag{1.57}$$

[3] ou de conductibilité

Pour des raisons d'économie, nous avons retenu la première méthode, le pré-calcul de la corrélation (1.55) étant commun aux deux coefficients de transport.

1.4.4 Coefficients de transport d'une espèce pure - diffusion binaire

Les propriétés de transport des espèces pures sont calculées selon les modèles de la théorie cinétique des gaz implémentés dans CHEMKIN [76]. Pour nos applications, l'évaluation directe des coefficients de transport par ces méthodes est trop coûteuse. Nous avons réalisé *a priori* une interpolation polynomiale de degré 2 des viscosités et conductivités thermiques de chaque espèce sur une plage de température de 100 K à 4000 K, plus large que nécessaire pour les applications visées. Les coefficients de diffusion binaire pour chaque couple d'espèces ont été approchés par une loi en puissance. Les formules théoriques et les procédures d'approximation sont détaillées ci-après.

Viscosité μ_α

La viscosité moléculaire d'une espèce α ne dépend que de la température et est donnée par :

$$\mu_\alpha = \frac{5}{16}\frac{\sqrt{\pi M_\alpha k_B T}}{\pi \sigma_\alpha^2 \Omega^{(2,2)*}} \tag{1.58}$$

où

- σ_α est le diamètre de collision de Lennard-Jones ;
- k_B est la constante de Boltzmann ;
- $\Omega^{(2,2)*}$ est l'intégrale de collision (basée sur le potentiel de Stockmayer) donné dans Monchick and Mason [99].

Cette formule est approchée par le polynôme :

$$\mu_\alpha = \mu_{\alpha 0} + \mu_{\alpha 1} T + \mu_{\alpha 2} T^2 \tag{1.59}$$

dont la valeur est calculée par l'algorithme de Hörner. Les coefficients $\mu_{\alpha 0}$, $\mu_{\alpha 1}$ et $\mu_{\alpha 2}$ pour chaque espèce sont donnés en annexe B.

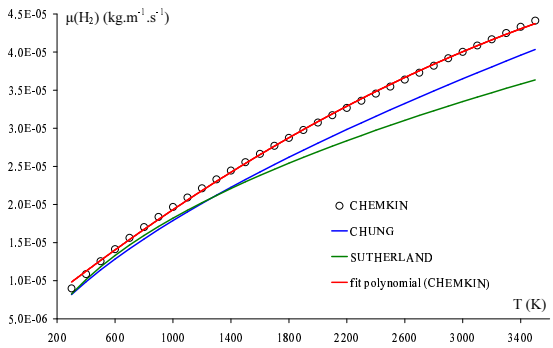


FIG. 1.1: Viscosité de H_2 en fonction de la température.

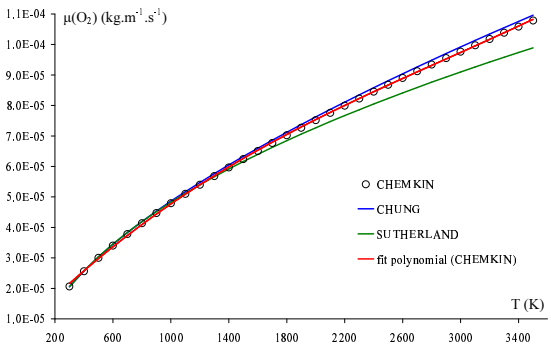


FIG. 1.2: idem fig. 1.1 : O_2.

Les figures 1.1 et 1.2 présentent la viscosité de H_2 et O_2 en fonction de la température par différentes méthodes de calcul. Les cercles correspondent aux valeurs de référence (1.58) issues de CHEMKIN, la régression polynomiale de degré 2 est représentée par la ligne rouge. L'écart

maximal entre la viscosité partielle d'une espèce α évaluée par CHEMKIN et par la régression polynomiale est de 1,5% sur la plage 300 K à 3500 K. On présente également sur ces figures, la viscosité partielle calculée par deux méthodes empiriques : la méthode de Chung (ligne bleue) et la méthode de Sutherland (ligne verte) [109]. La méthode de Sutherland a tendance à sous-estimer la viscosité partielle (entre 3 et 11%) par rapport aux valeurs de CHEMKIN pour les deux exemples présentés. La méthode de Chung présente un écart variant entre 2 et 8%.

Conductivité thermique λ_α

La conductivité thermique d'une espèce α est composée d'une contribution d'énergie de translation, de rotation et de vibration [134] :

$$\lambda_\alpha = \frac{\mu_\alpha}{M_\alpha}(f_{trans.}C_{v,trans.} + f_{rot.}C_{v,rot.} + f_{vib.}C_{v,tvib.}) \tag{1.60}$$

Les expressions des capacités de chaleur molaire $C_{v,trans.}$, $C_{v,rot.}$ et $C_{v,vib.}$ dépendent de la géométrie de la molécule concernée. Celles-ci sont données dans [75] avec les expressions de $f_{trans.}$, $f_{rot.}$ et $f_{vib.}$. On procède au même type d'interpolation que pour la viscosité partielle :

$$\lambda_\alpha = \lambda_{\alpha 0} + \lambda_{\alpha 1}T + \lambda_{\alpha 2}T^2 \tag{1.61}$$

Les coefficients des polynômes sont donnés en annexe B.

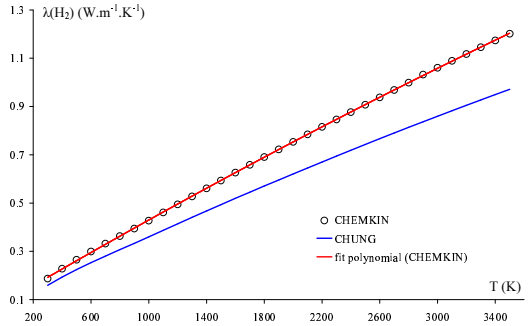


FIG. 1.3: Conductivité thermique de H_2 en fonction de la température.

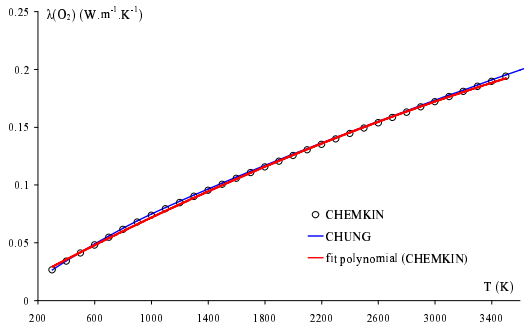


FIG. 1.4: idem fig. 1.3 : O_2.

Les figures 1.3 et 1.4 présentent la conductivité thermique de H_2 et O_2 en fonction de la température par différentes méthodes. La méthode de Chung [109] présente un écart d'un peu plus de 15% par rapport aux résultats de CHEMKIN pour l'espèce H_2. En revanche, l'accord est excellent pour O_2.

Coefficient de diffusion binaire $D_{\alpha\beta}$

Le coefficient binaire de diffusion de l'espèce α dans l'espèce β dépend de la température et de la pression :

$$D_{\alpha\beta} = \frac{3}{16}\frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3/M_{\alpha\beta}}}{p\pi\sigma_{\alpha\beta}^2\Omega^{(1,1)*}} \tag{1.62}$$

où

– $M_{\alpha\beta}$ représente la masse molaire réduite du couple d'espèces α, β : $M_{\alpha\beta} = \frac{M_\alpha M_\beta}{M_\alpha + M_\beta}$,
– $\sigma_{\alpha\beta}$ est le diamètre de collision réduit (même type de formule que pour $M_{\alpha\beta}$),
– $\Omega^{(1,1)*}$ est l'intégrale de collision (basée sur le potentiel de Stockmayer).

On approche les coefficients de diffusion binaire par une loi en puissance de la température à $p = 1$ bar, optimale sur la plage [300 K, 3500 K]. Les coefficients sont donnés en annexe B.

$$D_{\alpha\beta} = \frac{1}{p} D_{\alpha\beta 0} T^{b_{\alpha\beta}} \tag{1.63}$$

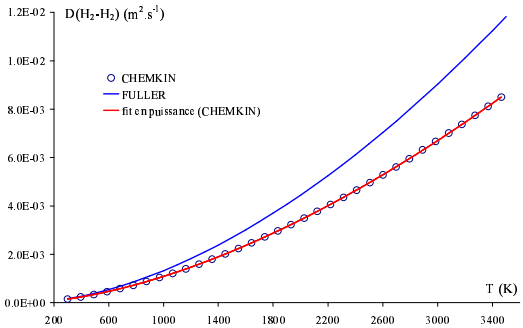


FIG. 1.5: Coefficient de self-diffusion de H_2 en fonction de la température.

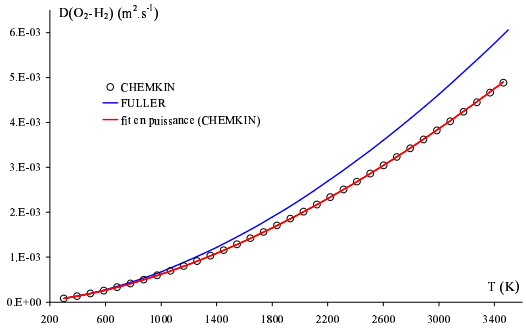


FIG. 1.6: Coefficient de diffusion de H_2 dans O_2 en fonction de la température.

Les figures 1.5 et 1.6 présentent le coefficient de diffusion de H_2 dans lui-même et dans O_2 en fonction de la température à $p = 1$ bar par différentes méthodes de calcul. Les cercles correspondent aux valeurs de CHEMKIN (1.62), la régression en puissance (1.63) est représentée par la ligne rouge. L'écart est inférieur à 1%. On présente également sur ces graphiques, les coefficients de diffusion binaire calculés par la méthode semi-empirique de Fuller (ligne bleue) [109]. L'écart entre cette méthode et (1.62) est d'environ 15 %. .

1.5 Équations de Navier-Stokes : choix de la forme

Dans cette section sont assemblées les équations de Navier-Stokes pour un écoulement compressible réactif multi-espèce, détaillées précédemment.
Nous disposons de N_{esp} équations d'espèces et de la conservation de la masse. Le système étant surdéterminé, il est donc possible d'éliminer une de ces équations. On choisit de résoudre l'équation de conservation de la masse, et $N_{esp} - 1$ équations d'espèces. La dernière espèce N_{esp} est calculée par $Y_{N_{esp}} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}-1} Y_\alpha$. La conservation globale de la masse étant respectée par l'ajout d'une vitesse de correction à la vitesse de convection dans l'équation des espèces, le calcul de la dernière espèce est correct. Dans nos simulations, la dernière espèce correspond au diluant (N_2 ou Ar).

1.5.1 Formulation convective

La formulation convective en variables primitives est utilisée dans le programme de simulation numérique directe. Cette formulation permet d'éviter les oscillations au voisinage des discontinuités de contact [74], les erreurs d'*aliasing* [43] et elle diminue le nombre d'opérations au niveau continu pour la résolution du problème.

Les variables primitives sont $\rho, u, v, w, T, Y_1, \ldots, Y_{N_{esp}-1}$. On résout donc l'équation de conservation de l'énergie pour la température. Cette équation est déterminée en faisant usage de (1.24) corrigée selon (1.52) et de la différentielle totale de l'énergie interne :

$$de = d(h - rT) = CvdT + \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} (h_\alpha - r_\alpha T) dY_\alpha$$

Finalement, le système d'équations sous forme convective-primitive s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} = 0 \tag{1.64}$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.65}$$

$$\begin{aligned} \rho Cv \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} &= \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T" \\ - \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} r_\alpha \frac{\partial J^c_{\alpha j}}{\partial x_j} T &- \frac{\partial T}{\partial x_j} \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} Cp_\alpha J^c_{\alpha j} \end{aligned} \tag{1.66}$$

$$\rho \left(\frac{\partial Y_\alpha}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial J^c_{\alpha j}}{\partial x_j} + \dot{\omega_\alpha} \tag{1.67}$$

1.5.2 Formulation conservative

Dans le programme de MILES, les équations de Navier-Stokes sont résolues sous forme conservative pour les variables conservatives $\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho e_t, \rho Y_1, \ldots, \rho Y_{N_{esp}-1}$. On choisit cette formulation pour pouvoir capturer correctement les ondes de choc éventuelles.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{1.68}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.69}$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j e_t}{\partial x_j} + \frac{\partial p u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} \tag{1.70}$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_\alpha}{\partial x_j} = - \frac{\partial J^c_{\alpha j}}{\partial x_j} + \dot{\omega_\alpha} \tag{1.71}$$

1.6 Validation des modèles de thermodynamique et de cinétique chimique

La première étape d'intégration des librairies de calcul des termes sources chimiques et des variables thermodynamiques dans les codes de DNS et MILES a été leur implémentation dans un programme 0D. Ceci a permis de valider la cinétique chimique et la thermodynamique par comparaison avec les résultats obtenus par Stoukov [122] dans sa thèse.

On réalise des expériences numériques d'auto-inflammation de H_2 dans de l'air. Pour cela, on se place dans les mêmes conditions initiales que celles proposées par Stoukov. On utilise le schéma

cinétique de Maas et Warnatz et la base thermodynamique NASA-Glenn (donnée en annexe A). On travaille à volume constant, soit :

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{de_t}{dt} = 0$$

L'équation de conservation de l'énergie pour la température (1.66) devient :

$$\rho Cv \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T" \tag{1.72}$$

où $\dot{\omega}_T$" est donné par (1.32). La pression p est calculée à partir de la loi d'état (1.10). Les six essais présentés dans cette section ont été effectués dans les conditions stœchiométriques pour une pression initiale de 1 bar. La température initiale varie de 1000 K à 2300 K.
L'avancement en temps est réalisé par un schéma Runge-Kutta d'ordre 3 (§ 2.2.4). Le pas de temps est constant à 2.10^{-9} s.

La figure 1.7 présente la température, la pression et les fractions massiques de H_2 et de H_2O à l'état final en fonction de la température initiale. On observe une bonne corrélation entre nos résultats et ceux donnés par Stoukov. Ceci nous permet de valider le modèle thermodynamique choisi, l'état final ne dépendant que de celui-ci.
Le délai d'inflammation correspond au temps nécessaire pour qu'un mélange à température et pression données s'enflamme de façon autonome. Ce temps caractéristique du schéma cinétique est tracée sur la figure 1.8 en fonction de la température initiale. On constate un bon accord entre nos résultats et ceux de Stoukov ce qui nous permet de valider le calcul des termes sources chimiques.

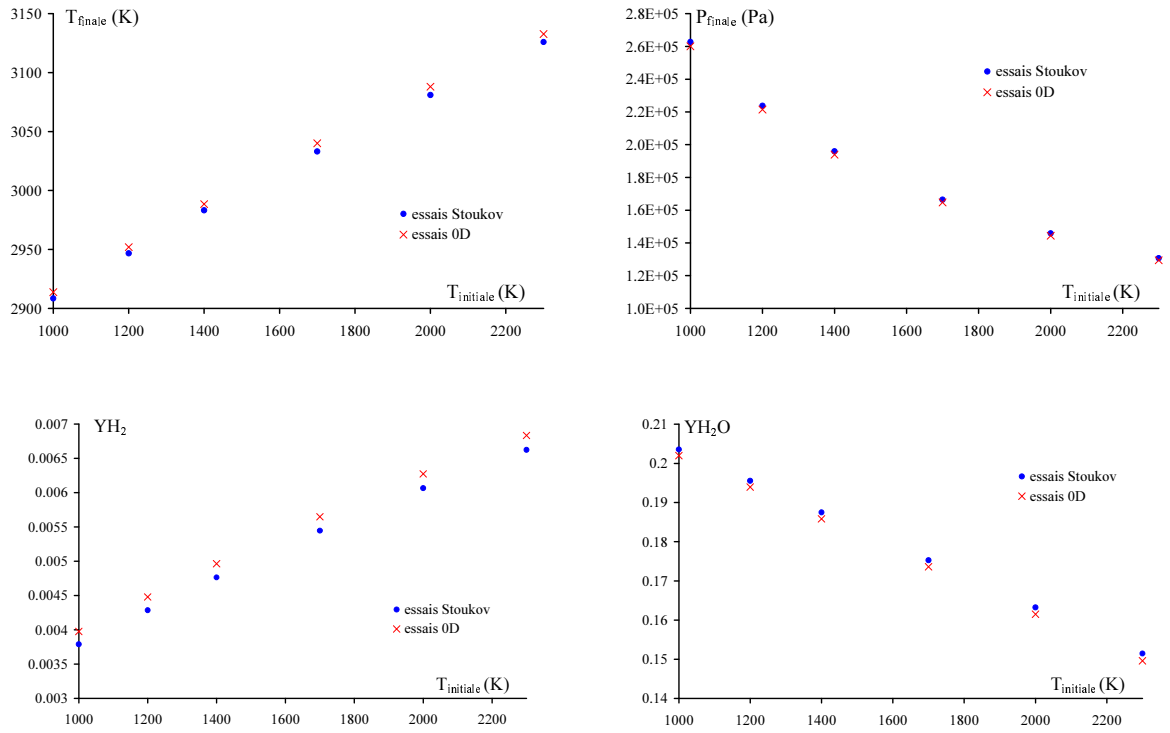


FIG. 1.7: De gauche à droite, et de haut en bas : T, p, Y_{H_2} et Y_{H_2O} en fonction de la température initiale.

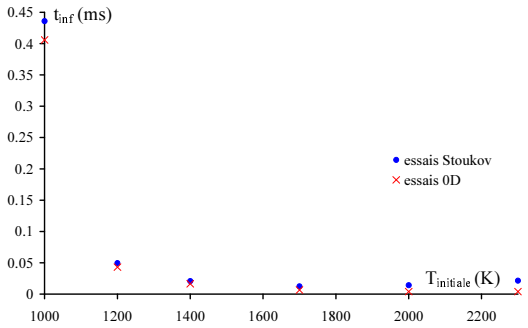


FIG. 1.8: Délai d'inflammation en fonction de la température initiale.

Chapitre 2

Simulation numérique directe : le code Compact

La simulation numérique directe d'un écoulement turbulent réactif est une tâche difficile du fait de la multitude d'échelles spatio-temporelles présentes. La discrétisation du domaine de calcul est directement liée aux échelles que l'on souhaite représenter. Dans le cas d'une simulation numérique directe (SND ou DNS pour *Direct Numerical Simulation*), c'est l'ensemble de ces échelles que l'on souhaite simuler, des plus petites échelles (échelle de Kolmogorov, front de flamme...) aux plus larges. Il en résulte deux inconvénients majeurs : le nombre de Reynolds ne doit pas être trop élevé, et au vu des coûts de calcul, le domaine de simulation ne doit pas être trop grand (mais suffisamment pour contenir les plus grands tourbillons). Malgré ces restrictions, l'utilisation de méthodes numériques adaptées permet d'obtenir des résultats précis qui font de la DNS un outil efficace pour réaliser des études fondamentales ou valider des modèles en combustion turbulente.

Grâce au développement des calculateurs à hautes performances, de nombreux travaux ont été consacrés à la simulation numérique directe des écoulements turbulents. Historiquement, cette approche a été développée dans le cadre des écoulements turbulents non-réactifs [7, 52, 87]. Dans le domaine des écoulements réactifs, les premières simulations d'interactions flamme/turbulence ont été réalisées pour des écoulements incompressibles [6]. Ces dernières années, l'augmentation de la puissance informatique a conduit à envisager des simulations utilisant les équations compressibles et une chimie globale dans des domaines de calcul à deux ou trois dimensions [105, 129]. Par la suite, l'utilisation de mécanismes cinétiques détaillés en deux dimensions [8, 21, 64, 65] puis plus récemment en trois dimensions [63, 123] a permis d'étudier la structure fine des flammes turbulentes.

La simulation numérique directe consiste à résoudre les équations de transport des variables instantanées décrivant l'écoulement (1.64)-(1.67) de la manière la plus exacte possible. Deux approches répondent à ces exigences :

- les schémas à faibles pouvoir de résolution associés à un maillage suffisamment fin pour s'assurer que la gamme d'échelles d'intérêt se trouve dans la plage de nombres d'onde correctement résolue,
- les schémas à haut pouvoir de résolution qui permettent de réduire le nombre de points nécessaires mais coûtent plus cher en temps de calcul par point de maillage.

Nous avons choisi d'utiliser ici la deuxième approche sur la base des schémas compacts présentés

dans la suite.

2.1 Les schémas compacts aux différences finies

2.1.1 État de l'art

Les schémas compacts sont basés sur l'approximation de Padé, donnée originellement par Kopal [79]. Les premiers travaux sur les schémas compacts ont été réalisés par Hirsch [68] (1975), Adam [3] (1977) et Lele [86] (1992). Ces méthodes ont un comportement quasi-spectral dans leur capacité à capturer précisément une large plage de nombres d'onde (tout en laissant une plus grande liberté sur la géométrie et les conditions limites que les schémas spectraux). Lele propose dans son article [86] une généralisation des schémas classiques de Padé. Il décrit une famille de schémas compacts aux différences finies d'ordre élevé pouvant être utilisés pour l'approximation de dérivées mais également pour des techniques de filtrage et d'interpolation. Depuis cet article de 1992, les schémas de Padé ont été largement étudiés et utilisés.

La plupart des schémas compacts utilisés sont centrés [3, 60, 86]. Ceux-ci sont intéressants car bien qu'ils produisent des erreurs de dispersion, ils ne génèrent aucune erreur de dissipation numérique. Ces schémas sont cependant moins robustes et souvent couplés à une procédure de filtrage (équivalent à l'ajout d'une dissipation numérique) pour stabiliser les simulations et réduire les erreurs d'*aliasing*. Il est également possible d'utiliser des schémas décentrés amonts ou *upwind* ; [4, 108, 138] en sont des exemples typiques. Rai et Moin montrent [108] que les schémas *upwind* restent robustes même quand ils sont très précis. La dissipation numérique introduite par les schémas décentrés est suffisante pour contrôler les erreurs d'*aliasing*. À ce sujet, Park [102] montre par une analyse dynamique de l'erreur de discrétisation que l'erreur d'*aliasing* diminue avec l'augmentation de la dissipation numérique. Il montre également l'existence d'un taux de dissipation optimal qui minimise l'erreur de discrétisation lors de l'utilisation d'un schéma décentré.
Le type de conditions limites (périodique/non-périodique) impose la forme du schéma aux bords (centré ou décentré). Dans [113], Sengupta propose une analyse de schémas compacts centrés et décentrés en termes de précision dans l'espace spectral, de stabilité numérique et de conservation de relation de dispersion. Par une méthode d'analyse spectrale développée dans cet article, il évalue diverses conditions aux limites et leur influence sur le domaine intérieur. Il montre ainsi que certains schémas compacts bien connus pour être stables en espace au sens GKS (théorie Gustafsson Kreiss Sundström [58]) et en temps, se révèlent être instables pour certaines échelles spatiales. Ces instabilités sont attribuées aux conditions limites, et Sengupta propose un schéma compact avec un traitement spécial des conditions limites pour remédier aux problèmes. Dans [18] et [19], Carpenter *et al.* obtiennent la même conclusion et proposent une série de schémas compacts d'ordre 4 et 6 à la fois stables asymptotiquement et en GKS.

On peut noter les efforts de recherche effectués sur l'extension des schémas compacts aux maillages non uniformes et non structurés. Gamet *et al.* [48] développent un schéma compact d'ordre 4 pour l'approximation de la dérivée première (et d'ordre 3 pour la dérivée seconde) sur des maillages non-uniformes. Les métriques sont incluses directement dans les coefficients du schéma contrairement aux méthodes utilisant la transformation jacobienne.

D'autres auteurs ont étendu le champ d'applications originel des schémas compacts. Par exemple, un schéma modifié de Padé d'ordre 6 est utilisé par Mahesh *et al.* pour simuler l'in-

teraction entre une onde de choc et une couche de mélange [92]. De même, la formule de Padé est utilisée dans le développement d'un schéma numérique non-linéaire d'ordre 3 et 4 par Deng et Maekawa [35]. Des schémas de Padé d'ordre élevé ont également servi pour des techniques de filtrage afin de diminuer les oscillations numériques et d'augmenter la stabilité de la méthode, entre autre par Gaitonde et Visbal [47, 132]. Bien que ces schémas (quand ils sont centrés) ne génèrent pas d'erreur de dissipation numérique, et qu'ils offrent un pouvoir de résolution important, il a été montré qu'ils créent des oscillations non-physiques quand ils sont appliqués à des discontinuités. C'est le phénomène de Gibbs. Pour remédier à ce problème, des schémas hybrides ont été développés. Cockburn et Shu ont créé un schéma compact non-linéaire sur le principe du schéma TVD [24]. Ce schéma a été amélioré par Yee [137]. Il existe également des schémas compacts-ENO [4] et compacts-WENO [103, 110].

Ces nombreux travaux réalisés sur les schémas compacts ont permis par différentes techniques de les rendre plus stables, mais ceci s'est effectué au profit d'une augmentation des erreurs de dissipation numérique. Faute d'un consensus sur le sujet et compte tenu de notre expérience, nous avons opté pour le schéma compact centré de Lele et aucun filtrage n'est appliqué. Le détail du schéma est explicité dans la suite.

2.1.2 Schéma compact de Lele

Dérivée première

On restreint l'étude à une direction d'espace. Le domaine de calcul est discrétisé en $N+1$ points x_i espacés d'un pas constant Δx *i.e.* tel que $x_i = i\Delta x, \quad 0 \leq i \leq N$. On note $f_i = f(x_i)$.

La forme générale de l'approximation de la dérivée première s'écrit :

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = c\frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x} + b\frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + a\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \tag{2.1}$$

Le schéma de Lele est dit semi-global car il tient compte de l'influence de tous les points du maillage pour exprimer la valeur d'une dérivée en un point particulier.

Les relations entre les coefficients a, b, c et α, β sont obtenues en écrivant les développements en série de Taylor à différents ordres de chacun des termes précédents. Le système (2.1) peut s'écrire sous forme matricielle $A\overrightarrow{F'} = B\overrightarrow{F}$ où $\overrightarrow{F}$ et $\overrightarrow{F'}$ sont respectivement le vecteur des composantes de f et de f'. Le système à résoudre est alors pentadiagonal.

Les systèmes d'équations à vérifier suivant l'ordre de précision s'écrivent :

$$\begin{aligned} a + b + c &= 1 + 2\alpha + 2\beta && \text{ordre 2} \\ a + 2^2 b + 3^2 c &= 2\frac{3!}{2!}(\alpha + 2^2\beta) && \text{ordre 4} \\ a + 2^4 b + 3^4 c &= 2\frac{5!}{4!}(\alpha + 2^4\beta) && \text{ordre 6} \end{aligned}$$

Le nombre de paramètres libres dépend de l'ordre du schéma utilisé : on aura ainsi 4 paramètres libres à l'ordre 2, 3 à l'ordre 4, et 2 à l'ordre 6. Le choix de ces paramètres libres est arbitraire. À l'ordre 6, nous choisissons α et β, on exprime alors les coefficients a, b et c en fonction de ces

deux paramètres *via* les équations précédentes :

$$a = \frac{1}{6}(9 + \alpha - 20\beta) \quad ; \quad b = \frac{1}{15}(-9 + 32\alpha + 62\beta) \quad ; \quad c = \frac{1}{10}(1 - 3\alpha + 12\beta)$$

Dans le cas de frontières non-périodiques, la dérivée au point $i = 0$ est obtenue grâce à un schéma décentré :

$$f'_0 + \alpha f'_1 = \frac{1}{\Delta x}(af_0 + bf_1 + cf_2 + df_3) \tag{2.2}$$

Dans ce cas non-homogène, le système est résolu grâce à un algorithme de Thomas [107] à un coût $\mathcal{O}$(N). En configuration périodique, le système devient cyclique. La formule de Woodbury [107] permet alors de se ramener à un système pentadiagonal.

Dérivée seconde

La forme générale de l'approximation de la dérivée seconde du schéma compact de Lele est :

$$\begin{aligned} \beta f"_{i-2} \quad + \quad & \alpha f"_{i-1} + f"_i + \alpha f"_{i+1} + \beta f"_{i+2} \\ = \quad & c\frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2} + b\frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + a\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

Les relations entre les coefficients a, b, c, α et β sont les suivantes :

$$\begin{aligned} a + b + c &= 1 + 2\alpha + 2\beta \quad \text{ordre 2} \\ a + 2^2 b + 3^2 c &= \frac{4!}{2!}(\alpha + 2^2\beta) \quad \text{ordre 4} \\ a + 2^4 b + 3^4 c &= \frac{6!}{4!}(\alpha + 2^4\beta) \quad \text{ordre 6} \end{aligned}$$

Comme précédemment, l'ordre du schéma de dérivation nous donne le nombre de paramètres libres. Dans le programme Compact, la dérivée seconde est précise à l'ordre 6 à l'intérieur du domaine. On choisit α et β comme paramètres libres, les coefficients a, b et c s'exprimant en fonction de ces paramètres :

$$a = \frac{1}{4}(6 - 9\alpha - 12\beta) \quad ; \quad b = \frac{1}{5}(-3 + 24\alpha - 6\beta) \quad ; \quad c = \frac{1}{20}(2 - 11\alpha + 124\beta)$$

De même que pour la dérivée première, un schéma décentré est utilisé au point frontière $i = 0$ dans le cas de conditions limites non-périodiques :

$$f"_0 + \alpha f"_1 = \frac{1}{\Delta x^2}(af_0 + bf_1 + cf_2 + df_3 + ef_4) \tag{2.3}$$

Le schéma centré est dégradé à l'ordre 3 pour les points i=1, N et à l'ordre 4 pour les points i=2, 3, N-2 et N-1.

Nombre d'onde modifié et pouvoir de résolution

Pour évaluer le pouvoir de résolution de la méthode de dérivation de Lele, on travaille dans l'espace spectral. On utilise ici la transformée de Fourier discrète (TFD) plutôt que la forme continue. Pour cela on considère un domaine unidimensionnel de longueur 2π ($x \in [0; 2\pi]$), discrétisé de manière uniforme sur $N + 1$ points ($x_i = i\Delta x$; $i = 0, ..., N$, avec $\Delta x = \frac{2\pi}{N}$). Toute fonction

périodique f est représentée par un ensemble de valeurs discrètes : $f = \{f_i \; ; \; i = 0, ..., N\}$. La transformée de Fourier discrète est donnée par le polynôme d'interpolation trigonométrique de degré $N/2$:

$$\begin{aligned} f_i &= \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \widehat{f}_k e^{j\frac{2\pi}{N}ik} \\ \text{où} \quad \widehat{f}_k &= \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f_i e^{-j\frac{2\pi}{N}ik} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Les opérateurs de dérivation continue sont notés d/dx pour la dérivée première, et d^2/dx^2 pour la dérivée seconde. Ils s'expriment par :

$$\frac{df}{dx}(x_i) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} jk\widehat{f}_k e^{j\frac{2\pi}{N}ik} \tag{2.5}$$

$$\frac{d^2f}{dx^2}(x_i) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} -k^2\widehat{f}_k e^{j\frac{2\pi}{N}ik} \tag{2.6}$$

Le schéma de dérivation donne une valeur approchée des dérivées de f. Ainsi, les dérivées premières et secondes sont écrites :

$$\frac{df}{dx}(x_i) \approx f'_i = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} jk'(\omega_k)\,\widehat{f}_k e^{j\frac{2\pi}{N}ik} \tag{2.7}$$

$$\frac{d^2f}{dx^2}(x_i) \approx f"_i = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} -k''(\omega_k)\,\widehat{f}_k e^{j\frac{2\pi}{N}ik} \tag{2.8}$$

où $\omega_k = k\Delta x$ est la pulsation associée au nombre d'onde k. Ces expressions font apparaître les nombres d'onde modifiés k' et $k"$. Le pouvoir de résolution du schéma correspond à l'erreur commise entre la dérivée exacte et la dérivée approchée. On le définit *via* les pulsations modifiées :

$$\omega'(\omega_k) = \Delta x\, k'(\omega_k) \qquad ; \qquad \omega''(\omega_k) = (\Delta x)^2\, k''(\omega_k)$$

Pour le schéma compact centré de dérivation première de Lele, la pulsation modifiée s'écrit :

$$w'(w_k) = \frac{a\sin(w_k) + b/2\sin(2w_k) + c/3\sin(3w_k)}{1 + 2\alpha\cos(w_k) + 2\beta\cos(2w_k)} \tag{2.9}$$

Pour se rapprocher de la précision des schémas spectraux, les paramètres libres α et β s'obtiennent en imposant $w'(w_k) = w_k$ en des points de collocation judicieusement choisis. Le schéma d'ordre 6 est optimum pour les points de collocation $w_1 = 2,17$ et $w_2 = 2,44$. On obtient alors $\alpha = 0,55970$ et $\beta = 0,07759$. On définit l'efficacité de résolution par rapport à un niveau d'écart toléré ϵ, par la relation :

$$\left|\frac{w'(w) - w}{w}\right| \leq \epsilon$$

Pour le schéma d'ordre 6, cette efficacité est de 78,8 % pour un écart maximal de 0,001, ce qui est très supérieur aux 5,8% d'une méthode aux différences finies centrées d'ordre 2 (fig. 2.1).

De même, pour le schéma compact centré de dérivation seconde de Lele, la pulsation modifiée w" s'exprime par :

$$w"(w_k) = \frac{2a(1-\cos(w_k)) + b/2(1-\cos(2w_k)) + 2c/9(1-\cos(3w_k))}{1 + 2\alpha cos(w_k) + 2\beta cos(2w_k)} \tag{2.10}$$

Pour le schéma d'ordre 6, on choisit les points de collocation $w_1 = 2,3$ et $w_2 = 2,55$. On obtient alors $\alpha = 0,47057$ et $\beta = 0,04482$. L'efficacité de résolution est de 83% pour un niveau d'écart de 0,001 (fig. 2.1).

Les nombres d'onde modifiés du schéma compact de Lele de dérivation première et seconde ainsi que ceux du schéma aux différences finies d'ordre 2 sont tracés sur la figure 2.1.

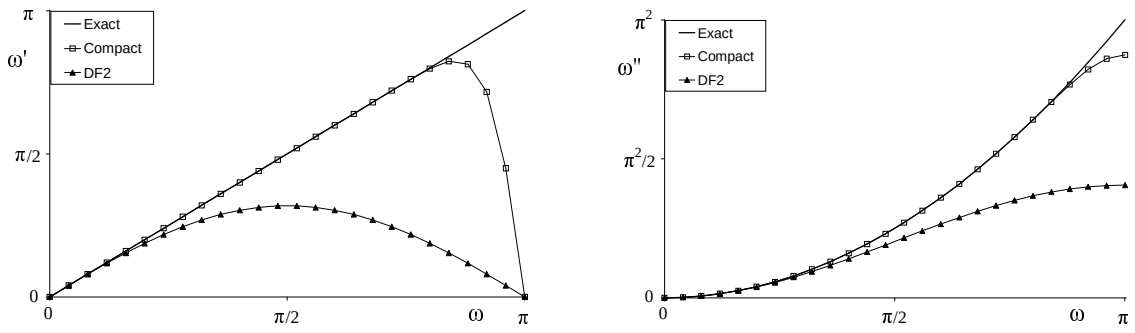


FIG. 2.1: Nombres d'onde modifiés pour les schémas intérieurs de dérivation première (gauche) et seconde (droite) pour le schéma compact de Lele.

2.2 Modèle mathématique, mise en œuvre

Les équations de Navier-Stokes sont résolues sous forme convective-primitive dans le code Compact (cf section 1.5, eq. (1.64)-(1.67)). En effet, Fedioun et Lardjane [43, 82] ont montré que l'utilisation de la forme convective du terme non linéaire des équations de transport réduit les erreurs d'*aliasing* dans l'espace physique.

2.2.1 Adimensionnement

Les équations sont adimensionnées par les grandeurs de référence indicées $_{ref}$. Par exemple : $x_i^* = x_i \cdot L_{ref}$ où * désigne la grandeur dimensionnée. On fixe arbitrairement les paramètres d'adimensionnement suivants : Re_{ref}, Pr_{ref}, Sc_{ref}, U_{ref}, T_{ref}, ρ_{ref} et μ_{ref} où Re_{ref}, Pr_{ref} et Sc_{ref} sont respectivement les nombres de Reynolds, de Prandtl et de Schmidt de référence. On en déduit ensuite les échelles restantes par les relations :

$$L_{ref} = \frac{Re_{ref}\mu_{ref}}{\rho_{ref}U_{ref}} \qquad t_{ref} = \frac{L_{ref}}{U_{ref}}$$

$$p_{ref} = \rho_{ref}U_{ref}^2 \qquad r_{ref} = C_{p_{ref}} = C_{v_{ref}} = \frac{U_{ref}^2}{T_{ref}}$$

$$\lambda_{ref} = \frac{\mu_{ref}C_{p_{ref}}}{Pr_{ref}} \qquad D_{ref} = \frac{\mu_{ref}}{\rho_{ref}Sc_{ref}}$$

2.2.2 Métriques

Certaines simulations nécessitent d'être effectuées sur un maillage non-uniforme. C'est par exemple le cas de la simulation d'un jet réactif qui demande un maillage raffiné à l'entrée du brûleur, cette zone spatiale étant le lieu de phénomènes physiques et chimiques complexes (cisaillement, turbulence, combustion). Afin d'être stable (nombre de points suffisant dans le gradient) et de résoudre cette zone avec un maximum de précision, on introduit une transformation géométrique sur le maillage selon les deux directions du jet (en deux dimensions). On relie la coordonnée physique z à la coordonnée mathématique Z par une fonction bijective. En pratique, nous avons choisi un maillage en racine dans les deux directions d'espace :

$$z = L\frac{Z}{\sqrt{1-Z^2}}$$
$$z \in [z_{min}\,;z_{max}] \qquad ; \qquad Z \in]-1\,;1[$$

Les dérivées première et seconde sont calculées par la règle de dérivation composée :

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial Z}\frac{dZ}{dz}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\left(\frac{dZ}{dz}\right)^2 + \frac{\partial}{\partial Z}\frac{d^2Z}{dz^2}$$

Des tests numériques effectués par Lardjane [82] sur une couche de mélange O_2/H_2 ont montré qu'un rapport de dilatation de l'ordre de 3 entre la plus grande et la plus petite maille est acceptable. Au-delà, des oscillations sur la pression peuvent apparaître, les gradients étant mal résolus aux frontières.

2.2.3 Conditions aux limites

Une attention particulière doit être portée aux conditions aux limites afin qu'elles évacuent les ondes acoustiques et convectives générées dans le domaine de calcul et qu'elles respectent la physique du problème (glissement, sortie libre,...). Notre choix s'est porté vers les conditions NSCBC (*Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions*) puisqu'elles remplissent ces critères. Cette méthode, initialement élaborée par Thompson pour le système d'équations d'Euler compressible [124] et [125], a été généralisée pour les équations de Navier-Stokes par Poinsot et Lele [106] puis étendue au cas réactif par Baum, Poinsot et Thévenin [9]. Elle repose sur le fait qu'un système d'équations hyperboliques représente une propagation d'ondes convectives et acoustiques. Elle s'appuie sur l'analyse des ondes traversant les frontières du domaine en décomposant les ondes tangentielles et perpendiculaires aux surfaces considérées. Dans la suite, on rappelle le principe de la méthode pour la direction x. Les matrices utilisées ici sont explicitées en annexe D.

L'objectif est de déterminer les valeurs propres associées aux ondes acoustiques et convectives. Pour cela, on écrit le système de Navier-Stokes sous forme conservative (1.68)-(1.71) (en 1D) sous la forme vectorielle :

$$\frac{\partial \vec{\tilde{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{\tilde{F}}}{\partial x} + \vec{\tilde{C}} = \vec{0} \tag{2.11}$$

où $\vec{\tilde{U}}$ est le vecteur des variables conservatives :

$$\vec{\tilde{U}} = \left[\rho,\, \rho u,\, \rho v,\, \rho w,\, \rho e_t,\, \rho Y_1,\, \ldots,\, \rho Y_{N_{esp}-1}\right]^T$$

$\vec{\tilde{F}}$ le vecteur flux dans la direction x :

$$\vec{\tilde{F}} = \left[\rho u,\, \rho u^2 + p,\, \rho uv,\, \rho uw,\, (\rho e_t + p)u,\, \rho Y_1,\, \ldots,\, \rho Y_{N_{esp}-1}\right]^T$$

et $\vec{\tilde{C}}$ un vecteur de termes ne contenant aucune dérivée en x de $\vec{\tilde{U}}$.

Puis, on réécrit le système conservatif (2.11) en faisant apparaître la matrice jacobienne $\mathbf{A}$ du flux $\vec{\tilde{F}}$:

$$\frac{\partial \vec{\tilde{U}}}{\partial t} + \widetilde{\mathbf{A}} \frac{\partial \vec{\tilde{U}}}{\partial x} + \vec{\tilde{C}} = \vec{0} \tag{2.12}$$

Enfin, en utilisant les matrices de passage des variables conservatives $\vec{\tilde{U}}$ aux variables primitives $\vec{U}$ ($\mathbf{P}$ et $\mathbf{P}^{-1}$, données en annexe D), on obtient le système fonction des variables primitives suivant :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} + \vec{C} = \vec{0} \tag{2.13}$$

Afin d'identifier les ondes caractéristiques du système, nous calculons les valeurs propres de la matrice $\mathbf{A}$. Soit Λ la matrice diagonale associée à $\mathbf{A}$. On définit $\mathbf{S}$ et $\mathbf{S}^{-1}$ les matrices de vecteurs propres respectivement droites et gauches. Celles-ci vérifient la relation :

$$\mathbf{A} = \mathbf{S}\Lambda\mathbf{S}^{-1} \tag{2.14}$$

De même, on peut écrire :

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \mathbf{P}\mathbf{S}\Lambda\mathbf{S}^{-1}\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{R}\Lambda\mathbf{R}^{-1} \tag{2.15}$$

Le choix des vecteurs propres n'est pas unique et dépend du vecteur inconnu $\vec{U}$. [9] et [104] les donnent pour $\vec{U}$ contenant N_{esp} espèces. Nous avons choisi de résoudre le système d'équations de Navier-Stokes pour $N_{esp} - 1$ espèces ce qui change la formulation des vecteurs propres.
En 3 dimensions, les valeurs propres λ_i de $\mathbf{A}$ sont :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u - c \\ \lambda_i &= u \qquad\qquad i = 2 \ldots N_{esp} + 3 \\ \lambda_{N_{esp}+4} &= u + c \end{aligned}$$

où c est la célérité du son (1.23). Cette distinction permet, par la suite, d'identifier les ondes acoustiques et les ondes convectives.

On définit le vecteur caractéristique $\vec{\mathcal{L}}$:

$$\vec{\mathcal{L}} = \Lambda\mathbf{S}^{-1} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \tag{2.16}$$

Le système LODI (*Local One Dimensional Inviscid*) s'obtient en négligeant les termes C_i dans le système (2.13). On ne considère que l'écoulement non-visqueux et non-réactif dans la direction perpendiculaire à la frontière :

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + \vec{\mathcal{L}} = \vec{0} \tag{2.17}$$

où $\vec{W}$ est le vecteur des variables caractéristiques :

$$\vec{W} = \mathbf{S}^{-1}\vec{U} \tag{2.18}$$

Les amplitudes $\mathcal{L}_i$ des ondes s'expriment par :

$$\mathcal{L}_1 = \frac{u-c}{2\rho C_p}\left(\frac{\partial p}{\partial x} - \rho c \frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{2.19}$$

$$\mathcal{L}_2 = u\frac{\partial v}{\partial x} \tag{2.20}$$

$$\mathcal{L}_3 = u\frac{\partial w}{\partial x} \tag{2.21}$$

$$\mathcal{L}_4 = uT\left[\frac{1}{\rho}\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \left(\frac{r_1 - r_{N_{esp}}}{r}\right)\frac{\partial Y_1}{\partial x}\right] \tag{2.22}$$

$$\mathcal{L}_{i+3} = -uT\left(\frac{r_i - r_{N_{esp}}}{r}\right)\frac{\partial Y_i}{\partial x} \quad i = (2, ..., N_{esp} - 1) \tag{2.23}$$

$$\mathcal{L}_{N_{esp}+3} = u\left(\frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial p}{\partial x}\right) \tag{2.24}$$

$$\mathcal{L}_{N_{esp}+4} = \frac{u+c}{2\rho C_p}\left(\frac{\partial p}{\partial x} + \rho c \frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{2.25}$$

Les ondes $\mathcal{L}_i$ (2.19-2.25) peuvent être classées en deux catégories selon le signe de la valeur propre associée : les ondes entrant dans le domaine de calcul, et les ondes sortant de celui-ci. Les ondes sortantes sont connues : elles transmettent l'information contenue à l'intérieur du domaine de calcul. Les ondes entrantes sont porteuses de l'information provenant de l'extérieur : elles ne peuvent pas être calculées à partir des variables connues, mais seulement à partir du type de condition à la limite imposé. Le système LODI nous fournit des relations entre les amplitudes des ondes en fonction de la nature de la condition à la limite. Le choix des conditions aux limites (entrée, paroi, parfaitement non réflective, etc.) nous permet alors de résoudre entièrement le système.

On introduit le vecteur $\vec{d} = \mathbf{S}\vec{\mathcal{L}}$:

$$d_1 = \frac{\rho C_p}{c^2}(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_{N_{esp}+4}) + \mathcal{L}_{N_{esp}+3} \tag{2.26}$$

$$d_2 = \frac{C_p}{c}(\mathcal{L}_{N_{esp}+4} - \mathcal{L}_1) \tag{2.27}$$

$$d_3 = \mathcal{L}_2 \tag{2.28}$$

$$d_4 = \mathcal{L}_3 \tag{2.29}$$

$$d_5 = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_4 + \sum_{i=1}^{N_{esp}-1} \mathcal{L}_{i+3} + \mathcal{L}_{N_{esp}+4} \tag{2.30}$$

$$d_6 = -\left(\frac{r}{r_1 - r_{N_{esp}}}\right)\left[\frac{\mathcal{L}_{N_{esp}+3}}{\rho} + \frac{\mathcal{L}_4}{T}\right] \tag{2.31}$$

$$d_{5+j} = -\left(\frac{r}{r_j - r_{N_{esp}}}\right)\frac{\mathcal{L}_{j+3}}{Tz} \quad j = (2, ..., N_{esp} - 1) \tag{2.32}$$

Finalement, le système à résoudre à la frontière est :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \vec{d} + \vec{C} = \vec{0} \tag{2.33}$$

Les matrices de passage P et P^{-1} permettent de se ramener à un système conservatif :

$$\frac{\partial \vec{\tilde{U}}}{\partial t} + \vec{\tilde{d}} + \vec{\tilde{C}} = \vec{0} \tag{2.34}$$

On peut remarquer que :
- les vecteurs $\vec{\mathcal{L}}$ et $\vec{d}$ dans les directions y et z se déduisent de ceux présentés pour x par symétrie et permutation de lignes/colonnes ;
- le traitement des arêtes et des coins en trois dimensions est effectué en tenant compte de la contribution des faces auxquelles appartiennent les coins ou arêtes.

Les étapes décrites précédemment sont identiques pour les systèmes d'équations d'Euler (pour lequel $\vec{C} = \vec{0}$) et de Navier-Stokes. Des conditions supplémentaires sur les termes visqueux et les termes sources sont nécessaires pour les équations de Navier-Stokes. Ces conditions additionnelles dépendent de la nature des conditions aux limites (entrée, paroi,...).

Implémentation spécifique

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous nous sommes plus particulièrement intéressés à des conditions limites telles que les entrées subsoniques et les sorties non réflectives. L'ensemble du traitement particulier de ces données est explicité dans [104, 106]. Il est néanmoins rappelé ici les méthodes utilisées pour ces conditions limites.

Entrée subsonique

Une entrée subsonique est constituée de $N_{esp} + 3$ ondes entrant dans le domaine et d'une onde sortante. On impose, sur la frontière d'entrée, un champ de température, de vitesses et de fractions massiques, constants au cours du temps.
L'onde $\mathcal{L}_1$, la seule onde sortant du domaine, (qui est associée à la valeur propre négative $(u-c)$) est calculée à partir de sa formulation (2.19). On exprime ensuite les autres $\mathcal{L}_i$, $i = 2, \ldots N_{esp}-1$ en fonction de $\mathcal{L}_1$ par (**??**) :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_2 &= 0 \\
\mathcal{L}_3 &= 0 \\
\mathcal{L}_4 &= -2\mathcal{L}_1 \\
\mathcal{L}_{\alpha+3} &= 0 \qquad \alpha = (2, ..., N_{esp} - 1) \\
\mathcal{L}_{N_{esp}+4} &= \mathcal{L}_1 \\
\mathcal{L}_{N_{esp}+3} &= -2\frac{\rho}{T}\mathcal{L}_1
\end{aligned}$$

Il reste alors à calculer $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ par (2.17). Il n'y a pas de condition sur les termes visqueux et sources dans ce cas.

Remarque : dans le cas d'une entrée supersonique, toutes les ondes entrent dans le domaine et la densité est imposée de la même façon que les autres variables.

Sortie parfaitement non réflective

Dans le cas d'une sortie parfaitement non réflective, aucune condition liée à la physique n'est imposée. Les ondes sortant du domaine sont évaluées par (2.19-2.25), les autres sont mises à zéro.
Cette fois, des conditions supplémentaires sur les termes visqueux (flux normal à la frontière nul) et sur les termes sources chimiques sont nécessaires. Celles-ci sont détaillées dans [104].

2.2.4 Intégration en temps

L'avancement en temps est explicite et réalisé par une méthode à pas séparés de type Runge-Kutta d'ordre 3 à stockage réduit (Jameson, Schmidt, Turkel [17]). On écrit le système de Navier-Stokes (1.64-1.67) sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{d\vec{U}}{\partial t} = \vec{F}(\vec{U}) \tag{2.35}$$

où $\vec{U}$ est le vecteur des variables primitives :

$$\vec{U} = \left[\rho,\, u,\, v,\, w,\, T,\, Y_1,\, \ldots,\, Y_{N_{esp}-1}\right]^T$$

Au temps $n+1$, il s'écrit :

$$\vec{U}^{n+1} = \vec{U}^n + \Delta t \vec{F}(\vec{U}^n + \frac{\Delta t}{2}\vec{F}(U^n + \frac{\Delta t}{3}\vec{F}(\vec{U}^n))) \tag{2.36}$$

où Δt est le pas de temps.

La dernière espèce N_{esp} n'est pas avancée en temps par (2.36) mais mise à jour par la relation :

$$Y_{N_{esp}}^{n+1} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}-1} Y_\alpha^{n+1} \tag{2.37}$$

Par ailleurs, le pas de temps est évalué selon le critère :

$$\Delta t = \frac{1}{\dfrac{1}{\Delta t_1} + \dfrac{1}{\Delta t_2}} \tag{2.38}$$

avec Δt_1 le pas de temps déterminé avec un critère de type CFL [73] :

$$\Delta t_1 = \frac{CFL}{\left|\frac{\lambda_x}{\Delta_x}\right|_{max} + \left|\frac{\lambda_y}{\Delta_y}\right|_{max} + \left|\frac{\lambda_z}{\Delta_z}\right|_{max}} \tag{2.39}$$

et Δt_2 le pas de temps déterminé avec un critère de stabilité visqueuse :

$$\Delta t_2 = \frac{1}{2\mu\left(\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{1}{\Delta_y^2} + \frac{1}{\Delta_z^2}\right)} \tag{2.40}$$

Δ_x, Δ_y et Δ_z sont les tailles des mailles selon x, y et z. λ représente les valeurs propres du système : $\lambda_i = \{u_i - c\ ;\ u_i\ ;\ u_i + c\}$.

2.3 Implémentation

Dans cette section on évoque la structure du code de simulation numérique directe. Le codage est réalisé en Fortran 90 [34].

2.3.1 Arbre programmatique

Une part importante de la formation des flux numériques est le calcul des valeurs nodales de dérivées dont l'obtention nécessite la résolution d'un système matriciel pentadiagonal (section 2.1.2). Le choix retenu pour le calcul des dérivées est le suivant : toutes les dérivées selon la direction z (tableaux de dimension $[0, Nx][0, Ny][0, Nz]$) sont calculées d'un bloc, puis celles selon x et y sont évaluées sur des sous-blocs de dimension $[0, Nx][0, Ny][0, M]$. Cette technique, représentée schématiquement en figure 2.2, requiert le stockage simultané d'une quarantaine de tableaux $3D$.

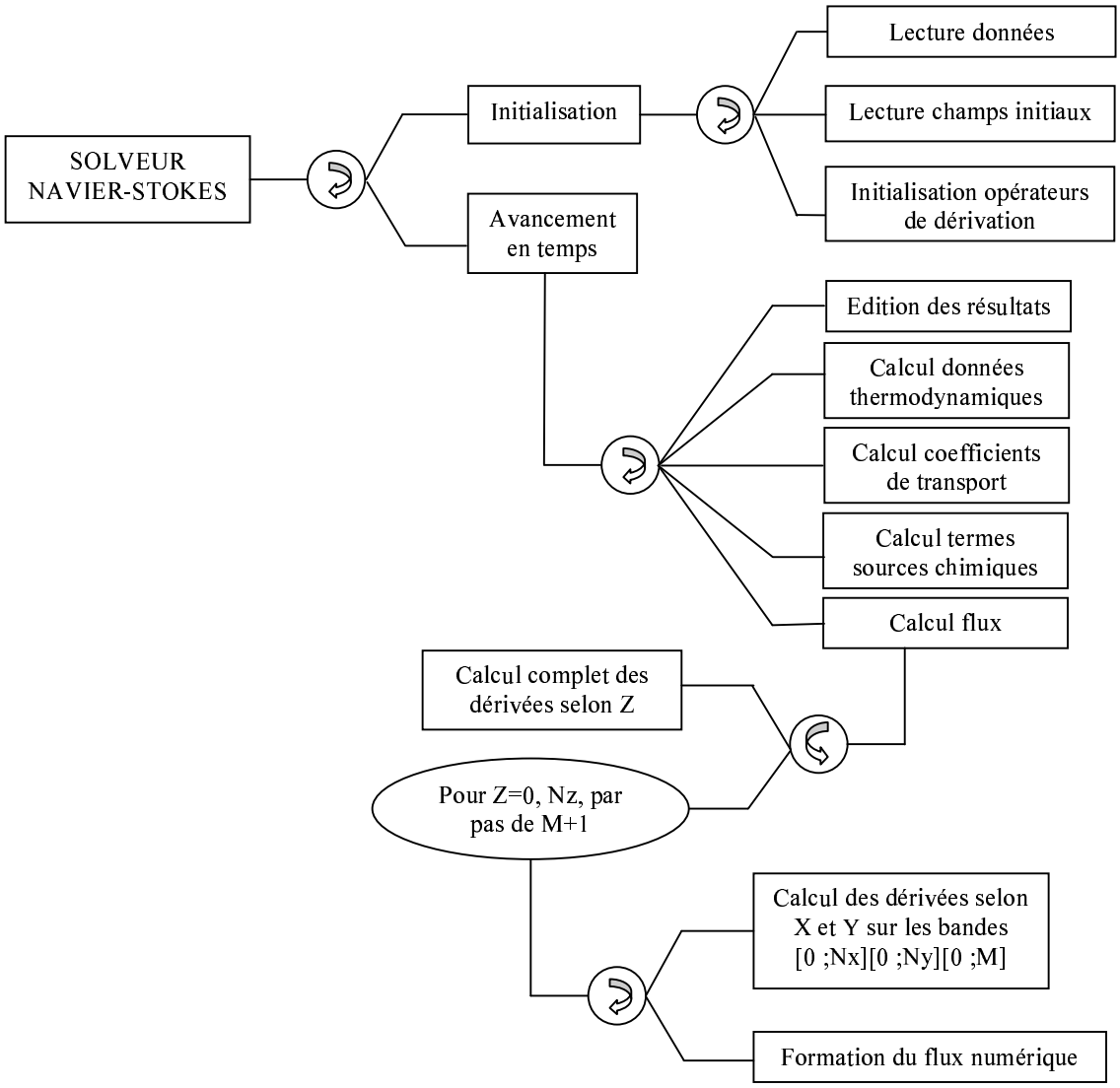


Fig. 2.2: Arbre programmatique simplifié du code Compact.

2.3.2 Optimisation

Un important effort d'optimisation a été effectué par Lardjane sur son code Compact binaire non-réactif. Néanmoins le codage du cas multi-espèces réactif a nécessité une nouvelle réflexion approfondie sur l'optimisation du code afin d'assurer la faisabilité des DNS. La prise en compte d'une chimie détaillée dans laquelle intervient une dizaine d'espèces augmente considérablement le stockage et les temps de calcul. Quelques éléments de ce travail numérique sont donnés dans la suite.

Vectorisation

Le code Compact est particulièrement adapté pour une architecture vectorielle. Ceci pour deux raisons. Tout d'abord parce que c'était l'orientation choisie par Lardjane lors de sa thèse, ensuite parce que les machines vectorielles montent continuellement en puissance comme le montre l'acquisition récente par l'IDRIS d'un supercalculateur NEC-SX8. Enfin, le type de schéma utilisé dans le code Compact se prête plus facilement à une optimisation vectorielle qu'à une parallélisation par décomposition de domaine.
Les calculs des termes sources chimiques et des coefficients de transport représentent la majeure partie du temps d'exécution. Une attention particulière a donc été portée à ces deux routines, ce qui a conduit au pré-calcul des coefficients d'Arrhenius pour les réactions inverses (§ 1.2.1), et aux régressions polynomiales et en puissance des coefficients de transport (§ 1.4). La routine de calcul des termes sources chimiques a été adaptée au schéma cinétique utilisé. Cette méthode est certes peu générique dans le cas où on l'on souhaiterait changer de schéma cinétique mais elle s'avère très performante en termes de temps de calcul.
Pour être efficace, un processeur vectoriel doit être alimenté par des flux de données contigües en mémoire et indépendants [53]. Le calcul des dérivées conduit à la résolution d'un système difficilement vectorisable. Pour améliorer le temps de calcul, on profite des dimensions neutres du calcul pour effectuer une linéarisation et forcer ainsi la vectorisation. Selon z on aura une longueur de vecteur de l'ordre de $Nx \cdot Ny$, contre $Nx \cdot M$ selon y et $Ny \cdot M$ selon x. En choisissant correctement la valeur de M on peut optimiser le programme pour limiter le coût mémoire et maximiser les performances. Par exemple, pour une résolution de 128^3, des tests numériques effectués sur la NEC-SX8 de l'IDRIS ont montré que la meilleure performance est obtenue pour trois blocs ($M = 42$).
En pratique, on obtient des performances légèrement supérieures à $7,5$ Gflops sur un processeur de NEC-SX8 (pour une puissance crête de 16 Gflops) et un temps de calcul inférieur à 10^{-6} seconde par itération Runge-Kutta et par point de maillage pour un calcul réactif.

Parallélisation

La diminution du temps de restitution du code passe également par la parallélisation de celui-ci. Plusieurs techniques sont envisageables dont :

- le partage des données (mode SIMD), qui consiste à faire effectuer les mêmes opérations par chaque processus et à synchroniser les calculs par échange de messages,
- le partage des tâches (mode MIMD), où chaque processus effectue une action pouvant être différente.

Nous avons choisi d'utiliser la seconde, nettement plus facile à mettre en oeuvre grâce au standard OpenMP [22].
Techniquement, cette méthode consiste à ajouter des directives OpenMP dans le code originellement séquentiel. Celles-ci sont ignorées par le compilateur si l'option permettant l'interprétation

des directives OpenMP n'est pas spécifiée. Un programme OpenMP est une alternance de régions séquentielles et parallèles. Nous avons choisi de partager le travail des boucles en espace et sur les espèces, la plus importante de celles-ci étant la boucle sur les blocs de taille M pour le calcul des dérivées en x et en y et la formation des flux numériques. Ceci impose des contraintes sur le nombre de processeurs à utiliser : le nombre de blocs doit être un multiple du nombre de processeurs. Les tests sur machine locale (SMP 4 processeurs AMD 64 Opteron bi-coeur) ont montré un bon équilibre entre les processus, et une scalabilité quasi-linéaire. Néanmoins, le même code a été très mal parallélisé par le compilateur du calculateur NEC-SX8 de l'IDRIS. Le personnel de l'assistance technique de l'IDRIS ne trouvant pas d'erreur de codage, le problème a été soumis aux ingénieurs de NEC. Ces derniers ont conclu à un bogue du compilateur qui sera corrigé dans sa prochaine version.

2.4 Validations du code de calcul

L'objet de cette section est la validation du code Compact. Ces validations ont plus particulièrement porté sur les nouveautés qui ont été apportées au code de simulation numérique directe de Lardjane *i.e.* sur les termes sources chimiques, les coefficients de transport ainsi que sur les conditions aux limites.

2.4.1 Flammes de prémélange 1D

On réalise des simulations élémentaires unidimensionnelles de flammes laminaires prémélangées H_2/air. L'objectif de ces simulations est de valider l'association entre le schéma cinétique et le modèle de transport à travers l'évaluation de la vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse.

Une flamme de prémélange est une structure réactive se propageant par déflagration dans un milieu où combustible et oxydant sont préalablement mélangés. La structure d'une flamme prémélangée est tracée sur la figure 2.3 Le front de flamme correspond à la zone qui sépare les gaz brûlés des gaz frais. Il se propage à la vitesse de propagation laminaire S_L^0.

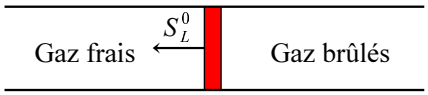


Fig. 2.3: Structure d'une flamme de prémélange.

Reprenons la réaction globale (1.35). Dans les conditions stœchiométriques, les fractions massiques de combustible et d'oxydant sont données par :

$$\left.\frac{Y_O}{Y_F}\right|_{st} = \frac{\nu'_O M_O}{\nu'_F M_F} = s \tag{2.41}$$

où s est appelé ratio de fraction massique. On définit alors la richesse du mélange par :

$$\phi = s\frac{Y_F}{Y_O} \tag{2.42}$$

Ce paramètre est important pour qualifier les flammes de prémélange : le mélange est dit riche pour $\phi > 1$, pauvre pour $\phi < 1$, et stœchiométrique pour $\phi = 1$. On s'intéresse ici à la combustion H_2/air. On considère que l'air est composé d'O_2 et de N_2 dans les proportions 1 mole d'O_2 pour 3,76 moles de N_2. De (2.42) on déduit la fraction massique d'H_2 :

$$Y_{\mathrm{H_2}} = \frac{1}{1 + s/\phi \left(1 + 3,76 \frac{M_{\mathrm{N_2}}}{M_{\mathrm{O_2}}}\right)} \tag{2.43}$$

Conditions initiales et paramètres numériques

Le mélange réactif est initialement au repos à T_{unif}=300 K et p=1 bar dans un domaine de longueur $L = 1$ cm. On fixe le point d'allumage x_{All} au milieu du domaine, à une température T_{All}=1500 K. Le profil initial de température est une gaussienne dont on contrôle la raideur par le paramètre b (en pratique, on prend $b = 2$) :

$$T(x) = T_{unif} + (T_{All} - T_{unif})e^{-b(x-x_{All})^2} \tag{2.44}$$

Le schéma cinétique est celui de Dagaut[28] couplé avec la base thermodynamique CHEMKIN [77]. Dans tous les cas, le domaine est discrétisé en N_x=1024 points équirépartis. L'intégration temporelle est à l'ordre 3 avec un pas de temps constant imposé par la raideur des termes sources chimiques, et variant de 2.10^{-9} s à 5.10^{-9} s selon la richesse du mélange.
On impose des conditions parfaitement non-réflectives aux frontières, permettant aux ondes acoustiques initiales de sortir librement du domaine. Néanmoins, le front de flamme est trop raide pour le schéma décentré (2.2), et le calcul devient instable lorsque le front de flamme atteint les frontières. Ceci justifie entre autres l'allumage au centre plutôt qu'à une extrémité du domaine. On a donc 2 fronts de flamme se propageant en sens opposés, emprisonnant les gaz brûlés. Dans la section suivante, on décrit le front se déplaçant vers la gauche.

Structure et vitesse de flamme laminaire

On fait varier la fraction massique d'hydrogène $Y_{\mathrm{H_2}}$ de 0,01 à 0,09, correspondant à des richesses ϕ de 0,344 à 3,37. La structure locale du front de flamme, basée sur les profils de température, de fraction massique de H_2 et de H_2O, est présentée pour 4 richesses (table 2.1) : le cas A est le plus pauvre, le cas B est quasi-stœchiometrique, le cas C présente la plus grande vitesse de flamme et le cas D est le plus riche.

Le principe du calcul de l'épaisseur de flamme basée sur la valeur maximale du gradient est classique[4], et illustré pour le cas B sur les figures 2.4 et 2.5. Les valeurs $\delta_L^0(T)$ obtenues à partir des profils de température sont supérieures aux valeurs $\delta_L^0(Y)$ obtenues par les profils de fraction massique de H_2 et de H_2O, ces deux dernières étant quasi-identiques. Ceci est dû aux réactions lentes ayant lieu dans les gaz brûlés, faussant particulièrement l'estimation de l'épaisseur dite « totale » en cas de chimie détaillée [104]. Ces épaisseurs sont reportées dans la table 2.1. On y indique également la valeur du pas de temps d'intégration numérique Δt_{num}, le délai d'induction Δt_{infl}, et l'instant après l'allumage où l'on montre les différents profils afin qu'ils soient à peu près superposés pour une meilleure comparaison visuelle.
La vitesse de flamme laminaire fondamentale S_L^0 est obtenue en soustrayant la vitesse du fluide à la vitesse du front de flamme, calculée en dérivant numériquement par rapport au temps la

[4] c'est l'équivalent de l'épaisseur de vorticité d'une couche de mélange

cas	A	B	C	D
Y_{H_2}	0,01	0,03	0,05	0,09
ϕ	0,344	1,054	1,793	3,370
Δt_{num} (s)	$5.\ 10^{-9}$	$2.\ 10^{-9}$	$2.\ 10^{-9}$	$4.\ 10^{-9}$
Δt_{infl}(ms)	0,013	0,012	0,013	0,014
figure à t (ms)	0,500	0,104	0,104	0,120
$\delta_L^0(T)$ (mm)	0,60	0,36	0,36	0,49
$\delta_L^0(Y_{H_2})$ (mm)	0,48	0,21	0,21	0,36
$\delta_L^0(Y_{H_2O})$ (mm)	0,44	0,20	0,20	0,34
S_L^0 (m.s^{-1})	0,29	2,46	3,08	1,29

TAB. 2.1: Paramètres physiques des flammes 1D H_2/air simulées.

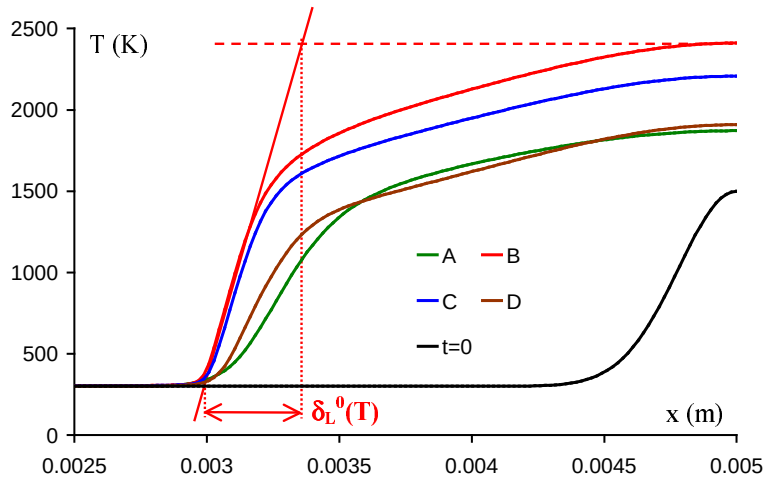


FIG. 2.4: Structure du front de flamme : T.

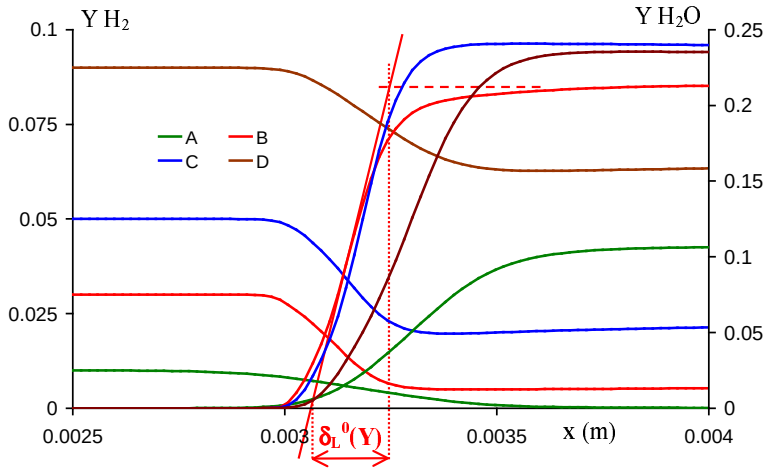


FIG. 2.5: Structure du front de flamme : Y_{H_2} et Y_{H_2O}.

position estimée du gradient maximum des profils de température, de fraction massique de H_2 et de H_2O. La moyenne des trois valeurs permet de réduire les imprécisions de la méthode. La vitesse du fluide est produite par la dilatation des gaz brûlés. On attend bien sûr d'avoir une vitesse stabilisée pour faire les calculs.

Les résultats présentés sur les figures 2.6 et 2.7 sont en très bon accord avec les résultats numériques et expérimentaux compilés par Marinov [94], sur toute la plage de richesses. On peut en conclure que le modèle de transport retenu, bien que relativement simple, associé au schéma cinétique [28], reproduit correctement la physique de la combustion H_2/air. Cette association sera donc conservée dans toute la suite de ce mémoire.

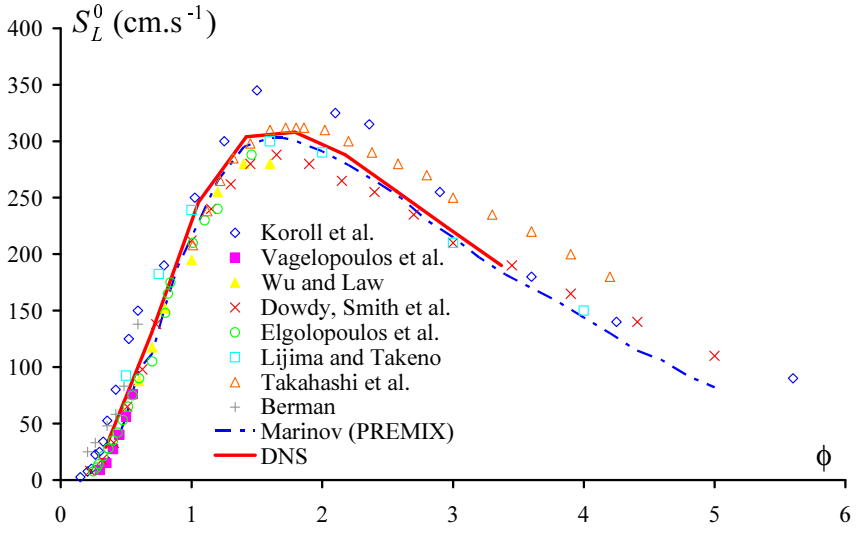


FIG. 2.6: Vitesse laminaire de flamme H_2/air en fonction de la richesse.

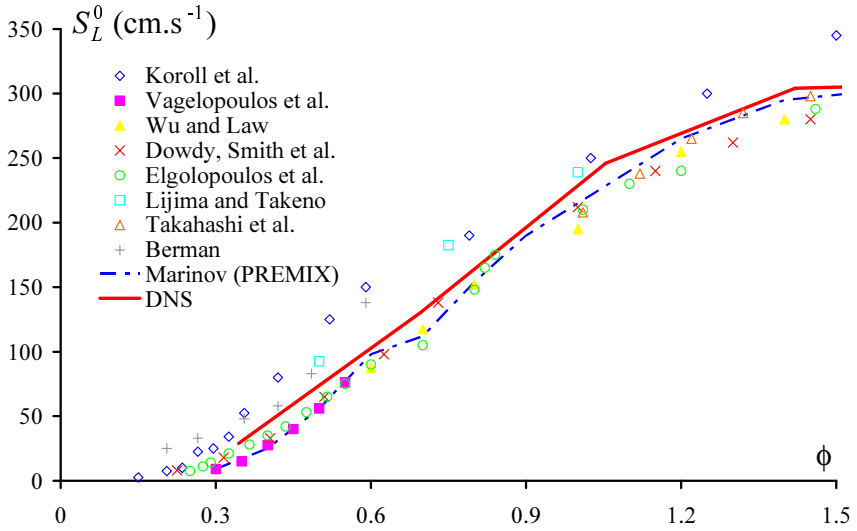


FIG. 2.7: Idem fig. 2.6 : zoom sur les basses richesses.

2.4.2 Interaction tourbillon/conditions aux limites

Cette section présente la validation des conditions limites NSCBC implémentées dans le code de simulation numérique directe, à travers un cas test bidimensionnel proposé par [104] typique des écoulements instationnaires : un tourbillon convecté par un écoulement uniforme subsonique traversant une frontière parfaitement non-réflective (figure 2.8).

Le champ de vitesse est initialisé en utilisant la fonction de courant ψ pour un tourbillon incompressible non-visqueux :

$$\psi = Cexp\left(-\frac{x^2+z^2}{2R_c^2}\right)$$

où R_c et C représentent respectivement le rayon et l'intensité du tourbillon (l'origine des coordonnées est localisée au milieu du tourbillon).

Le champ initial de vitesse est :

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm u_0 \\ \pm v_0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\rho}\begin{pmatrix} \frac{\partial\psi}{\partial y} \\ -\frac{\partial\psi}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm u_0 - \frac{y}{\rho R_c^2}\psi \\ \pm v_0 + \frac{x}{\rho R_c^2}\psi \end{pmatrix}$$

Le cœur central de ce tourbillon a une vorticité du signe de C et est entouré d'une région de vorticité opposée. Cette structure est intéressante pour les simulations numériques car la circulation totale est nulle pour $r \geq 2R_c$ et l'influence du tourbillon est limitée à une zone réduite autour de celui-ci.

L'écoulement uniforme, caractérisé par les vitesses u_0 et v_0, est adapté en fonction de la frontière que l'on souhaite tester (direction et amplitude des vitesses).
Le champ de pression dans le tourbillon est :

$$p = \rho\frac{C}{R_c^2} + p_0\psi$$

La température est uniforme et le domaine contient un prémélange de gaz H_2/air dans les conditions stœchiométriques. La masse volumique est déduite de la loi des gaz parfaits (1.10).

La figure 2.8 illustre le test effectué. Ici, la frontière à tester est en bleu. Les frontières latérales en rouge sont également parfaitement non-réflectives. On impose un écoulement uniforme à l'entrée $x = -L$. Les 4 frontières du domaine bi-dimensionnel ainsi que les coins du domaine ont été testés de cette façon.

Les tests ont été effectués sur un domaine carré de côté L=2,56 mm avec une résolution de 128×128. Les valeurs numériques des caractéristiques du tourbillon et de l'écoulement sont les suivantes :

- $R_c = 0,15L$;
- $C = -5.10^{-4}c_0L$ où c_0 est la vitesse du son initiale ;
- u_0 ou v_0= 500 m.s^{-1} pour une frontière ;
- u_0 et v_0= 200 m.s^{-1} pour un coin.

La figure 2.9 présente la dilatation $\Theta = div(\vec{U})$, la norme de la vorticité $\vec{\omega} = \vec{rot}(\vec{U})$ à l'instant initial et aux temps réduits ct/L=1 et ct/L=2 (c est la vitesse de convection, c=$\sqrt{u_0^2+v_0^2}$). Le

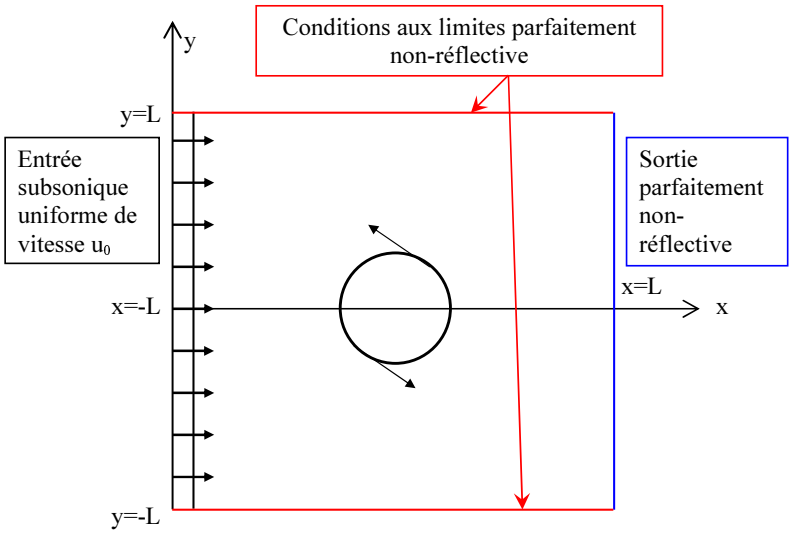


FIG. 2.8: Test de la sortie x=L parfaitement non-réflective.

tourbillon est convecté par l'écoulement uniforme de vitesse u_0. Après le temps réduit ct/L=1, le tourbillon a traversé entièrement le domaine de calcul et est en train de passer à travers la frontière x=L. À cet instant, l'intensité de la vorticité n'a pas diminué par rapport à l'état initial. Le champ de dilatation qui est proportionnel à la dérivée temporelle de la pression, est directement lié aux ondes acoustiques qui se propagent dans le domaine. À ct/L=1, celui-ci a fortement augmenté du fait de la compression au niveau de la sortie. À ct/L=2, le tourbillon initial a complètement disparu, la vorticité est quasiment nulle dans tous le domaine. L'amplitude non-nulle de la dilatation traduit la réflexion d'une partie des ondes acoustiques à travers la frontière x=L. Néanmoins, cette réflexion est nettement moindre comparée aux ondes transmises, l'intensité de la vorticité après le passage du tourbillon ayant considérablement diminuée. Le cas test a été réalisé sur un domaine de petite taille, ce qui peut expliquer les amplitudes un peu élevées du champ de dilatation.
La figure 2.10 présente les champs de dilatation Θ et de vorticité ω au temps initial et aux temps tels que ct/L=1 et ct/L=4/3 pour le test du coin (x,y)=(L,L). Les mêmes remarques que celles sur le test de la frontière x=L peuvent être effectuées ici.

Ce cas test nous montre que les conditions de sortie ne sont pas parfaitement non-réflectives, une partie des ondes étant réfléchie sur la frontière. Néanmoins, les amplitudes de celles-ci sont atténuées et leur influence sur l'intérieur du domaine est raisonnable. Ce test nous aura également permis de valider l'implémentation des conditions limites NSCBC dans le code Compact.

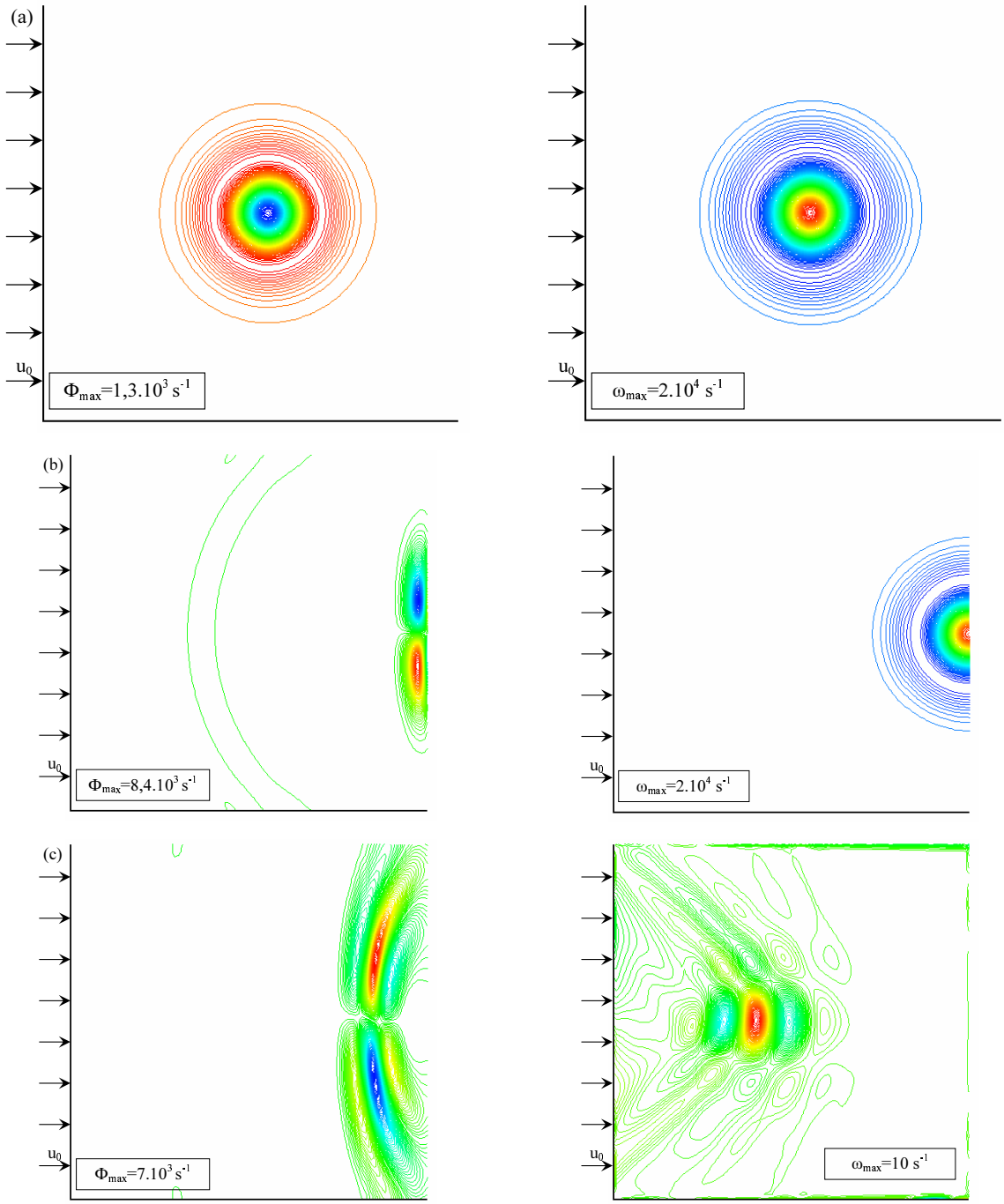


FIG. 2.9: Test de la frontière x=L. Champ de dilatation Θ (à gauche) et de vorticité ω (à droite) à 3 instants : ct/L=0 (a), ct/L=1 (b) et ct/L=2 (c).

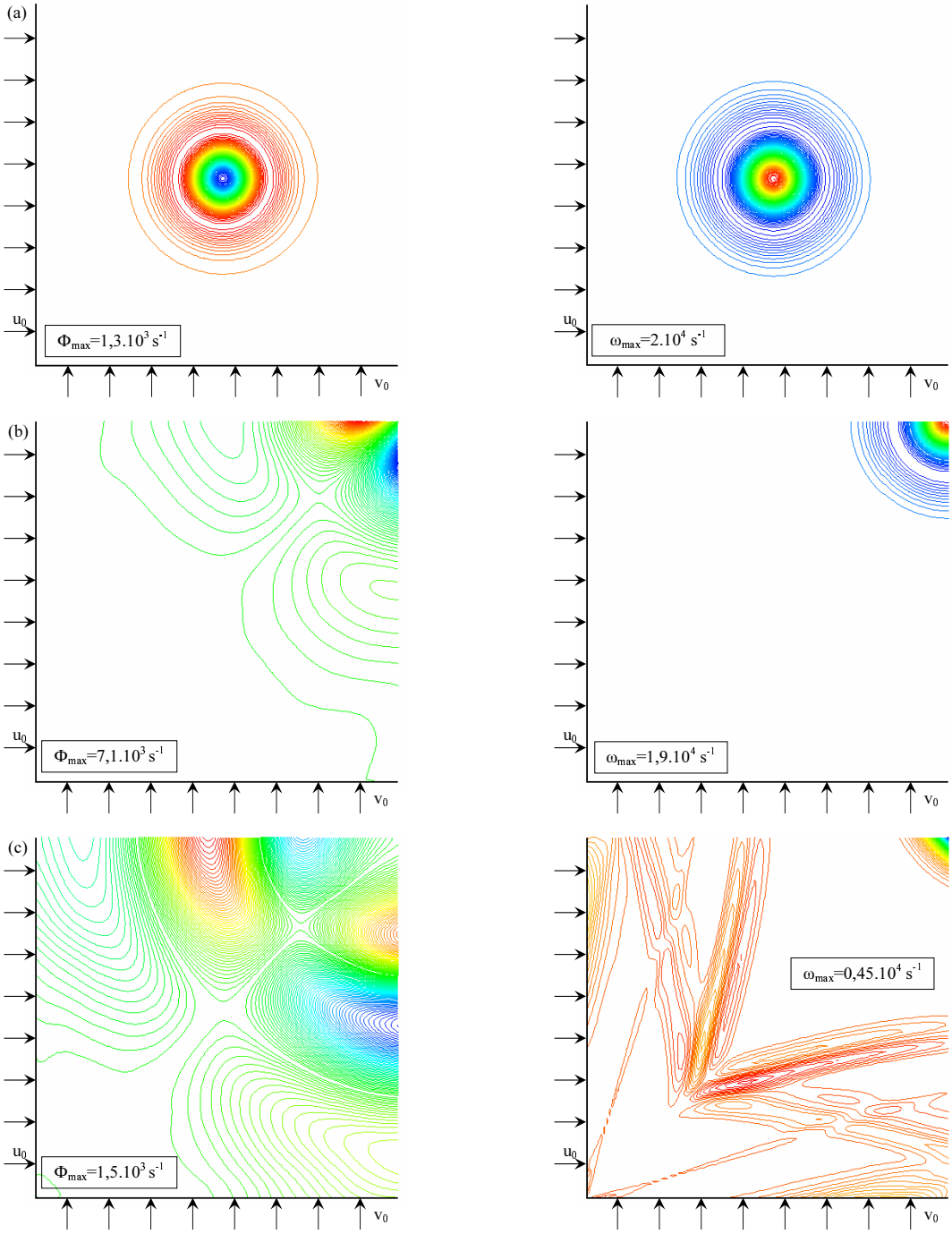


FIG. 2.10: Test du coin (L,L). Champ de dilatation Θ (à gauche) et de vorticité ω (à droite) à 3 instants : ct/L=0 (a), ct/L=1 (b) et ct/L=4/3 (c).

2.5 Applications

2.5.1 Flamme-jets subsoniques

Les outils de simulations numériques directes ainsi que les modèles de thermodynamique, de transport et de cinétique chimique ayant été validés précédemment, on s'intéresse maintenant à la simulation d'une flamme de diffusion bidimensionnelle.
La flamme de diffusion par opposition à la flamme de prémélange est obtenue à partir d'un écoulement gazeux dans lequel combustible et oxydant ne sont pas mélangés initialement. Celle-ci ne se propage pas : elle est localisée dans la région où le combustible et l'oxydant se rencontrent. La flamme-jet est un exemple typique de flamme de diffusion [10, 11]. On s'intéresse ici à une flamme constituée par un jet de combustible H_2 entouré par un co-courant d'air. Cette simulation spatiale a été considérée dans quatre cas afin de comparer les effets du plissement du jet et de la combustion sur la dynamique de l'écoulement : écoulement laminaire ou « turbulent » dans le cas réactif ou non. Ces simulations étant bi-dimensionnelles, on ne peut parler de turbulence à proprement parlé, mais au premier ordre, elles donnent une idée de l'influence de la turbulence sur le jet.

Conditions initiales

Le combustible H_2 est injecté par un tube sur les bords duquel la vitesse est nulle. Le nombre de Mach est de 0,5 dans le jet d'H_2 et dans le co-courant d'air. La température initiale est uniforme à 1500 K et la pression de 1 bar dans tout le domaine. Le nombre de Reynolds, basé sur les valeurs de référence, est de 100 (cf. tableau 2.3 pour les paramètres physiques et numériques). La transition laminaire/turbulent est réalisée grâce à l'ajout d'un bruit blanc de phase aléatoire sur la vitesse transversale à l'entrée du jet. Ce bruit, construit sur 10 modes de la largeur de la boîte, est confiné par une loi en gaussienne sur l'entrée d'H_2. Son amplitude correspond à 10% de la vitesse de référence.

Les paramètres numériques des simulations de l'écoulement laminaire et turbulent sont détaillés dans le tableau 2.2.

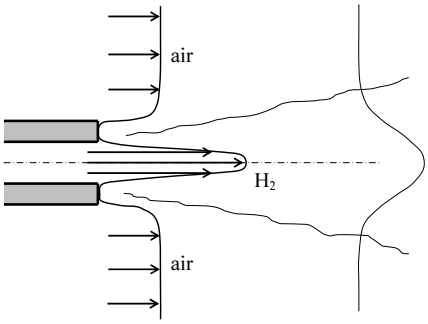
essais	L_x (mm)	L_y (mm)	N_x	N_y
laminaire	23,7	4,7	512	256
turbulent	23,7	7,1	762	512

Tab. 2.2: Paramètres numériques des différentes simulations.

Les conditions aux limites sont les suivantes : à la frontière gauche sont situées les injections d'H_2 et d'air, cette frontière est une entrée subsonique (explicitée en section 2.2.3)) ; les autres frontières sont des sorties parfaitement non-réflectives (sec. 2.2.3).
Le pas de temps est constant et tel que le nombre de CFL initial soit ≈0,6.

Tab. 2.3: Paramètres physiques et numériques du jet réactif.

Vitesse H_2 (m.s^{-1})	1500
Vitesse Air (m.s^{-1})	375
$T_{stat./tot.}$ H_2 (K)	1500/1570
$T_{stat./tot.}$ Air (K)	1500/1558
Nombre de Mach H_2	0,52
Nombre de Mach Air	0,50



Résultats et discussion

Comparaison des cas réactif/non-réactif et laminaire/turbulent

On définit la fraction de mélange Z (variable de Shvab-Zeldovich) par :

$$Z = \frac{\frac{\phi Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} \tag{2.45}$$

où ϕ est la richesse définie par :

$$\phi = \frac{Y_{F,injection}}{Y_{O,co-courant}} / \left.\frac{Y_F}{Y_O}\right|_{st} \tag{2.46}$$

Le scalaire passif Z est une variable locale valant 1 dans l'écoulement combustible et 0 dans l'écoulement oxydant. La richesse ϕ correspond, pour une flamme de diffusion, à la richesse obtenue en mélangeant la masse de combustible présente dans le jet (dont la fraction massique est égale à l'unité dans le cas d'un combustible non-dilué), et la masse d'oxydant présente dans le co-courant. En supposant que les coefficients de diffusion des espèces soient tous égaux, le scalaire passif Z a les propriétés suivantes :

- $Z = 1$ dans l'écoulement de combustible ;
- $Z = 0$ dans l'écoulement d'oxydant ;
- Z représente le degré de mélange du combustible et de l'oxydant.

La flamme est localisée là où

$$Z = Z_{st} = \frac{1}{1+\phi}$$

Pour un mélange H_2/air, la fraction de mélange stœchiométrique Z_{st} est de 0,0285.

La figure 2.11 représente les distributions des fractions massiques des réactifs H_2 et O_2 et de température en fonction de la fraction de mélange pour les écoulements réactifs laminaire et turbulent. Ces distributions sont des « instantanés » de la flamme.
Une première approche pour décrire la structure de flamme est de considérer une chimie irréversible infiniment rapide : on considère dans ce cas que le temps chimique caractéristique de la combustion est très petit devant le temps caractéristique de la mécanique des fluides. C'est l'hypothèse effectuée initialement par Burke et Schumann [16]. Le combustible et l'oxydant ne peuvent coexister sans réagir, le front de flamme est alors localisé au lieu des points où $Y_F = Y_O = 0$, soit où $Z = Z_{st}$. La structure de flamme pour une chimie infiniment rapide

(solution de Burke et Schumann) est représentée par des lignes noires sur la figure 2.11. La température maximale atteinte pour une flamme de diffusion est située sur la ligne $Z = Z_{st}$. Cette température est la même que la température atteinte pour une flamme prémélangée stœchiométrique (dans la mesure où la température initiale est la même dans tout le domaine). Au même état d'avancement, une simulation 0D, effectuée dans les conditions stœchiométriques avec une température initiale de 1500 K, nous donne une température identique à la température maximale obtenue dans la flamme de diffusion.
L'hypothèse de chimie irréversible n'est pas valable dans notre cas, car la chimie est simulée *via* un schéma cinétique complet. Ceci est parfaitement visible sur les deux graphiques : pour $Z = Z_{st}$, il existe un équilibre entre le combustible et l'oxydant ($Y_F \neq 0$ et $Y_O \neq 0$).

On constate sur le graphique du cas laminaire, que la distribution de température est tronquée, ceci est dû au fait que le domaine de simulation n'englobe pas la totalité de la flamme. Ces distributions sont intéressantes pour évaluer l'importance de la combustion et du mélange. Dans le cas laminaire, les points sont proches des lignes d'équilibre du diagramme de Burke et Schumann ce qui indique que la combustion est relativement importante. Les structures turbulentes sont visibles sur la distribution de température à travers la dispersion des points plus importante que dans le cas laminaire. Le mélange qui est augmenté par la turbulence, favorise une meilleure combustion.

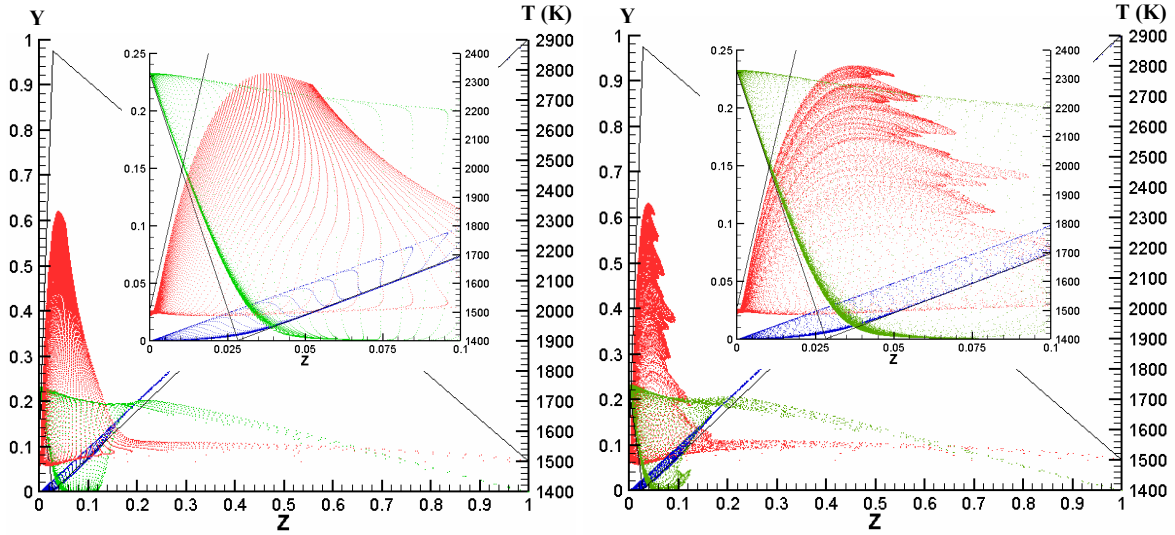


FIG. 2.11: Distribution des fractions massiques d'H_2, d'O_2 et de température en fonction de la fraction de mélange Z pour les écoulements réactif laminaire (à gauche) et turbulent (à droite).

Les statistiques temporelles de la température et des fractions massiques d'O_2 et d'H_2O sur l'axe du jet sont présentées sur les figures 2.12, 2.13 et 2.14. Ces figures couplées aux champs instantanés de température (pour les 4 simulations, fig. (2.15)) et de fraction massique d'H_2O (pour les simulations réactives, fig. (2.16)) mettent en évidence la phase de mélange. Durant cette phase, la température augmente de quelques Kelvin par cisaillement (phénomène amplifié par la condition d'adhérence à l'entrée du jet) et le dioxygène diffuse jusque sur l'axe du jet. Dans les cas réactifs, l'auto-inflammation est localisée à x≈5 mm, ce qui correspond à la distance moyenne parcourue durant le délai d'inflammation évalué en 0D ($\approx 7.10^{-6}$ s). La variation de fraction massique d'H_2O sur l'axe est relativement brutale. Loin de l'entrée, la quantité d'eau

est plus importante sur l'axe dans le cas laminaire que dans le cas turbulent. Ceci s'explique par une épaisseur de jet plus importante dans le cas turbulent (fig. (2.16)), le front de flamme est situé plus loin de l'axe et la production d'eau également.

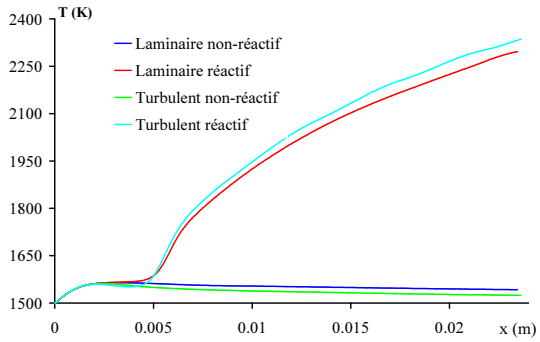


FIG. 2.12: Température moyenne sur l'axe du jet pour les 4 simulations.

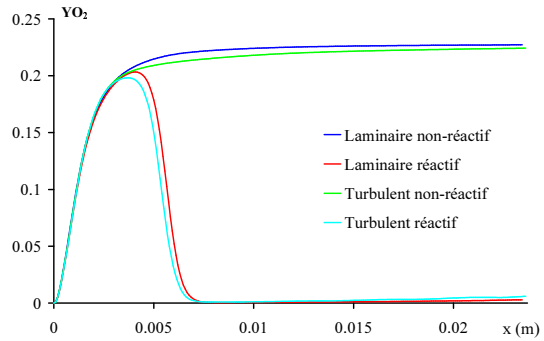


FIG. 2.13: Fraction massique moyenne d'O_2 sur l'axe du jet pour les 4 simulations.

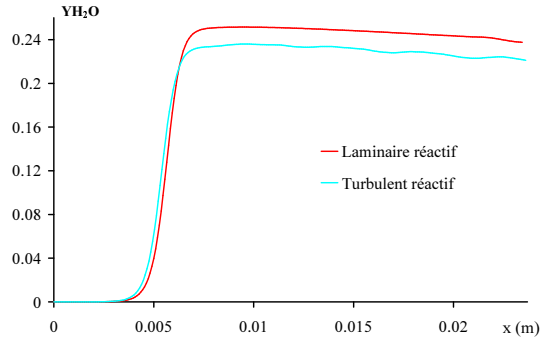


FIG. 2.14: Fraction massique moyenne d'H_2O sur l'axe du jet pour les 4 simulations.

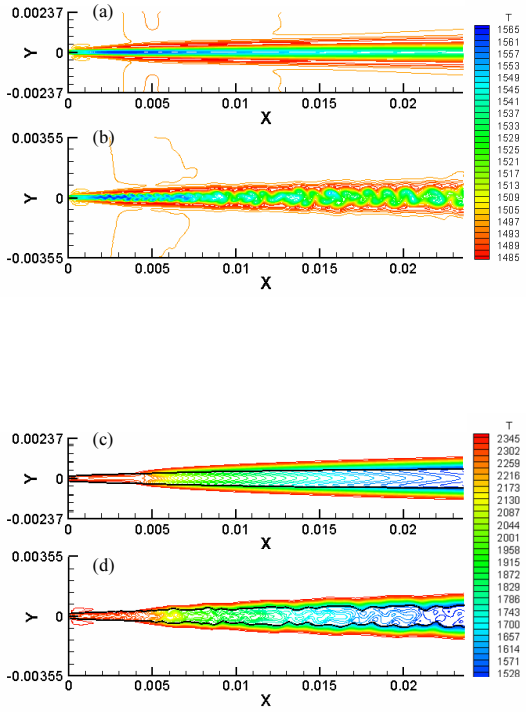


FIG. 2.15: Champ de température instantané pour le cas laminaire/non-réactif (a), turbulent/non-réactif (b), laminaire/réactif (c) et turbulent/réactif (d).

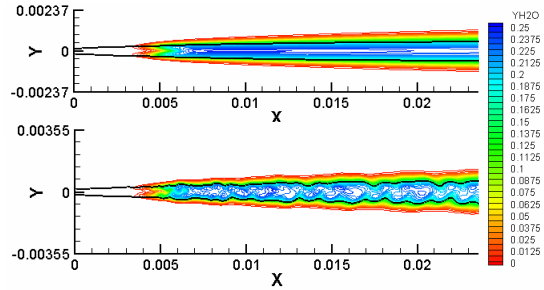


FIG. 2.16: Champ de fraction massique instantané d'H_2O pour le cas réactif laminaire (en haut) et turbulent (en bas).

Des profils axiaux et radiaux, on peut estimer des grandeurs globales caractéristiques du jet. La figure 2.17 présente deux paramètres utilisés classiquement : la demi-épaisseur dynamique δ et la décroissance axiale. La décroissance axiale correspond au développement axial de la vitesse

longitudinale. Cette décroissance peut être décrite par une loi de type hyperbolique en tenant compte de la vitesse du co-courant :

$$d(x) = \frac{u_{\mathrm{H}_2,injection} - u_{air,co-courant}}{u(x,0) - u_{air,co-courant}}$$

La demi-épaisseur dynamique est définie à partir des profils radiaux de la vitesse longitudinale moyenne u :

$$\delta(x) = y|_{u(x,y)=0,5u(x,0)}$$

Ces deux paramètres ont été évalués pour chacune des simulations. Dans chaque cas, on constate une croissance quasi-linéaire de la demi-épaisseur dynamique avec la distance à l'injection. La turbulence et la combustion ont pour effet d'augmenter l'épaisseur du jet, la dilatation due à l'augmentation de chaleur au sein du domaine devient prépondérante par rapport à la diffusion turbulente. Néanmoins la décroissance axiale augmente plus rapidement pour les cas non-réactifs. On constante un changement de pente à la position axiale correspondant à la flamme dans les cas réactifs.

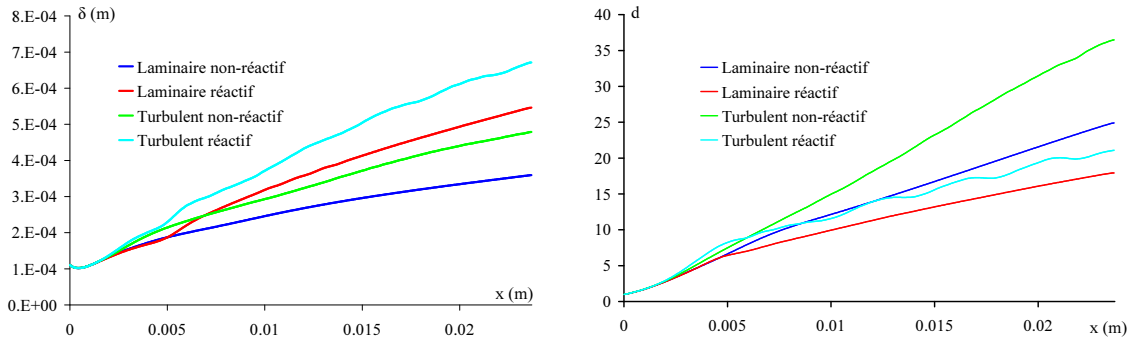


FIG. 2.17: Demi-épaisseur dynamique δ (gauche) et décroissance axiale (droite).

Ces simulations de flamme 2D ont permis de montrer la faisabilité de la DNS sur un cas plus complexe. Les résultats qualitatifs obtenus sont conformes avec la physique du phénomène : le mélange est augmenté par la turbulence, et par conséquent la combustion également. L'augmentation de température dans le cas réactif engendre une expansion thermique, et donc un jet plus épais que dans le cas non-réactif. Enfin, la température maximale et la position de la flamme sont en bonne concordance avec les résultats obtenus en 0D (§ 1.6).

DNS comme outils de développement de modèles de combustion turbulente

L'une des plus importantes contributions de la simulation numérique directe à la compréhension de la combustion turbulente a été le développement et la validation de modèles de turbulence [98] et de combustion [101],[131] pour la simulation de problèmes industriels. En effet, une description précise des effets de l'interaction turbulence-chimie est nécessaire pour prédire la plupart des écoulements réactifs. Une des difficultés de ces prévisions est due à la dépendance non-linéaire des termes sources chimiques aux variables scalaires comme la température et la composition du mélange.
La moyenne de Reynolds de l'équation de conservation des espèces (1.67) requiert l'évaluation

de la moyenne d'ensemble du terme source chimique. Cette moyenne engendre l'apparition d'un grand nombre de termes qu'il est nécessaire de modéliser pour fermer l'équation des espèces. Un des objectifs de la simulation numérique directe est d'évaluer et de valider les termes de fermeture des équations.
Le caractère non-linéaire de l'équation (1.67) est mis en évidence à travers la simulation du jet réactif turbulent.
On définit le terme source modifié d'énergie : $\Omega_T = \frac{\dot{\omega}_T"}{\rho C_v}$ et le terme source de production de l'espèce α : $\Omega_\alpha = \frac{\dot{\omega}_\alpha}{\rho}$ ($\dot{\omega}_T"$ et $\dot{\omega}_\alpha$ sont définis par (1.32) et (1.43)). La figure 2.18 présente les champs 2D et les profils axiaux du terme source modifié moyen $\overline{\Omega_T}$ pour l'énergie et du terme source modifié recalculé *a posteriori* avec les variables moyennes $\overline{\rho}$, $\overline{T}$ et $\overline{Y_\alpha}$, $\alpha = 1 \ldots N_{esp}$.

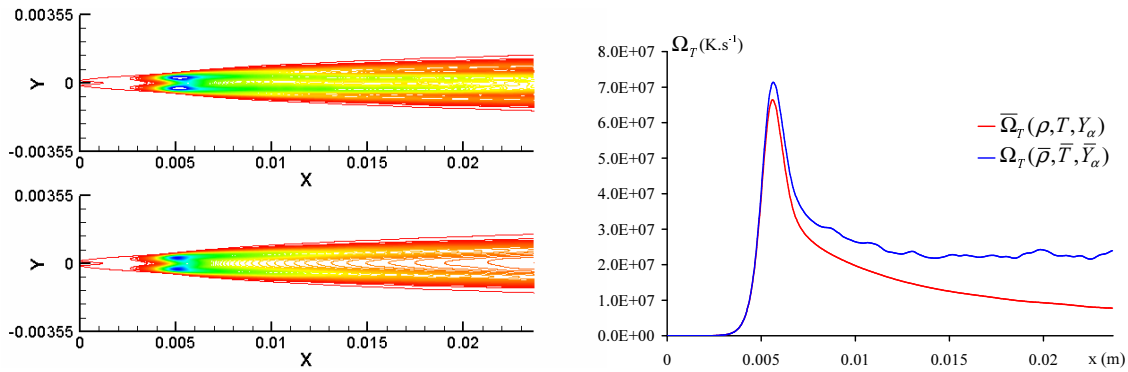


FIG. 2.18: Champ 2D et évolution axiale du terme source modifié d'énergie.

De même, les figures 2.19 et 2.20 présentent le terme source modifié moyen de l'espèce α $\overline{\Omega_\alpha}(\rho, T, Y_{1\ldots N_{esp}})$ et le terme source modifié de l'espèce α recalculé avec les variables moyennes $\Omega_\alpha(\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_{1\ldots N_{esp}})$ pour les espèces H_2, O_2, OH et H_2O. Pour les espèces H_2, O_2 et H_2O, la différence entre $\overline{\Omega_\alpha}(\rho, T, Y_{1\ldots N_{esp}})$ et $\Omega_\alpha(\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y}_{1\ldots N_{esp}})$ n'est pas très importante sur l'axe, alors que pour l'espèce OH, le comportement de la moyenne de $\overline{\Omega}_{OH}$ n'est pas reproduit par le calcul *a posteriori* du terme de production de l'espèce OH. Cette différence sur l'axe est également visible sur le champ 2D.

Globalement, cette étude a permis de mettre en évidence la simulation numérique directe en tant qu'outil de développement de modèle de combustion. Le taux moyen de production d'énergie et des espèces ne peut pas être exprimé comme une fonction de la composition et de la température moyenne. Les termes non-calculables engendrés par le filtrage des équations (LES) ou leur moyenne de Reynolds (RANS) sont importants et il est nécessaire de faire attention à la part des termes négligés par rapport aux termes modélisés.

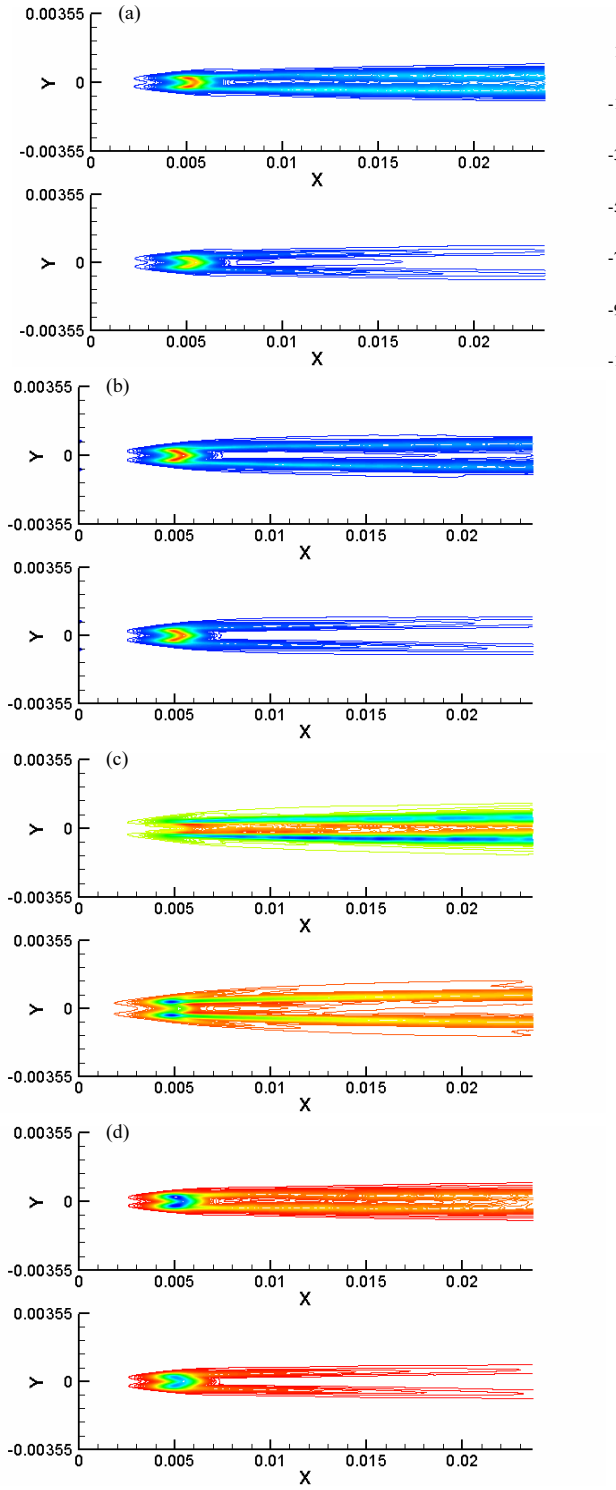


FIG. 2.19: Champ du terme source modifié de production pour H_2 (a), O_2 (b), OH (c) et H_2O (d). Pour chaque espèce α, en haut : $\Omega_\alpha(\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y_\beta})$, en bas : $\overline{\Omega_\alpha}(\rho, T, Y_\beta)$

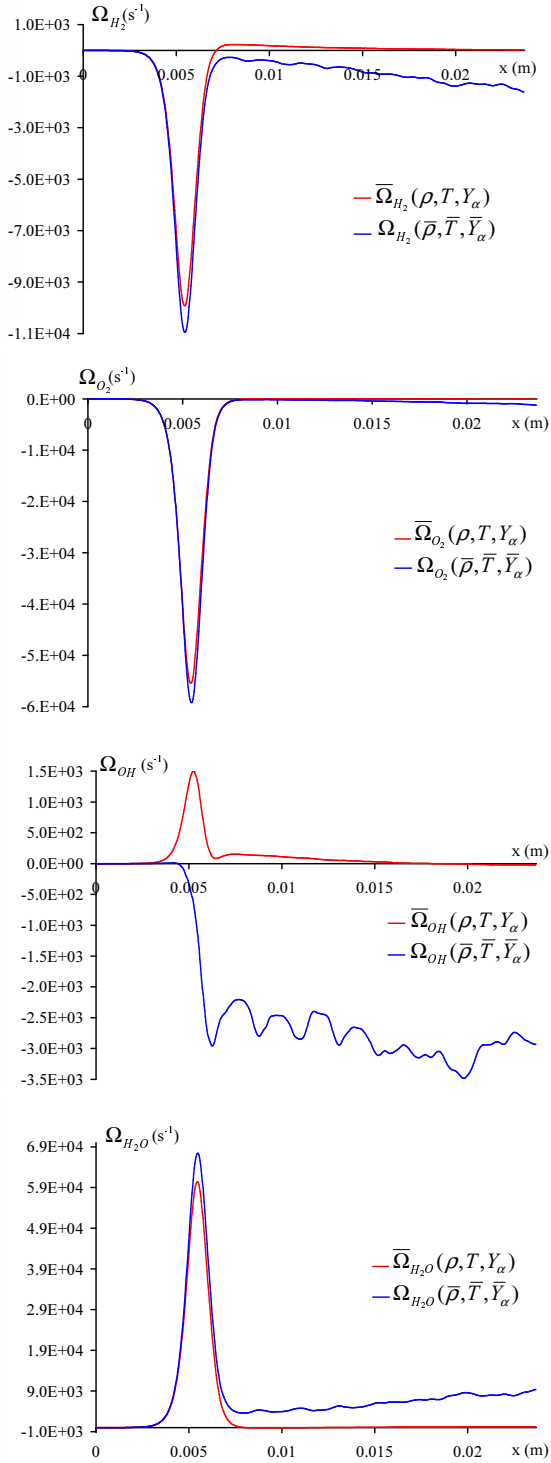


FIG. 2.20: Évolution axiale du terme source modifié de production pour H_2, O_2, OH et H_2O.

2.5.2 Flamme turbulente 3D

L'objectif de cette section était initialement de simuler une flamme turbulente plissée en chimie détaillée afin d'en extraire des informations utiles sur les interactions turbulence/chimie comme la densité de surface de flamme, les effets de courbure ou d'étirement sur la vitesse fondamentale, la structure du front de flamme ou la limite d'extinction locale. Ce calcul consiste à allumer un mélange stœchiométrique et à laisser la flamme se propager dans un écoulement turbulent homogène et isotrope (THI), donc sans vitesse moyenne. Une telle simulation 3D nécessitant des ressources informatiques très importantes (résolution $\approx 256^3$ au minimum), la version parallèle OpenMP du code Compact devait être mise en oeuvre sur le calculateur NEC-SX8 de l'IDRIS. Du fait des problèmes rencontrés avec le compilateur NEC (voir § 2.3.2), seul un calcul à faible résolution de 128^3 a été réalisé en version mono-processeur NEC-SX8. Ce sont les résultats de ce calcul préliminaire que l'on présente ici : on compare la structure du front de flamme étiré, quasi-sphérique, à celle du cas unidimensionnel de la section 2.4.1. On en déduit la vitesse et la longueur de Markstein associées.

Diagramme de combustion turbulente prémélangée : échelles et nombres sans dimensions

Les différents régimes de combustion turbulente prémélangée sont caractérisés par les rapports des échelles de vitesse (u'/S_L) d'une part, et de longueur (l_t/l_c) d'autre part, de la turbulence et de la chimie. L'échelle de vitesse turbulente u' est la valeur *r.m.s.* des fluctuations de vitesse, que l'on peut relier sans ambiguïté à l'énergie cinétique $k =< u'_i u'_i > /2$ de la turbulence par unité de masse en THI (et en THI seulement...) :

$$u' \equiv \left\langle u'^2 \right\rangle^{1/2} = \left(\frac{2}{3}k\right)^{1/2} \tag{2.47}$$

Pour la chimie, S_L est la vitesse de flamme laminaire, déterminée au chapitre 2.4.1 dans le cas non étiré pour un mélange stœchiométrique H_2/air :

$$S_L \equiv S_L^0 \approx 2,1\,\mathrm{m.s}^{-1}$$

Concernant les échelles de longueur, les choses sont moins claires. Très souvent (e.g.[104]), on appelle « échelle intégrale turbulente » la grandeur $l_t = u'^3/\epsilon$ où (toujours en situation homogène)

$$\epsilon = \nu \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right\rangle = -\frac{dk}{dt}$$

est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente massique. Nous considérons plutôt que la longueur ainsi obtenue caractérise les échelles énergétiques (gros tourbillons), lieu du pic du spectre d'énergie, puisqu'elle est construite dimensionnellement sur k. L'échelle de longueur caractéristique de la chimie est l'épaisseur du front de flamme, pour laquelle on trouve plusieurs définitions donnant des valeurs dans un rapport 1 à 5. On retient la valeur basée sur le gradient maximum mesurée lors des simulations unidimensionnelles (§ 2.4.1, table 2.1, cas B) :

$$l_c \equiv \delta_L^0 \approx 0,3\,\mathrm{mm}$$

À partir des échelles de vitesse et de longueur, on fabrique les échelles de temps caractéristiques de la turbulence et de la chimie :

$$\tau_t = \frac{l_t}{u'} \qquad ; \qquad \tau_c = \frac{\delta_L^0}{S_L}$$

dont le rapport est le nombre de Damköhler

$$\mathrm{Da} = \frac{\tau_t}{\tau_c} \tag{2.48}$$

Si Da >> 1, la chimie est beaucoup plus « rapide » que la dynamique de l'écoulement et le front de flamme, très mince, est simplement transporté et distordu par la turbulence : c'est le régime dit *de flammelette*. On peut préciser les choses en introduisant les échelles de Kolmogorov η et v caractéristiques des plus petites structures turbulentes pour lesquelles le nombre de Reynolds vaut 1 :

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \quad ; \quad v = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad ; \quad \frac{v\eta}{\nu} = 1 \tag{2.49}$$

dont on déduit l'échelle de temps

$$\tau_K = \frac{\eta}{v} = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2}$$

La comparaison au temps chimique donne le nombre de Karlovitz :

$$\mathrm{Ka} = \frac{\tau_c}{\tau_K} \tag{2.50}$$

On sera donc en régime de flammelette si Da >> 1 et Ka << 1. À l'inverse, si Da << 1 et Ka >> 1, réactifs et produits sont brassés dans un front de flamme turbulent très épais : c'est le *réacteur parfaitement agité*. Entre les deux, on trouve tous les régimes intermédiaires où chimie et turbulence interagissent de façon complexe (modèle de *flamme épaissie*).

Le nombre de Karlovitz peut également s'estimer à partir des échelles énergétiques :

$$\mathrm{Ka} = \frac{\delta_L^0}{S_L}\left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} = \mathrm{Re}_L^{1/2}\left(\frac{u'}{S_L}\right)^{3/2}\left(\frac{l_t}{\delta_L^0}\right)^{-1/2} \tag{2.51}$$

où

$$\mathrm{Re}_L = \frac{\delta_L^0 S_L}{\nu} \tag{2.52}$$

est le nombre de Reynols associé au front de flamme laminaire, généralement supposé égal à 1. Selon le modèle de transport décrit à la section 1.4, la viscosité cinématique d'un mélange H_2/air stœchiométrique à 300 K vaut $\nu = 2,32\,10^{-5}$ m^2.s^{-1}, ce qui donne $\mathrm{Re}_L \approx 30$, bien supérieur à l'unité.

On définit aussi le nombre de Reynolds turbulent associé aux échelles énergétiques :

$$\mathrm{Re}_t = \frac{u' l_t}{\nu} \tag{2.53}$$

Si on suppose $\mathrm{Re}_L = 1$, on en tire ν qu'on injecte dans (2.53) qui devient

$$\mathrm{Re}_t = \frac{u'}{S_L}\frac{l_t}{\delta_L^0} \quad ; \quad \mathrm{Re}_L = 1 \tag{2.54}$$

En combinant (2.51) et (2.54), on obtient l'identité classsique

$$\mathrm{Re}_t = \mathrm{Da}^2\mathrm{Ka}^2 \quad ; \quad \mathrm{Re}_L = 1 \tag{2.55}$$

Dans le cas présent, ayant fixé la richesse du prémélange, donc le couple (S_L, δ_L^0), la seule façon de faire varier les paramètres du calcul est de fixer les caractéristiques du champ turbulent initial : Re_t et donc le rapport u'/S_L.

Génération des conditions initiales turbulentes

Il s'agit de générer un champ de vitesse initial solution des équations de Navier-Stokes, correspondant à une turbulence homogène et isotrope présentant une zone inertielle bien établie et des propriétés spectrales pré-définies. Pour cela, on procède en deux temps :

1. On construit d'abord quasi-analytiquement, dans un domaine cubique d'arrête L, un champ turbulent indivergent périodique, de nombre d'onde fondamental $K_L = 2\pi/L$, présentant un spectre initial « pointu » au mode K_I, de la forme[5] :

$$E(K, t = 0) = AK^n e^{-\alpha\left(\frac{K}{K_I}\right)^2} \tag{2.56}$$

   Le choix de K_I fixe la valeur de $l_t \approx 2\pi/K_I$ (l_t correspondrait à la taille de la maille pour une turbulence de grille). La procédure de génération du champ de vitesse aléatoire spectral est décrite dans [43]. Le paramètre α « étale » plus ou moins le spectre initial. On choisit $\alpha = 4$ et $K_I/K_L = 6$. On peut fixer le niveau U_0^2 d'énergie cinétique

$$k(t = 0) = \int_0^\infty E(K, 0)dK = U_0^2\tilde{k} \qquad ; \qquad \tilde{k} = 1 \tag{2.57}$$

   du champ initial en prenant

$$A^{-1} = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha}{(K_I/K_L)^2}\right)^{-(n+1)/2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$$

   soit, avec $n = 8$ et $\alpha = 4$:

$$A = \frac{2^{14}}{105\sqrt{\pi}}\left(\frac{K_I}{K_L}\right)^{-9}$$

   Le nombre de Reynolds initial, basé sur les échelle U_0 et L est fixé à 1000, valeur maximale pour une DNS bien résolue à 128^3 (*cut-off* numérique à $K_c/K_L = 63$).

2. on laisse ensuite évoluer ce champ à l'aide d'un code pseudo-spectral (collocation Fourier) jusqu'à ce que la dynamique installe une zone inertielle, puis une zone dissipative assurant le début de l'auto-amortissement de la turbulence. Le temps est compté en nombre de retournement des grosses structures énergétiques :

$$t \text{ (s)} = \frac{1}{U_0 K_I}\,\tilde{t} \text{ (retournements)}$$

   La figure 2.21 montre le spectre initial (2.56) et son évolution après 10 retournements. On vérifie bien l'établissement d'une zone inertielle en $-5/3$. L'évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente (normalisée à 1 en début de simulation) est représentée sur la figure 2.22 : la dynamique initiale non-visqueuse est quasi-conservative jusqu'à la phase d'effondrement auto-similaire du spectre où l'énergie cinétique décroît selon une loi en puissance du temps. Elle vaut $\tilde{k} = 0,195$ à $\tilde{t} = 10$. Le champ turbulent 3D à cet instant est montré sur la figure 2.23, à titre d'illustration.

On applique ce champ de vitesse obtenu spectralement au prémélange quasi-stœchiométrique H_2/air du cas B, table 2.1, qu'on allume en imposant radialement, en coordonnées sphériques, le profil de température (2.44).

[5] En choisissant $n = 8$ dans (2.56), on vérifie *a posteriori* que la simulation reproduit bien le comportement théorique EDQNM prévoyant l'établissement immédiat d'un spectre infrarouge en K^4 lorsque le spectre initial est en K^n, $n > 4$, dans les bas nombres d'onde [97].

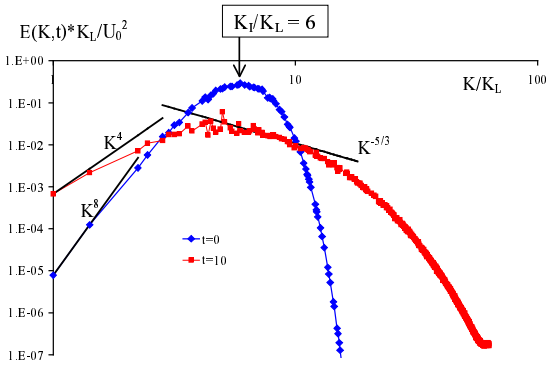


FIG. 2.21: Spectre d'énergie à $t = 0$ et après 10 retournements.

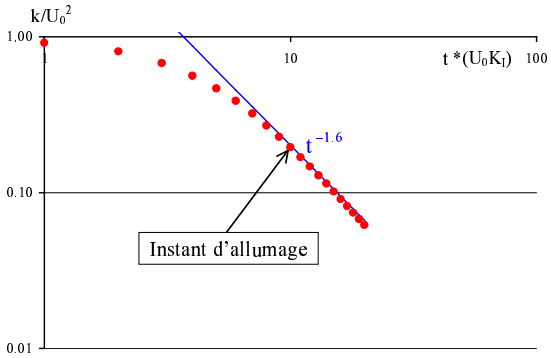


FIG. 2.22: Évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente.

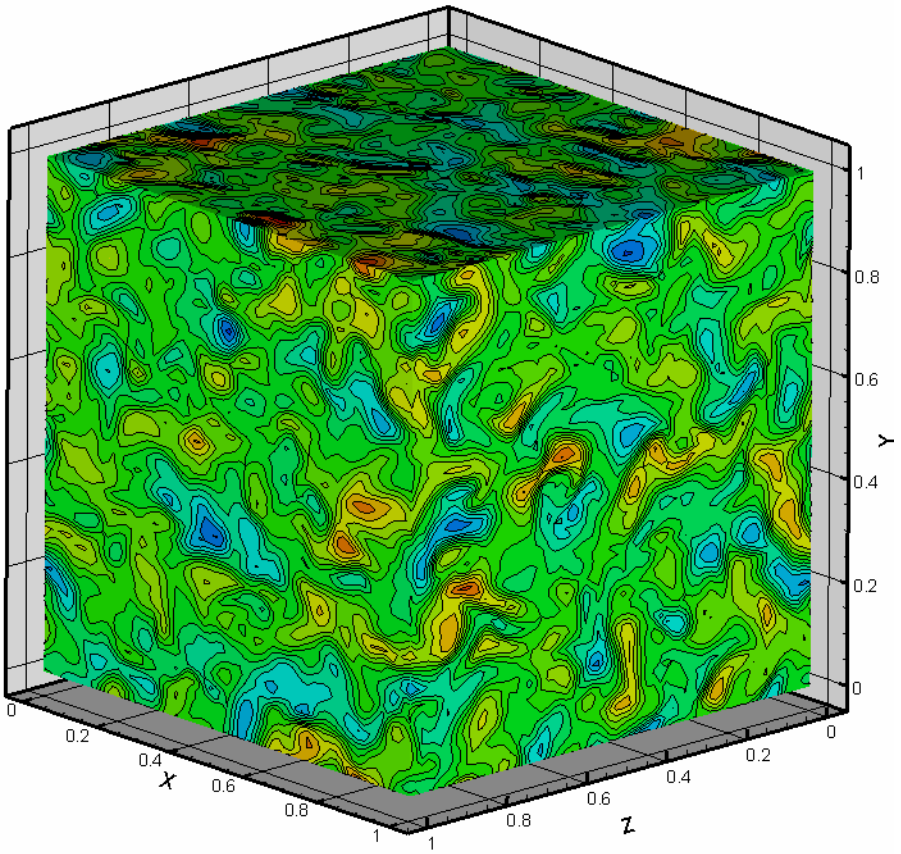


FIG. 2.23: Une composante du champ de vitesse (isotrope) après 10 retournements.

Simulation réactive turbulente

On compte désormais le temps à partir du début de la simulation réactive 3D. À $t = 0$ s, on décide de prendre $u'/S_L = 1$, soit $u' = 2,1$ m.s^{-1}. Alors, avec $\tilde{k} = 0,195$:

$$u' = U_0\tilde{u}' = U_0\left(\frac{2}{3}\tilde{k}\right)^{1/2} = 0,36U_0$$

on déduit le facteur multiplicatif $U_0 = 2,1/0,36 = 5,83$ m.s^{-1} à appliquer au champ spectral.

Le code Compact utilise des variables adimensionnées (section 2.2.1). Le nombre de Reynolds de référence est Re$_{ref}$=100. On en déduit la longueur de référence $L_{ref} = 1,739.10^{-4}$ m. Le calcul se fait dans un domaine cubique de $20L_{ref}$ d'arrête, soit $L = 3,478$ mm. Avec $K_I/K_L = 6$, on en déduit l'échelle turbulente :

$$l_t \approx L/6 = 0,58\,\text{mm}$$

et le rapport

$$\frac{l_t}{\delta_L^0} \approx 1,5 \text{ à } 3$$

selon le choix de l'épaisseur du front de flamme. On a donc

$$\text{Da} = 1,5 \text{ à } 3 \qquad \text{et} \qquad \text{Ka} = 0,6 \text{ à } 0,8$$

soit un nombre de Karlovitz de l'ordre de l'unité. On est donc en principe à la limite définie par le critère de Klimov-Williams. Si on suppose que le champ turbulent est résolu jusqu'à l'échelle de Kolmogorov, on peut estimer

$$\frac{K_\eta}{K_L} \approx \frac{K_c}{K_L} = 63$$

et donc

$$\eta \approx L/63 \approx 0,06\ mm$$

et le front de flamme est de 3 à 6 fois plus épais que l'échelle de Kolmogorov. Les figures 2.24 et 2.25 montrent respectivement les profils de température et de fraction massique d'eau le long des trois axes de coordonnées à deux instants, $t_1 = 0,0232$ ms et $t_2 = 0,032$ ms après l'allumage. À ces instants, la structure du front de flamme est peu différente de celui de la flamme 1D à

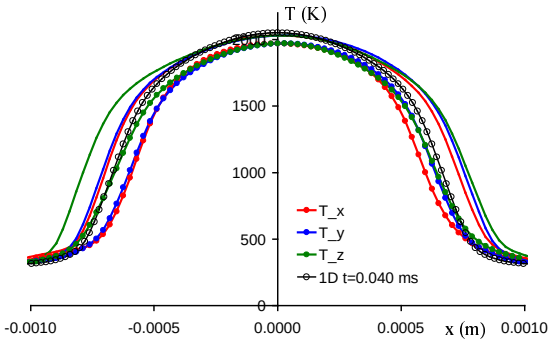


FIG. 2.24: Profils de température à $t_1 = 0,0232$ ms (cercles) et à $t_2 = 0,032$ ms.

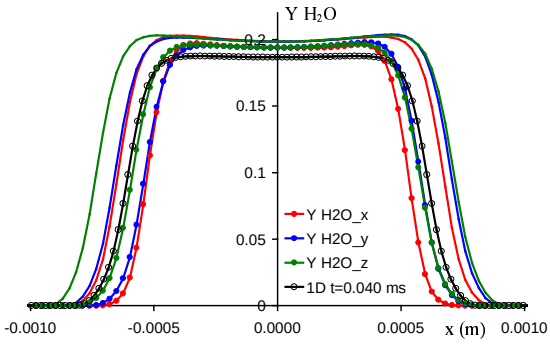


FIG. 2.25: idem figure 2.24 : fraction massique d'H_2O.

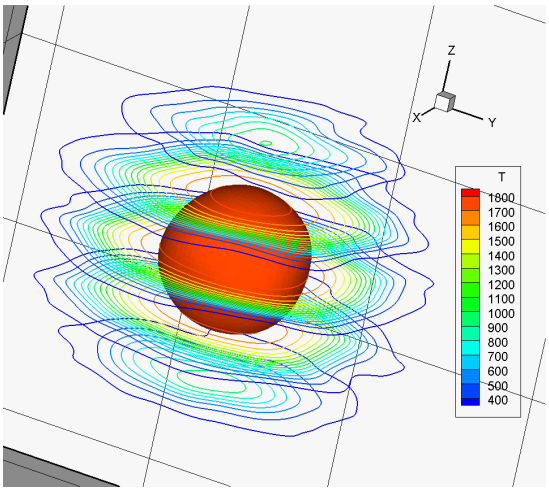


FIG. 2.26: Champ de température à $t = 0,0232$ ms.

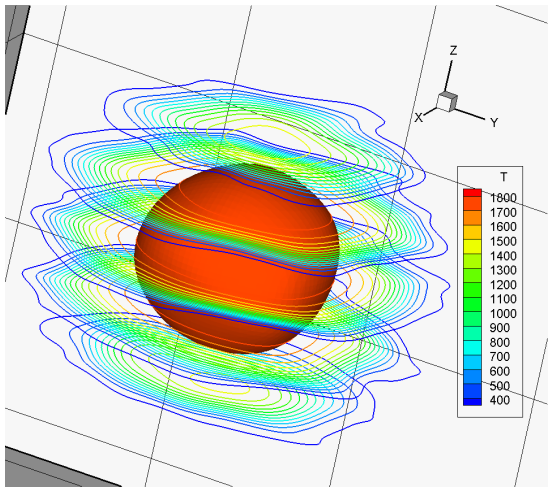


FIG. 2.27: idem figure 2.26 : $t = 0,032$ ms.

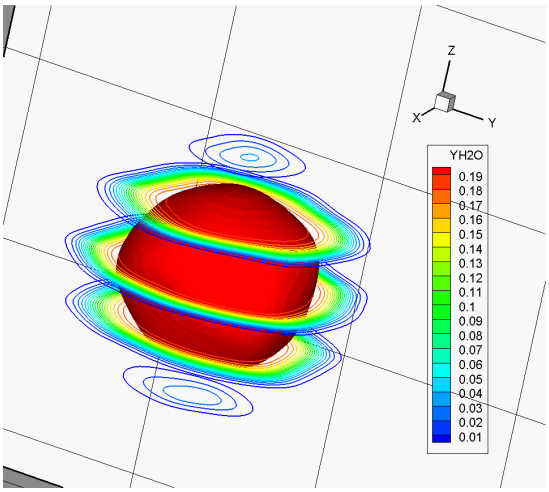


FIG. 2.28: Champ de fraction massique d'H_2O à $t = 0,0232$ ms.

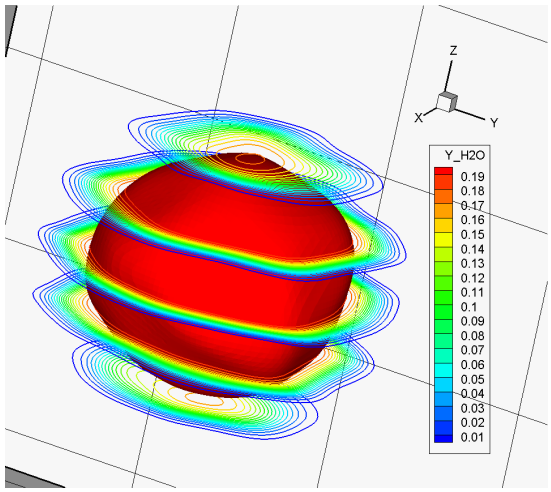


FIG. 2.29: idem figure 2.28 : : $t = 0,032$ ms.

$t = 0,040$ ms décrite à la section 2.4.1, cas B. Les figures 2.26 à 2.29 donnent une image 3D de la flamme : celle-ci est quasi-sphérique. On peut donc estimer aisément la vitesse du front de flamme à partir des rayons $r_1 \approx 0,56$ mm et $r_2 \approx 0,68$ mm observés aux 2 instants t_1 et t_2 :

$$V_S = \frac{dr}{dt} \approx \frac{r_2 - r_1}{t_2 - t_1} = 14 \text{ m.s}^{-1} \tag{2.58}$$

et par conséquent l'étirement moyen entre t_1 et t_2 :

$$\kappa = \frac{1}{A}\frac{dA}{dt} = \frac{2}{r_{moy}} V_S \approx 45.10^3 \text{ s}^{-1} \tag{2.59}$$

où A est la surface quasi-sphérique de la flamme. La vitesse V_S^0 du front de flamme non-étiré correspondant permet d'introduire la longueur de Markstein L caractéristique de la stabilité de la flamme :

$$V_S = V_S^0 - L\kappa \tag{2.60}$$

qu'on relie à la vitesse fondamentale[6] *via* le facteur d'expansion des gaz (u : frais, b : brûlés)

$$\sigma = \frac{V_S^0}{S_L^0} \approx \frac{\rho_u}{\rho_b} = \frac{T_b}{T_u} \approx \frac{2000}{300} \approx 6,5 \tag{2.61}$$

En prenant la vitesse fondamentale $S_L^0 = 2,46$ m.s^{-1} du cas B, on en déduit

$$V_S^0 \approx 16,4 \text{ m.s}^{-1} \quad \text{et} \quad L = 0,055 \text{ mm}$$

soit une longueur de Markstein positive, cohérente avec la stabilité des flammes H_2/air. Avec la relation

$$S_L = S_L^0 - \frac{L}{\sigma}\kappa \tag{2.62}$$

on trouve une vitesse de flamme étirée $S_L = 2,085$ m.s^{-1}.

Conclusion

Ce calcul, bien que d'un intérêt quelque peu limité, a montré d'une part la faisabilité d'un calcul 3D réactif avec chimie détaillée en version mono-processeur, et d'autre part la cohérence de la vitesse de flamme étirée avec celle non étirée, *i.e.* une flamme stable, de longueur de Markstein positive. Enfin, on peut remarquer que l'allumage du mélange au centre du domaine de calcul génère une expansion des gaz qui produit une zone laminaire au détriment de la turbulence environnante, d'où un front de flamme peu plissé. Globalement, ces premiers résultats sont encourageants et devraient servir de base à la réalisation de simulations plus résolues où le nombre de Reynolds Re_t serait plus élevé.

[6] à pression constante, ce qui le cas ici

Chapitre 3

Simulation des Grandes Échelles Implicite : le code WENO

Le second code développé dans le cadre de cette thèse est basé sur l'utilisation de méthodes récentes à capture de choc : les schémas WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) [90]. La reconstruction WENO est une méthode d'ordre élevé développée spécifiquement pour les problèmes présentant à la fois une physique riche (e.g. turbulence) et de forts gradients (e.g. discontinuité de contact, choc,...) [117]. Ce second code est principalement destiné à tester l'approche de SGE implicite (équivalente au MILES : *Monotonically Integrated Large Eddy Simulation*) pour la simulation d'écoulements réactifs turbulents. L'objectif est d'analyser les performances effectives des schémas WENO d'ordre 3, 5, 7, 9, 11. Nous nous intéressons également à l'extension aux simulations multi-espèces.

3.1 Introduction

L'approche MILES consiste à résoudre directement les équations de Navier-Stokes à l'aide de schémas numériques monotones à capture de chocs. Le concept de MILES a été développé par Boris [13] et complété par Grinstein et Fureby [46, 55, 56]. Il s'appuie sur le fait que la dissipation intrinsèque aux schémas numériques à capture de choc est de même nature que celle induite par les modèles sous-maille généralement utilisés en LES. Le modèle sous-maille est supposé implicitement inclus dans le schéma numérique.

La première étape du développement du code WENO a été le choix du schéma numérique. Cette détermination s'est effectuée en fonction des critères suivants :

- être suffisamment dissipatif, par essence même de l'approche MILES, mais ceci dans certaines limites. En effet, la dissipation numérique générée par le schéma doit être inférieure à la dissipation générée par un modèle sous-maille afin d'obtenir des résultats convenables.
- être le moins dispersif possible ;
- être robuste (pour mener des études prospectives dans des domaines de physique complexe, par exemple dans les cas de combustion avec propagation de flamme ou pour des simulations supersoniques avec choc) ;
- résoudre correctement les discontinuités de contact ;
- résoudre correctement les fluctuations liées à la turbulence et à la combustion (flammes plissées, oscillation de flamme,...).

En résumé, il faut utiliser un schéma précis, à la fois capable de représenter les petites structures

de l'écoulement avec le minimum de dissipation numérique et de résoudre les discontinuités avec la robustesse commune aux schémas à capture de choc.

Les schémas de haute précision peuvent être classés en différentes familles. On distingue entre autres les schémas TVD (*Total Variation Diminishing* [137]), les schémas basés sur les solveurs de Riemann (PPM (*Piecewise Parabolic Method* [25]), CLAW développé par Leveque [88],...), les schémas FCP (*Flux Corrected Transport* [14, 57]), et les schémas ENO (*Essentially Non Oscillatory* [62, 117]). Les schémas TVD sont très utilisés pour la résolution d'écoulements avec ondes de choc. Bien qu'ils soient peu dispersifs, ils restent trop dissipatifs (même à l'ordre 2) dans les régions à faibles gradients, dégénérant à l'ordre 1 près des extremas. Les méthodes ENO, plus récentes, sont très précises dans les régions régulières mais elles présentent un caractère diffusif à proximité des discontinuités de contact. Les schémas WENO (*Weighted Essentially Non Oscillatory*), développés par Liu [90], en sont une extension. Ils sont plus précis que les schémas ENO du fait de la montée en ordre avec le même stencil de calcul. Dans [89], Liska et Wendroff présentent une comparaison de huit schémas aux différences finies pour la résolution des lois de conservation hyperboliques. Ils montrent que les schémas WENO, bien que chers en temps CPU, sont plus robustes et donnent des résultats précis.

Le schéma WENO semble être un bon compromis pour répondre aux exigences que l'on s'est fixé [62, 71, 117, 118, 119]. Initiée il y a 15 ans, la recherche sur ce schéma est encore très active. Plusieurs approches qui modifient ou adaptent les schémas WENO ont été proposées dans la littérature afin de pallier leurs défauts. En effet, dans leur forme initiale, les schémas WENO ont tendance à engendrer une dissipation numérique trop importante dans les régions régulières. De plus, ils génèrent, dans certaines conditions, des oscillations près des discontinuités de contact. Des schémas hybrides ont été développés afin d'améliorer les performances du schéma WENO seul ou de gagner en temps de calcul. Ainsi, Pirozzoli [103], Ren *et al.* [110], Shen *et al.* [115, 116] et plus récemment Tu et Yuan [130] ont développé des schémas hybrides compact-WENO (il existait déjà des schémas compact-ENO développés par Adams [4, 5]). Lardjane [82], Kim [78] puis Costa [26] ont également développé des algorithmes couplant des schémas WENO avec des schémas aux différences finies centrées d'ordre élevé. Ceci permet d'améliorer le pouvoir de résolution du schéma WENO. Enfin, il existe aussi des schémas hybrides WENO-spectral [27].
D'autres études sont réalisées sur une détection plus précise de la raideur des gradients dans le domaine de calcul afin de fournir la quantité de dissipation nécessaire pour résoudre le plus correctement possible les régions régulières et les régions à fortes discontinuités. Ces études sont aussi importantes pour les schémas hybrides car elles permettent d'obtenir des senseurs pertinents pour décider du choix du schéma selon la zone du domaine. Ces algorithmes de détection sont entre autres basés sur des méthodes de compression artificielle (ACM *Artificial Compression Method*) [71, 136] et permettent d'améliorer la résolution des discontinuités de contact.
Récemment, Latini *et al.* [84] ont testé les effets de l'ordre du schéma WENO sur des instabilités de Richtmyer-Meshkov. Ils observent une réduction de la dissipation numérique avec la montée en ordre. Ainsi, le schéma WENO d'ordre 9 leur semble un bon compromis entre qualité des résultats et coût de calcul.

À notre connaissance, l'ensemble de ces travaux de recherche se résument bien souvent au cas mono-espèce. Il existe peu de références sur l'emploi de schéma WENO pour la résolution de systèmes multi-espèces. Or, deux difficultés majeures apparaissent lors de la résolution de systèmes multi-espèces. La première est le respect du principe du maximum *i.e.* garantir que les fractions massiques restent dans l'intervalle [0 ;1]. Une modification du calcul du flux numé-

rique a été introduit par Larrouturou [83] à ce sujet. La seconde est l'émergence d'oscillations de pression au niveau des discontinuités de contact quand γ (1.22) n'est pas constant. Abgrall et Karni présentent différentes méthodes pour remédier à ce problème dans [1]. Cette difficulté a également été étudiée spécifiquement pour les schémas WENO par Johnsen et Colonius [72]. On notera que ce problème n'apparaît pas pour une résolution des équations écrites pour les variables primitives (cas du code Compact).

Nous avons choisi d'implémenter la formulation aux différences finies (cette formulation est plus simple et plus économique que celle par volumes finis) des schémas WENO d'ordre 3 à 11 avec différentes reconstructions, dans un code bidimensionnel parallélisé par décomposition de domaine (le schéma WENO étant local, il s'y prête bien).
Ce chapitre s'organise de la façon suivante : tout d'abord on décrit la méthode WENO et son implémentation, puis on présente une série de cas élémentaires 1D et 2D afin de tester les performances des différentes formulations mises en œuvre, avant de conclure sur celles-ci.

3.2 La méthode WENO

L'idée de base de cette méthode est de faire une combinaison pondérée de toutes les reconstructions ENO pour un stencil donné en choisissant les valeurs de pondération qui privilégient les reconstructions les plus régulières et excluent les plus raides. On peut ainsi garantir à la solution d'être d'ordre élevé en tout point du domaine, sans dégradation au voisinage de la discontinuité.

3.2.1 Méthode de base

Reconstruction et approximation 1D

On considère un domaine unidimensionnel découpé en N cellules I_i :

$$I_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \qquad \text{pour} \quad i = 1, ..., N$$

où

$$x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < ... < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}}$$

Sur chaque cellule, on dispose de la valeur moyenne de la fonction f, notée $\overline{f}$ (fig. 3.1) :

$$x_i = \frac{1}{2}\left(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}\right) \qquad \text{et} \quad \Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$$

avec

$$\overline{f}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(\xi)\, d\xi$$

Reconstruction par valeur moyenne

Connaissant les valeurs moyennes $\overline{f}_i$, on cherche pour chaque cellule I_i une approximation polynomiale d'ordre K de f. En particulier, aux interfaces :

$$f_{i+\frac{1}{2}} = f(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^K) \qquad \text{avec} \quad \Delta x = \underset{1 \leq i \leq N}{max} \Delta x_i$$

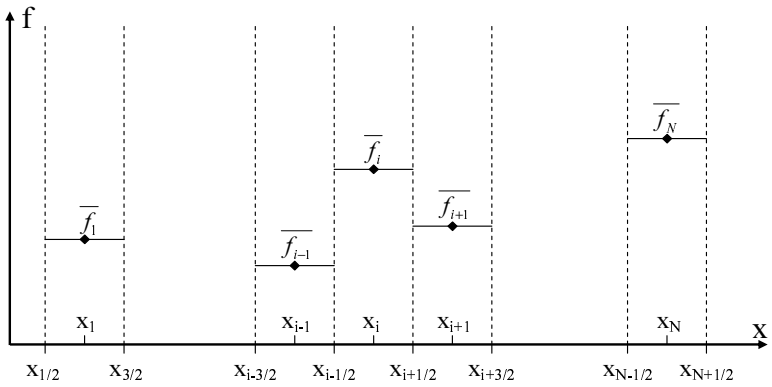


FIG. 3.1: Grille de reconstruction.

Pour le stencil $S_r(i) = \{I_{i-r}, ..., I_{i+s}\}$ contenant I_i avec r cellules à gauche et s à droite telles que $r + s = K - 1$, on obtient la reconstruction unique :

$$f^r_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{j=0}^{K-1} c_{rj} \overline{f}_{i-r+j} \qquad r = 0, ..., K-1$$

Les constantes c_{rj} sont données en table (3.1) pour K variant de 1 à 6.

k	r	$j=0$	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$j=5$
1	0	1					
2	0	1/2	1/2				
	1	-1/2	3/2				
3	0	1/3	5/6	-1/6			
	1	-1/6	5/6	1/3			
	2	1/3	-7/6	11/6			
4	0	1/4	13/12	-5/12	1/12		
	1	-1/12	7/12	7/12	-1/12		
	2	1/12	-5/12	13/12	1/4		
	3	-1/4	13/12	-23/12	25/12		
5	0	1/5	77/60	-43/60	17/60	-1/20	
	1	-1/20	9/20	47/60	-13/60	1/30	
	2	1/30	-13/60	47/60	9/20	-1/20	
	3	-1/20	17/60	-43/60	77/60	1/5	
	4	1/5	-21/20	137/60	-163/60	137/60	
6	0	1/6	29/20	-21/20	37/60	-13/60	1/30
	1	-1/30	11/30	19/20	-23/60	7/60	-1/60
	2	1/60	-2/15	37/60	37/60	-2/15	1/60
	3	-1/60	7/60	-23/60	19/20	11/30	-1/30
	4	1/30	-13/60	37/60	-21/20	29/20	1/6
	5	-1/6	31/30	-163/60	79/20	-71/20	49/20

TAB. 3.1: Coefficients c_{rj} pour k=1 à 6.

Loi de conservation scalaire 1D

Considérons dans un premier temps, l'équation de conservation scalaire unidimensionnelle sous forme conservative :

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial x} \tag{3.1}$$

L'objectif est ici d'évaluer la dérivée des flux f. Une fois que le terme de droite de cette équation est évalué, l'avancement en temps peut-être effectué avec une méthode Runge-Kutta (méthode des lignes).
Pour un schéma centré d'ordre 2, la dérivée première s'exprime par :

$$f'(x) \approx \frac{1}{\Delta x}\left[f\left(x+\frac{\Delta x}{2}\right) - f\left(x-\frac{\Delta x}{2}\right)\right] = \frac{\partial f(x)}{\partial x} + O(\Delta x^2)$$

Pour augmenter l'ordre du schéma, on cherche l'application h telle que :

$$\frac{1}{\Delta x}\left[h\left(x+\frac{\Delta x}{2}\right) - h\left(x-\frac{\Delta x}{2}\right)\right] = f'(x) + O(\Delta x^K), K \geq 2$$

On peut se ramener au problème précédent en notant que :

$$f(x) = \frac{1}{\Delta x}\int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} h(\xi)d\xi$$

Connaissant les valeurs nodales $f_i = f(x_i) \quad i = 1, ..., N$ de la fonction f, on a bien défini le flux numérique $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}$ tel que la différence des flux soit une approximation d'ordre K de la fonction dérivée f' :

$$\frac{1}{\Delta x_i}\left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}}\right) = f'(x_i) + O(\Delta x^K) \qquad i = 1, ..., N$$

Il suffit donc de déterminer $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}$ tel que :

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} = h(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^K)$$

Ainsi sur le stencil $S_r(i)$ on aura :

$$\hat{f}^r_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{j=0}^{K-1} c_{rj} f_{i-r+j}$$

Approximation WENO

À ce stade on dispose, pour une cellule I_i donnée, de plusieurs reconstructions $f^r_{i+\frac{1}{2}}$ dépendant du choix du stencil $S_r(i)$. La stratégie WENO consiste à utiliser toutes les reconstructions possibles pour former l'approximation finale $f_{i+\frac{1}{2}}$:

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{K-1} \omega_r f^r_{i+\frac{1}{2}}$$

avec

$$\omega_r \geq 0 \qquad \text{et} \qquad \sum_{r=0}^{K-1} \omega_r = 1$$

En pratique les poids barycentriques ω_r sont choisis de sorte à minimiser l'influence des reconstructions obtenues sur un stencil contenant une discontinuité. Ainsi,

$$\omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{n=0}^{K-1} \alpha_n} \qquad \text{et} \qquad \alpha_r = \frac{d_r}{(\varepsilon + \beta_r)^2}$$

où β_r est une mesure de la raideur de la solution, ε une constante positive évitant une division par 0, et d_r les poids pour une reconstruction régulière sur tous les stencils telle que :

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{K-1} d_r f^r_{i+\frac{1}{2}} = f(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^{2K-1})$$

K	r=0	r=1	r=2	r=3	r=4	r=5
1	1					
2	2/3	1/3				
3	3/10	3/5	1/10			
4	4/35	18/35	12/35	1/35		
5	5/126	40/126	60/126	20/126	1/126	
6	1/77	25/154	100/231	25/77	5/77	1/462

TAB. 3.2: Coefficients d_r pour k=1 à 6.

Les valeurs de d_r pour K variant de 1 à 6 sont données dans le tableau 3.2. De nombreux tests numériques ont conduit à la formulation suivante des β_r :

$$\beta_r(i) = \sum_{j=0}^{K-1} \sum_{l=j}^{K-1} \beta(l,j) f(i-K+j+1) f(i-K+l+1) \tag{3.2}$$

Le détail des indicateurs de raideur β_r avec les coefficients β, ainsi que les différents stencils disponibles pour la reconstruction sont donnés ci-dessous pour chaque valeur de K variant de 1 à 6.

K=1
Le stencil pour la reconstruction est : $S_0 = (i)$.

$$\beta_0 = f_i f_i$$

K=2
Il y a deux stencils candidats à la reconstruction : $S_0 = (i, i+1) \quad S_1 = (i-1, i)$.

$$\begin{aligned} \beta_0 &= (f_{i+1} - f_i)^2 \\ \beta_1 &= (f_i - f_{i-1})^2 \end{aligned}$$

K=3
Les trois stencils disponibles sont : $S_0 = (i, i+1, i+2) \quad S_1 = (i-1, i, i+1) \quad S_2 = (i-2, i-1, i)$.

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{13}{12}(f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3f_i - 4f_{i+1} + f_{i+2})^2 \\ \beta_1 &= \frac{13}{12}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(f_{i-1} - f_{i+1})^2 \\ \beta_2 &= \frac{13}{12}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i)^2 + \frac{1}{4}(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)^2 \end{aligned}$$

K=4

On dispose de quatre stencils : $S_0 = (i, i+1, i+2, i+3)$ $S_1 = (i-1, i, i+1, i+2)$ $S_2 = (i-2, i-1, i, i+1)$ $S_3 = (i-3, i-2, i-1, i)$.

$$\begin{aligned}
\beta_0 &= 2107 f_i^2 - 9402 f_{i+1} f_i + 7042 f_{i+2} f_i - 1854 f_{i+3} f_i + 11003 f_{i+1}^2 - 17246 f_{i+2} f_{i+1} \\
&+ 4642 f_{i+3} f_{i+1} + 7043 f_{i+2}^2 - 3882 f_{i+3} f_{i+2} + 547 f_{i+3}^2 \\
\beta_1 &= 547 f_{i-1}^2 - 2522 f_i f_{i-1} + 1922 f_{i+1} f_{i-1} - 494 f_{i+2} f_{i-1} + 3443 f_i^2 - 5966 f_{i+1} f_i \\
&+ 1602 f_{i+2} f_i + 2843 f_{i+1}^2 - 1642 f_{i+2} f_{i+1} + 267 f_{i+2}^2 \\
\beta_2 &= 267 f_{i-2}^2 - 1642 f_{i-1} f_{i-2} + 1602 f_i f_{i-2} - 494 f_{i+1} f_{i-2} + 2843 f_{i-1}^2 - 5966 f_i f_{i-1} \\
&+ 1922 f_{i+1} f_{i-1} + 3443 f_i^2 - 2522 f_{i+1} f_i + 547 f_{i+1}^2 \\
\beta_3 &= 547 f_{i-3}^2 - 3882 f_{i-2} f_{i-3} + 4642 f_{i-1} f_{i-3} - 1854 f_i f_{i-3} + 7043 f_{i-2}^2 - 17246 f_{i-1} f_{i-2} \\
&+ 7042 f_i f_{i-2} + 11003 f_{i-1}^2 - 9402 f_i f_{i-1} + 2107 f_i^2
\end{aligned}$$

K=5

On dispose de cinq stencils : $S_0 = (i, i+1, i+2, i+3, i+4)$ $S_1 = (i-1, i, i+1, i+2, i+3)$ $S_2 = (i-2, i-1, i, i+1, i+2)$ $S_3 = (i-3, i-2, i-1, i, i+1)$ $S_4 = (i-4, i-3, i-2, i-1, i)$.

$$\begin{aligned}
\beta_0 &= 107918 f_i^2 - 649501 f_{i+1} f_i + 758823 f_{i+2} f_i - 411487 f_{i+3} f_i + 86329 f_{i+4} f_i \\
&+ 1020563 f_{i+1}^2 - 2462076 f_{i+2} f_{i+1} + 1358458 f_{i+3} f_{i+1} - 288007 f_{i+4} f_{i+1} + 1521393 f_{i+2}^2 \\
&- 1704396 f_{i+3} f_{i+2} + 364863 f_{i+4} f_{i+2} + 482963 f_{i+3}^2 - 208501 f_{i+4} f_{i+3} + 22658 f_{i+4}^2 \\
\beta_1 &= 22658 f_{i-1}^2 - 140251 f_i f_{i-1} + 165153 f_{i+1} f_{i-1} - 88297 f_{i+2} f_{i-1} + 18079 f_{i+3} f_{i-1} \\
&+ 242723 f_i^2 - 611976 f_{i+1} f_i + 337018 f_{i+2} f_i - 70237 f_{i+3} f_i + 406293 f_{i+1}^2 \\
&- 464976 f_{i+2} f_{i+1} + 99213 f_{i+3} f_{i+1} + 138563 f_{i+2}^2 - 60871 f_{i+2} f_{i+3} + 6908 f_{i+3}^2 \\
\beta_2 &= 6908 f_{i-2}^2 - 51001 f_{i-1} f_{i-2} + 67923 f_i f_{i-2} - 38947 f_{i+1} f_{i-2} + 8209 f_{i+2} f_{i-2} \\
&+ 104963 f_{i-1}^2 - 299076 f_i f_{i-1} + 179098 f_{i+1} f_{i-1} - 38947 f_{i+2} f_{i-1} + 231153 f_i^2 \\
&- 299076 f_{i+1} f_i + 67923 f_{i+2} f_i + 104963 f_{i+1}^2 - 51001 f_{i+2} f_{i+1} + 6908 f_{i+2} \\
\beta_3 &= 6908 f_{i-3}^2 - 60871 f_{i-2} f_{i-3} + 99213 f_{i-1} f_{i-3} - 70237 f_i f_{i-3} + 18079 f_{i+1} f_{i-3} \\
&+ 138563 f_{i-2}^2 - 464976 f_{i-1} f_{i-2} + 337018 f_i f_{i-2} - 88297 f_{i+1} f_{i-2} + 406293 f_{i-1}^2 \\
&- 611976 f_i f_{i-1} + 165153 f_{i+1} f_{i-1} + 242723 f_i^2 - 140251 f_{i+1} f_i + 22658 f_{i+1}^2 \\
\beta_4 &= 22658 f_{i-4}^2 - 208501 f_{i-3} f_{i-4} + 364863 f_{i-2} f_{i-4} - 288007 f_{i-1} f_{i-4} + 86329 f_i f_{i-4} \\
&+ 482963 f_{i-3}^2 - 1704396 f_{i-2} f_{i-3} + 1358458 f_{i-1} f_{i-3} - 411487 f_i f_{i-3} + 1521393 f_{i-2}^2 \\
&- 2462076 f_{i-1} f_{i-2} + 758823 f_i f_{i-2} + 1020563 f_{i-1}^2 - 649501 f_{i-1} f_i + 107918 f_i^2
\end{aligned}$$

K=6

On dispose de six stencils : $S_0 = (i, i+1, i+2, i+3, i+4, i+5)$ $S_1 = (i-1, i, i+1, i+2, i+3, i+4)$ $S_2 = (i-2, i-1, i, i+1, i+2, i+3)$ $S_3 = (i-3, i-2, i-1, i, i+1, i+2)$ $S_4 = (i-5, i-4, i-3, i-2, i-1, i)$ $S_5 = (i-4, i-3, i-2, i-1, i)$.

$$
\begin{aligned}
\beta_0 &= 6150211 f_i^2 - 47460464 f_{i+1} f_i + 76206736 f_{i+2} f_i - 63394124 f_{i+3} f_i + 27060170 f_{i+4} f_i \\
&- 4712740 f_{i+5} f_i + 94851237 f_{i+1}^2 - 311771244 f_{i+2} f_{i+1} + 262901672 f_{i+3} f_{i+1} - 113206788 f_{i+4} f_{i+1} \\
&+ 19834350 f_{i+5} f_{i+1} + 260445372 f_{i+2}^2 - 444003904 f_{i+3} f_{i+2} + 192596472 f_{i+4} f_{i+2} \\
&- 33918804 f_{i+5} f_{i+2} + 190757572 f_{i+3}^2 - 166461044 f_{i+4} f_{i+3} + 29442256 f_{i+5} f_{i+3} \\
&+ 36480687 f_{i+4}^2 - 12950184 f_{i+5} f_{i+4} + 1152561 f_{i+5}^2 \\
\beta_1 &= 1152561 f_{i-1}^2 - 9117992 f_i f_{i-1} + 14742480 f_{i+1} f_{i-1} - 12183636 f_{i+2} f_{i-1} + 5134574 f_{i+3} f_{i-1} \\
&- 880548 f_{i+4} f_{i-1} + 19365967 f_i^2 - 65224244 f_{i+1} f_i + 55053752 f_{i+2} f_i - 23510468 f_{i+3} f_i \\
&+ 4067018 f_{i+4} f_i + 56662212 f_{i+1}^2 - 97838784 f_{i+2} f_{i+1} + 42405032 f_{i+3} f_{i+1} - 7408908 f_{i+4} f_{i+1} \\
&+ 43093692 f_{i+2}^2 - 37913324 f_{i+3} f_{i+2} + 6694608 f_{i+4} f_{i+2} + 8449957 f_{i+3}^2 - 3015728 f_{i+4} f_{i+3} \\
&+ 271779 f_{i+4}^2 \\
\beta_2 &= 271779 f_{i-2}^2 - 2380800 f_{i-1} f_{i-2} + 4086352 f_i f_{i-2} - 3462252 f_{i+1} f_{i-2} + 1458762 f_{i+2} f_{i-2} \\
&- 245620 f_{i+3} f_{i-2} + 5653317 f_{i-1}^2 - 20427884 f_i f_{i-1} + 17905032 f_{i+1} f_{i-1} - 7727988 f_{i+2} f_{i-1} \\
&+ 1325006 f_{i+3} f_{i-1} + 19510972 f_i^2 - 35817664 f_{i+1} f_i + 15929912 f_{i+2} f_i - 2792660 f_{i+3} f_i \\
&+ 17195652 f_{i+1}^2 - 15880404 f_{i+2} f_{i+1} + 2863984 f_{i+3} f_{i+1} + 3824847 f_{i+2} - 1429976 f_{i+3} f_{i+2} \\
&+ 139633 f_{i+3}^2 \\
\beta_3 &= 139633 f_{i-3}^2 - 1429976 f_{i-2} f_{i-3} + 2863984 f_{i-1} f_{i-3} - 2792660 f_i f_{i-3} + 1325006 f_{i+1} f_{i-3} \\
&- 245620 f_{i+2} f_{i-3} + 3824847 f_{i-2}^2 - 15880404 f_{i-1} f_{i-2} + 15929912 f_i f_{i-2} - 7727988 f_{i+1} f_{i-2} \\
&+ 1458762 f_{i+2} f_{i-2} + 17195652 f_{i-1}^2 - 35817664 f_i f_{i-1} + 17905032 f_{i+1} f_{i-1} - 3462252 f_{i+2} f_{i-1} \\
&+ 19510972 f_i^2 - 20427884 f_{i+1} f_i + 4086352 f_{i+2} f_i + 5653317 f_{i+1}^2 - 2380800 f_{i+2} f_{i+1} \\
&+ 271779 f_{i+2}^2 \\
\beta_4 &= 271779 f_{i-4}^2 - 3015728 f_{i-3} f_{i-4} + 6694608 f_{i-2} f_{i-4} - 7408908 f_{i-1} f_{i-4} + 4067018 f_i f_{i-4} \\
&- 880548 f_{i+1} f_{i-4} + 8449957 f_{i-3}^2 - 37913324 f_{i-2} f_{i-3} + 42405032 f_{i-1} f_{i-3} - 23510468 f_i f_{i-3} \\
&+ 5134574 f_{i+1} f_{i-3} + 43093692 f_{i-2}^2 - 97838784 f_{i-1} f_{i-2} + 55053752 f_i f_{i-2} - 12183636 f_{i+1} f_{i-2} \\
&+ 56662212 f_{i-1}^2 - 65224244 f_i f_{i-1} + 14742480 f_{i+1} f_{i-1} + 19365967 f_i^2 - 9117992 f_{i+1} f_i \\
&+ 1152561 f_{i+1}^2 \\
\beta_5 &= 1152561 f_{i-5}^2 - 12950184 f_{i-4} f_{i-4} + 29442256 f_{i-3} f_{i-4} - 33918804 f_{i-2} f_{i-4} \\
&+ 19834350 f_{i-1} f_{i-4} - 4712740 f_i f_{i-4} + 36480687 f_{i-4}^2 - 166461044 f_{i-3} f_{i-3} \\
&+ 192596472 f_{i-2} f_{i-3} - 113206788 f_{i-1} f_{i-3} + 27060170 f_i f_{i-3} + 190757572 f_{i-3}^2 \\
&- 444003904 f_{i-2} f_{i-2} + 262901672 f_{i-1} f_{i-2} - 63394124 f_i f_{i-2} + 260445372 f_{i-2}^2 \\
&- 311771244 f_{i-1} f_{i-1} + 76206736 f_i f_{i-1} + 94851237 f_{i-1}^2 - 47460464 f_i f_i + 6150211 f_i^2
\end{aligned}
$$

La méthode WENO permet d'obtenir au final une reconstruction d'ordre $2K-1$. On notera que les stencils utilisés sont décalés et applicables au cas où le vent souffle de la gauche vers la droite. Si le vent souffle dans l'autre sens, la procédure est modifiée de manière symétrique par rapport à $x_{i+\frac{1}{2}}$. Ainsi pour une cellule I_i donnée, on obtiendra les reconstructions à gauche et à droite.

Décomposition de flux

Pour s'assurer la stabilité de la méthode WENO, Shu [117] recommande d'utiliser des flux *upwind*. Ceci est réalisé en décomposant les flux f en deux parties :

$$f(u) = f^+(u) + f^-(u)$$

avec

$$\frac{df^+(u)}{du} \geq 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{df^-(u)}{du} \leq 0$$

La décomposition de Lax-Friedrichs est retenue pour sa simplicité, Shu indiquant que le choix du flux de base ayant une influence limitée sur les résultats :

$$f^{\pm}(u) = \frac{1}{2}(f(u) \pm \alpha u) \qquad \text{où} \quad \alpha = \underset{u}{max} \left|f'(u)\right|$$

À ce stade, il reste à appliquer la reconstruction WENO pour f^+ et f^-. Pour f^+ le vent souffle de la gauche vers la droite et inversement pour f^- le vent souffle de la droite vers la gauche. Le flux numérique final s'exprime simplement par :

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{f}^+_{i+\frac{1}{2}} + \hat{f}^-_{i+\frac{1}{2}}$$

La décomposition de flux de Lax-Friedrichs est une décomposition globale car α est évalué sur les valeurs de u dans tout le domaine. Il est également possible d'utiliser une version locale de cette méthode, en calculant α comme étant le maximum de $f'(u)$ sur la largeur du stencil local utilisé.

Système de loi de conservation hyperbolique

On s'intéresse maintenant au cas d'un système vectoriel hyperbolique de taille m :

$$\frac{\partial \vec{\tilde{U}}(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{\tilde{F}}}{\partial x} = \vec{0}$$

Il existe plusieurs manières de généraliser la méthode WENO aux systèmes. La plus simple consiste à appliquer directement la reconstruction composante par composante. Cependant, en pratique cette méthode s'avère limitée aux faibles ordres (2 ou 3), au-delà des signes d'oscillations peuvent apparaître. Shu propose de renforcer la robustesse du schéma en utilisant la décomposition caractéristique.
Pour cela, on diagonalise la matrice jacobienne $\widetilde{\mathbf{A}}$ comme indiquée dans la section 2.2.3 :

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \mathbf{R}\Lambda\mathbf{R}^{-1}$$

La reconstruction caractéristique au noeud $x_{i+\frac{1}{2}}$ peut se résumer de la manière suivante :

1. On calcule l'état moyen $\vec{\tilde{U}}_{i+\frac{1}{2}}$ par la relation élémentaire :

$$\vec{\tilde{U}}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(\vec{\tilde{U}}_i + \vec{\tilde{U}}_{i+1}\right)$$

2. On forme les matrices de passage $\mathbf{R}$ et $\mathbf{R}^{-1}$ au point $x_{i+\frac{1}{2}}$:

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\vec{\tilde{U}}_{i+\frac{1}{2}}) \qquad \mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^{-1}(\vec{\tilde{U}}_{i+\frac{1}{2}}) \qquad \Lambda = \Lambda(\vec{\tilde{U}}_{i+\frac{1}{2}})$$

3. Pour j dans un voisinage de i, on suppose que $\mathbf{R}$, $\mathbf{R}^{-1}$ et Λ sont constantes. On forme alors les vecteurs et flux caractéristiques :

$$\vec{W}_j = \mathbf{R}^{-1}\vec{\tilde{U}}_j \qquad \vec{g}_j = \mathbf{R}^{-1}\vec{f}(\vec{\tilde{U}}_j) \qquad \text{j dans un voisinage de i}$$

4. On effectue la reconstruction WENO scalaire sur chaque composante du nouveau système valable uniquement dans un voisinage de i :

$$\frac{\partial \vec{W}(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial x} = 0$$

5. On repasse ensuite dans la base de départ :

$$\vec{\hat{f}}^{\pm}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{R}\vec{\hat{g}}^{\pm}_{i+\frac{1}{2}}$$

et on forme le flux numérique :

$$\vec{\hat{f}}_{i+\frac{1}{2}} = \vec{\hat{f}}^{+}_{i+\frac{1}{2}} + \vec{\hat{f}}^{-}_{i+\frac{1}{2}}$$

3.2.2 Variantes

On présente dans cette section, les différentes reconstructions WENO envisageables lors de la résolution du système d'équations Euler multi-espèces.

Équations d'Euler : choix des matrices de passage

La méthode de résolution des systèmes d'équations par reconstruction WENO est maintenant appliquée à la part Euler des équations de Navier-Stokes (1.68)-(1.71). Ces équations sont résolues sous forme conservative. On les rappelle ici sous forme vectorielle :

$$\frac{\partial \vec{\tilde{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{\tilde{F}}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{\tilde{G}}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{\tilde{H}}}{\partial z} = \vec{\tilde{V}}$$

où $\vec{\tilde{U}}$ est le vecteur des variables conservatives, $\vec{\tilde{V}}$ est le vecteur des flux visqueux, $\vec{\tilde{F}}$, $\vec{\tilde{G}}$ et $\vec{\tilde{H}}$ sont les vecteurs flux dans les directions x, y et z :

$$\vec{\tilde{U}} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e_t \\ \rho Y_1 \\ \vdots \\ \rho Y_{N_{esp}-1} \end{bmatrix} \qquad \vec{\tilde{F}} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho e_t + p)u \\ \rho u Y_1 \\ \vdots \\ \rho u Y_{N_{esp}-1} \end{bmatrix} \qquad \vec{\tilde{G}} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho e_t + p)v \\ \rho v Y_1 \\ \vdots \\ \rho v Y_{N_{esp}-1} \end{bmatrix} \qquad \vec{\tilde{H}} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ (\rho e_t + p)w \\ \rho w Y_1 \\ \vdots \\ \rho w Y_{N_{esp}-1} \end{bmatrix}$$

Les vecteurs propres qui définissent les matrices de passage dans les bases caractéristiques R, R^{-1} (cf. § 2.2.3) sont obtenus par la résolution du système $(\widetilde{\mathbf{A}} - \lambda I)X = 0$ (où I est la matrice identité). Ils ne sont pas uniques et il n'existe aucune formulation unifiée pour ces matrices de passage dans la littérature. Les valeurs propres de $\widetilde{\mathbf{A}}$ sont $u - c$, u et $u + c$, la valeur propre u

apparaissant $N_{esp}+2$ fois lorsqu'on considère $N_{esp}-1$ espèces et $N_{esp}+3$ fois lorsqu'on considère les N_{esp} espèces. Nous avons développé deux jeux de matrices de vecteurs propres (matrices (1) et (2)). Les matrices (1) (explicitées en (3.3) et (3.4)) sont associées à la matrice diagonale $diag[u-c,u,u,u,u+c,u,\ldots,u]$ pour un vecteur $\vec{\tilde{U}}$ prenant en compte toutes les espèces. Les matrices (2) (données en annexe D) sont associées à la matrice diagonale $diag[u-c,u,\ldots,u,u+c]$ pour un vecteur $\vec{\tilde{U}}$ prenant en compte $N_{esp}-1$ espèces.

On teste l'influence de ces matrices de passage, ainsi que celles proposées par Deiterding [33] et par Fedkiw [44] à travers le test du tube à choc de Sod bi-espèce [121]. Ce problème de Riemann est en effet un test classique pour les codes destinés à capturer les discontinuités d'un écoulement. On résout le système Euler 1D avec les conditions initiales suivantes :

x	$x<0,5L_x$	$x>0,5L_x$
ρ	1	0,125
u	0	0
P	1	0,1
γ	1,4	1,4

TAB. 3.3: Données initiales du test des différentes formulations de matrices.

Les calculs ont été effectués avec le schéma WENO d'ordre 5 (K=3) sur un maillage de 200 points de grille. Le temps final est de 0,2 s.
Les champs de densité et de température sont tracés sur les figures 3.2 et 3.3. Ce cas test montre que les résultats ne sont pas indifférents à la nature des matrices de passage. Les formulations de Fedkiw et de Deiterding donnent des résultats similaires, de même que les formulations (1) et (2). Bien que les formulations de Fedkiw et de Deiterding donnent des résultats plus proches de la solution analytique, un zoom sur la discontinuité de contact met en évidence de légères oscillations. De ce fait, nous avons éliminé ces deux formulations de vecteurs propres. Les écarts entre les formulations (1) et (2) sont faibles, mais la formulation (1) donne des résultats légèrement meilleurs. De plus, cette formulation explicitée ci-dessous se réduit facilement au cas mono-espèce. Nous avons donc opté pour ces matrices.

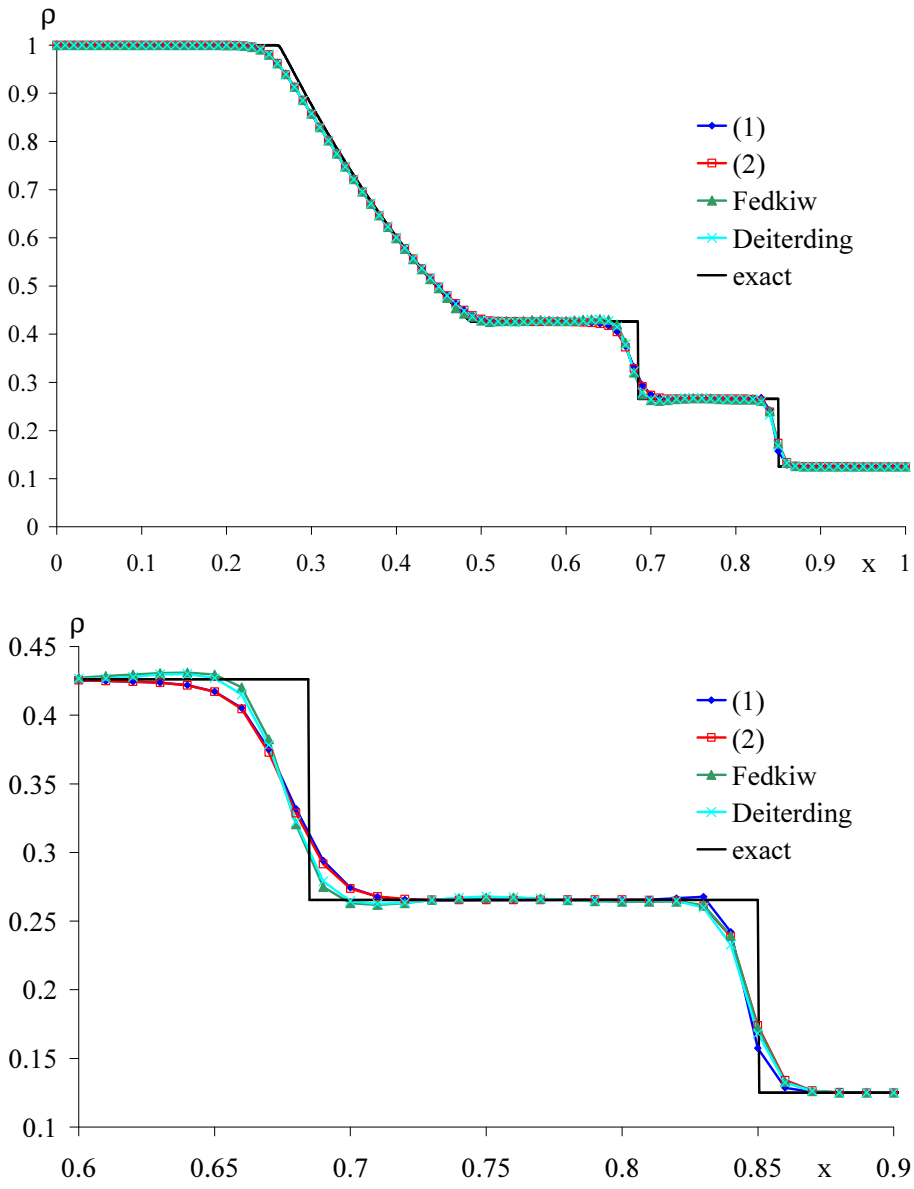


FIG. 3.2: Résultats du tube à choc bi-espèce de Sod. Densité.

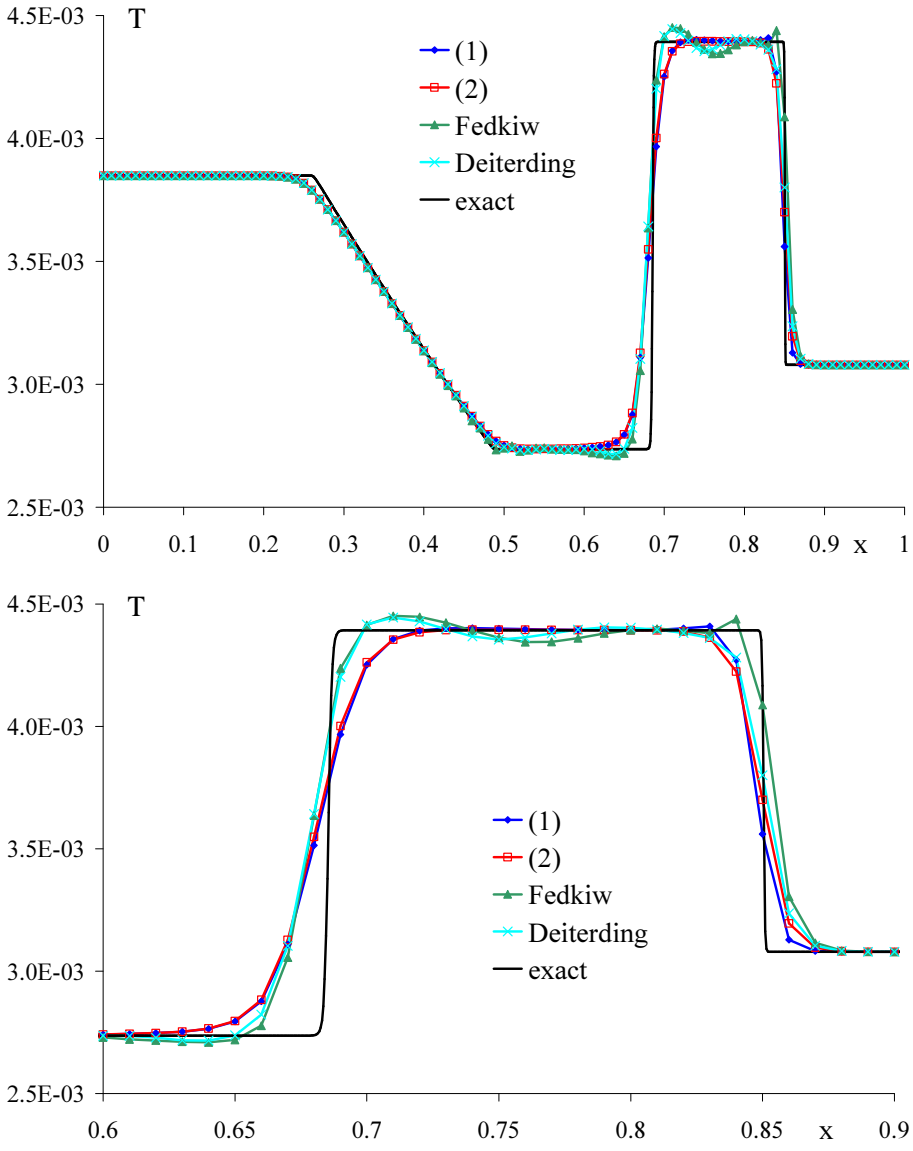


FIG. 3.3: Résultats du tube à choc bi-espèce de Sod. Température.

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix}
\rho & \rho & 0 & 0 & \rho & \rho\frac{r-r_1}{r} & \dots & \dots & \dots & \rho\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} \\
\rho(u-c) & \rho u & 0 & 0 & \rho(u+c) & \rho u\frac{r-r_1}{r} & \dots & \dots & \dots & \rho u\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} \\
\rho v & \rho v & \rho & 0 & \rho v & \rho v\frac{r-r_1}{r} & \dots & \dots & \dots & \rho v\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} \\
\rho w & \rho w & 0 & \rho & \rho w & \rho w\frac{r-r_1}{r} & \dots & \dots & \dots & \rho w\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} \\
\rho e_t + P - \rho uc & \rho e_t - \frac{P}{\gamma-1} & \rho v & \rho w & \rho e_t + P + \rho uc & \rho e_t\frac{r-r_1}{r} + \rho(\epsilon_1 - \epsilon) & \dots & \dots & \dots & \rho e_t\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} + \rho(\epsilon_{N_{esp}} - \epsilon) \\
\rho Y_1 & \rho Y_1 & 0 & 0 & \rho Y_1 & \rho Y_1\frac{r-r_1}{r} + \rho & \rho Y_1\frac{r-r_2}{r} & \dots & \dots & \rho Y_1\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} \\
\rho Y_2 & \rho Y_2 & 0 & 0 & \rho Y_2 & \rho Y_2\frac{r-r_1}{r} & \ddots & \ddots & & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\
\rho Y_{N_{esp}} & \rho Y_{N_{esp}} & 0 & 0 & \rho Y_{N_{esp}} & \rho Y_{N_{esp}}\frac{r-r_1}{r} & \dots & \dots & \rho Y_{N_{esp}}\frac{r-r_{N_{esp}-1}}{r} & \rho Y_{N_{esp}}\frac{r-r_{N_{esp}}}{r} + \rho
\end{pmatrix} \tag{3.3}$$

et

$$\mathbf{R}^{-1} = \begin{pmatrix}
\frac{c^2+\gamma uc+\gamma(\gamma-1)(K-\epsilon)}{2\gamma\rho c^2} & -\frac{(\gamma-1)u-c}{2\rho c^2} & -\frac{(\gamma-1)v}{2\rho c^2} & -\frac{(\gamma-1)w}{2\rho c^2} & \frac{\gamma-1}{2\rho c^2} & \frac{(\gamma-1)(\epsilon-\epsilon_1)+(r_1-r)T}{2\rho c^2} & \dots & \dots & \frac{(\gamma-1)(\epsilon-\epsilon_{N_{esp}})+(r_{N_{esp}}-r)T}{2\rho c^2} \\
\frac{\gamma-1}{\gamma\rho c^2}(c^2-\gamma(K-\epsilon)) & \frac{(\gamma-1)u}{\rho c^2} & \frac{(\gamma-1)v}{\rho c^2} & \frac{(\gamma-1)w}{\rho c^2} & -\frac{\gamma-1}{\rho c^2} & (\gamma-1)\frac{(r_1-r)T-(\epsilon-\epsilon_1)}{\rho c^2} & \dots & \dots & (\gamma-1)\frac{(r_{N_{esp}}-r)T-(\epsilon-\epsilon_{N_{esp}})}{\rho c^2} \\
-\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
-\frac{w}{\rho} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
\frac{c^2-\gamma uc+\gamma(\gamma-1)(K-\epsilon)}{2\gamma\rho c^2} & -\frac{(\gamma-1)u+c}{2\rho c^2} & -\frac{(\gamma-1)v}{2\rho c^2} & -\frac{(\gamma-1)w}{2\rho c^2} & \frac{\gamma-1}{2\rho c^2} & \frac{(\gamma-1)(\epsilon-\epsilon_1)+(r_1-r)T}{2\rho c^2} & \dots & \dots & \frac{(\gamma-1)(\epsilon-\epsilon_{N_{esp}})+(r_{N_{esp}}-r)T}{2\rho c^2} \\
-\frac{Y_1}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & \dots & 0 \\
-\frac{Y_2}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & \dots & 0 \\
\vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \ddots & 0 \\
-\frac{Y_{N_{esp}}}{\rho} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{1}{\rho}
\end{pmatrix} \tag{3.4}$$

avec

1. $K = \frac{1}{2} u_i u_i$
2. $\epsilon_\alpha = h_\alpha - r_\alpha T$
3. $\epsilon = \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} h_\alpha Y_\alpha - rT$

Problèmes spécifiques au cas multi-espèce

Comme évoqué dans l'introduction de ce chapitre, la simulation numérique d'écoulements multi-espèces pose certaines difficultés. Ceci nous concerne particulièrement puisque nous nous intéressons à la simulation d'écoulements réactifs faisant intervenir un grand nombre d'espèces chimiques. Les difficultés que l'on rencontre sont, entre autres, le respect du principe du maximum et l'apparition d'oscillations de pression à proximité de discontinuités de contact. Ces difficultés sont liées à la résolution des équations de Navier-Stokes sous forme conservative. Elles ont fait l'objet de nombreuses publications ces dernières années [1, 70, 72, 74, 83]. On ne traitera pas la deuxième difficulté concernant l'émergence d'oscillations de pression près des discontinuités de contact espérant des effets moindres sur nos résultats.

Idée de Larrouturou

Dans le code WENO, les fractions massiques sont évaluées au point i comme étant le rapport de deux variables conservatives :

$$Y_{\alpha,i} = \frac{(\rho Y_\alpha)_i}{\rho_i} \quad \alpha = 1, ..., N_{esp-1}$$

En pratique, du fait du schéma numérique employé, les fractions massiques obtenues ne respectent pas le principe du maximum discret *i.e.* l'inégalité $0 \leq Y_\alpha \leq 1$.
Pour pallier ce problème, Larrouturou propose dans [83] d'utiliser un flux pour les espèces directement lié au flux de masse. Notons $f^\rho_{i+1/2}$ le flux de masse et $f^\alpha_{i+1/2}$ le flux de l'espèce α. Ils sont alors reliés par :

$$f^\alpha_{i+1/2} = f^\rho_{i+1/2} \times \begin{cases} Y_{\alpha,i} & \text{si} \quad f^\rho_{i+1/2} > 0 \\ Y_{\alpha,i+1} & \text{si} \quad f^\rho_{i+1/2} < 0 \end{cases} \tag{3.5}$$

Cette modification du flux numérique permet de garantir le principe du maximum sous une condition de type CFL.

Application à la formulation WENO

La méthode proposée par Larrouturou est à l'ordre 1 en espace. Pour éviter de perdre en précision, on n'utilise non plus les valeurs de $Y_{\alpha,i}$ et de $Y_{\alpha,i+1}$ mais les valeurs de $Y_{\alpha,i+1/2}$ calculées à gauche et à droite de l'interface suivant le signe du vent. L'application de cette méthode au formalisme WENO revient donc à évaluer $Y_{\alpha,i+1/2}$ au même ordre que le schéma utilisé pour évaluer les flux des variables hydrodynamiques et s'assurer que $\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} Y_{\alpha,i+1/2} = 1$. Cette dernière condition est essentielle et accomplie en choisissant le même poids non-linéaire pour toutes les espèces. Pour cela, on évalue les poids de la reconstruction WENO pour chaque espèce, puis on impose une valeur commune de poids à toutes les espèces, correspondant au maximum du poids des espèces. En outre, nous appliquons des limitations aux valeurs interpolées $Y_{\alpha,i+1/2}$ pour éviter la création de nouveaux extrema.

Cette méthode peut être appliquée à une procédure de résolution directe ou caractéristique. On dispose ainsi de plusieurs reconstructions WENO possibles : reconstruction caractéristique pour toutes les variables, reconstruction caractéristique pour les variables hydrodynamiques et méthode Larrouturou pour les espèces, reconstruction directe pour toutes les espèces, reconstruction directe pour les variables hydrodynamiques et méthode Larrouturou pour les espèces. Une autre possibilité consiste à traiter séparément les équations pour les variables hydrodynamiques et celles pour les espèces. Cette méthode a par exemple été utilisée dans [59]. On n'utilise alors que la partie des matrices de passages R et R^{-1} concernant les variables hydrodynamiques pour construire le flux qui leur est associé. Les fractions massiques, considérés comme des scalaires convectés, sont évaluées avec la méthode de Larrouturou.

3.2.3 Autres spécificités

Choix du paramètre ϵ

Comme le décrit Shu [117], le paramètre ϵ intervenant dans l'interpolation WENO est une valeur dimensionnée. La valeur de 10^{-6} qu'il propose est donc dépendante du problème considéré. Dans la mesure où le code WENO est dimensionné, il convient de normaliser le calcul des flux. Ce choix d'un adimensionnement permet d'opter pour des valeurs de ϵ aussi petites que l'on souhaite et ainsi de s'assurer que le résultat de la reconstruction WENO est correct quel que soit le niveau du signal d'entrée.
Sur un stencil local, on adimensionne les flux f^+ et f^- de la façon suivante :

$$f^{\pm} = f^{\pm}/f_{ref} \quad \text{avec} \quad f_{ref} = max(1, |f^{\pm}|)$$

Un cas test de tube à choc de SOD bi-espèce nous permet de mettre en évidence l'intérêt de cet adimensionnement. On réalise quatre simulations en faisant varier le paramètre ϵ selon les valeurs $\epsilon = 10^{-6}, 10^{-20}, 10^{-40}, 10^{-80}$. Les fractions massiques des deux espèces présentes dans le tube à choc sont tracées en échelle logarithmique sur la figure 3.4. On remarque que plus la valeur de ϵ est petite, moins il apparaît d'oscillations de fractions massiques lors de la résolution de ce cas. Pratiquement, on travaille avec des valeurs de $\epsilon = 10^{-80}$.

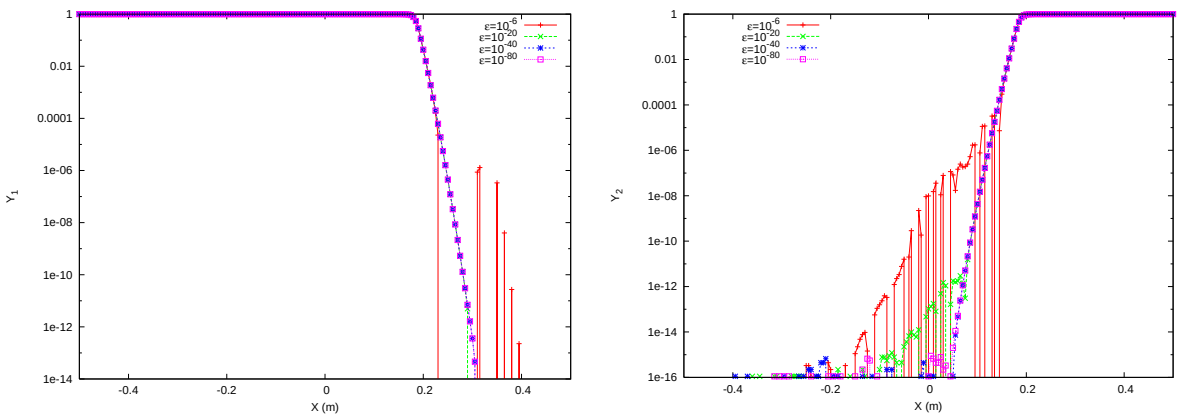


FIG. 3.4: Profil de fraction massique des espèces 1 et 2 à t=0.2s. $N_x = 200$.

Influence de D_{H0}

L'équation de conservation de l'énergie est résolue pour la variable conservative ρe_t. D'après (1.29), cette variable s'écrit :

$$\rho e_t = \rho \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \left(\Delta h^0_{f,\alpha} + \int_{T_0}^{T} Cp_\alpha(\theta) d\theta \right) Y_\alpha - P + \frac{1}{2}\rho u_i u_i \tag{3.6}$$

$$= \rho \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \left(\int_{0}^{T} Cp_\alpha(\theta) d\theta \right) Y_\alpha - P + \frac{1}{2}\rho u_i u_i + \rho D_{H0} \tag{3.7}$$

avec

$$\rho D_{H0} = \rho \sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} \left(\Delta h^0_{f,\alpha} - \int_{0}^{T_0} Cp_\alpha(\theta) d\theta \right) Y_\alpha$$

Lorsque D_{H0} est non nul (T_0 ou $\Delta h^0_{f,\alpha}$ non nuls), on a constaté que le schéma WENO donne des résultats moins bons que dans le cas où D_{H0} est nul du fait d'un niveau énergétique artificiellement augmenté d'une valeur de référence alors que l'on ne s'intéresse qu'à des variations autour de cette référence. Pour pallier ce problème, on retranche puis on ajoute ρD_{H0} à ρe_t à chaque pas de temps pour retrouver un niveau de référence convenable, niveau pour lequel le schéma WENO a été validé.

3.2.4 Calcul des termes sources

Les lois de conservation hyperboliques avec termes sources, présentent souvent des états d'équilibre pour lesquels les gradients des flux convectifs s'annulent exactement avec les termes sources. Beaucoup de méthodes numériques ont des difficultés à maintenir cet équilibre tout en évaluant précisément les petites perturbations autour de cet état. Un schéma ne pouvant pas gérer l'équilibre entre les flux convectifs et les termes sources pourra générer des oscillations non-physiques ou ne pas converger vers un état d'équilibre. Une technique pour éviter ces problèmes est d'intégrer les termes sources aux flux convectifs et d'appliquer le schéma numérique au calcul de ces nouveaux flux. Récemment, des schémas appelés *well-balanced* ont été développés pour pallier ces problèmes [54]. Ces schémas ont notamment été utilisés pour l'intégration des termes sources dans les équations d'hydrodynamique en eau peu profonde.

Pour des raisons de simplicité, les flux convectifs et les termes sources sont traités séparément dans le code WENO. Les flux convectifs sont évalués par reconstruction WENO alors que les termes sources (gravité, termes sources chimiques) sont considérés comme ponctuels. Cette approche donne des résultats comparables à ceux de la littérature et nous semble satisfaisante au premier ordre.

3.2.5 Évaluation de la température

La température est évaluée à partir de l'énergie totale e_t (1.29). On utilise pour cela une méthode itérative de Newton en résolvant l'équation $f(T) = 0$ où f est définie par :

$$f(T) = e_t - (\sum_{\alpha=1}^{N_{esp}} h_\alpha Y_\alpha - rT + \frac{1}{2}u_i u_i)$$

L'algorithme de Newton permet d'obtenir la température à l'itération $n+1$ à partir de la température évaluée à l'itération n :

$$T^{n+1} = T^n - \frac{f(T)}{f'(T)}$$

On considère que la méthode a convergé lorsque $\epsilon = |T^{n+1} - T^n| < 10^{-8}$. L'initialisation est effectuée avec la température évaluée au pas de temps précédent. La convergence est ainsi obtenue en deux à trois itérations. Une dichotomie est prévue en cas de non convergence de la méthode de Newton (au delà de 20 itérations).

3.3 Les différentes approches : nomenclature et coûts respectifs

On a vu que l'on pouvait procéder aux reconstructions directe, caractéristique totale ou partielle, en appliquant ou non la méthode de Larrouturou. On définit les différentes approches tentées de la façon suivante :

- #1 : reconstruction directe totale ;
- #2 : reconstruction directe totale et calcul des flux des espèces avec la méthode Larrouturou ;
- #3 : reconstruction caractéristique des variables hydrodynamiques seulement et calcul des flux des espèces avec la méthode Larrouturou ;
- #4 : reconstruction caractéristique totale ;
- #5 : reconstruction caractéristique totale et calcul des flux des espèces avec la méthode Larrouturou.

Afin de comparer le coût CPU respectif des différentes approches, on réalise des simulations 2D Navier-Stokes de résolution 100×100 avec les différents ordres du schéma WENO et les différentes reconstructions associées. On compare les temps d'exécution sur 100 pas de temps avec celui du schéma Compact sur le même cas test. On réalise cette simulation en réactif et non-réactif. Ces temps sont récapitulés sur la figure 3.5 pour les deux simulations. La courbe verte représente les temps d'exécution des schémas WENO d'ordre 3 à 11 avec la reconstruction #4. La courbe bleue a été obtenue avec un schéma WENO d'ordre 5 en faisant varier le type de reconstruction.
À résolution identique, pour le cas non-réactif, tous les schémas WENO associés à #4 coûtent de 1,7 à 3,6 fois plus chers que le schéma Compact, ce qui est tout à fait raisonnable. Ce rapport diminue dans le cas réactif, et le rapport des temps d'exécution pour les deux codes varie entre 1,2 et 2,4 fois. Avec un schéma d'ordre 5, il est possible d'obtenir des temps d'exécution inférieurs à celui du schéma Compact dans le cas réactif. On observe un rapport de deux entre les méthodes directes et caractéristiques. Logiquement, le calcul du flux des espèces avec la méthode Larrouturou engendre un léger surcoût. On verra à la section 3.7 dans quels cas ces surcoûts en valent la peine.

3.4 Modèle mathématique, mise en œuvre

3.4.1 Termes visqueux

Les dérivées des termes visqueux sont évaluées avec un schéma aux différences finies centré d'ordre 4 à l'intérieur du domaine et dégradé à l'ordre 2 aux frontières lorsque les conditions

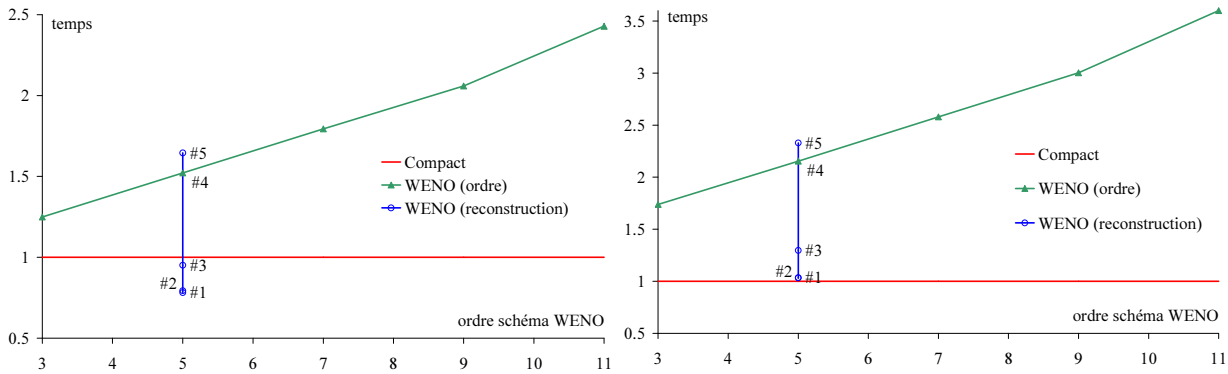


FIG. 3.5: Comparaison des temps d'exécution entre code Compact et WENO pour la simulation d'un écoulement réactif (gauche) et non-réactif (droite).

aux limites ne sont pas périodiques. L'implémentation de ces flux visqueux a été validée par des cas test élémentaires.

3.4.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites concernent les points aux frontières ainsi que les points fantômes (hors du domaine de calcul mais nécessaires pour appliquer la méthode WENO). Shu [117] conseille de conserver la formulation générale de la méthode WENO aux frontières et d'ajuster les valeurs des points fantômes suivant le type de frontière considéré. Dans la suite, on note (x,y) les coordonnées des variables dans le repère cartésien associé au maillage. Le code WENO gère quatre sortes de conditions aux limites :

– les conditions aux limites périodiques : les points fantômes sont reliés aux valeurs des noeuds du domaine de la façon suivante :

$$
\begin{array}{llll}
(\rho)_{-1,y} = (\rho)_{N-1,y} & (\rho)_{-2,y} = (\rho)_{N-2,y} & \dots & \\
(\rho u)_{-1,y} = (\rho u)_{N-1,y} & (\rho u)_{-2,y} = (\rho u)_{N-2,y} & \dots & \\
(\rho v)_{-1,y} = (\rho v)_{N-1,y} & (\rho v)_{-2,y} = (\rho v)_{N-2,y} & \dots & \\
(\rho w)_{-1,y} = (\rho w)_{N-1,y} & (\rho w)_{-2,y} = (\rho w)_{N-2,y} & \dots & \\
(\rho e_t)_{-1,y} = (\rho e_t)_{N-1,y} & (\rho e_t)_{-2,y} = (\rho e_t)_{N-2,y} & \dots & \\
(\rho Y_\alpha)_{-1,y} = (\rho Y_\alpha)_{N-1,y} & (\rho Y_\alpha)_{-2,y} = (\rho Y_\alpha)_{N-2,y} & \dots . & \alpha = 1, \dots, N_{esp} - 1
\end{array}
$$

– les conditions de symétrie : la vitesse perpendiculaire à la frontière est inversée. Pour une frontière de ce type en $x = 0$ on aura :

$$
\begin{array}{llll}
(\rho)_{-1,y} = (\rho)_{1,y} & (\rho)_{-2,y} = (\rho)_{2,y} & \dots & \\
(\rho u)_{-1,y} = -(\rho u)_{1,y} & (\rho u)_{-2,y} = -(\rho u)_{2,y} & \dots & \\
(\rho v)_{-1,y} = (\rho v)_{1,y} & (\rho v)_{-2,y} = (\rho v)_{2,y} & \dots & \\
(\rho w)_{-1,y} = (\rho w)_{1,y} & (\rho w)_{-2,y} = (\rho w)_{2,y} & \dots & \\
(\rho e_t)_{-1,y} = (\rho e_t)_{1,y} & (\rho e_t)_{-2,y} = (\rho e_t)_{2,y} & \dots & \\
(\rho Y_\alpha)_{-1,y} = (\rho Y_\alpha)_{1,y} & (\rho Y_\alpha)_{-2,y} = (\rho Y_\alpha)_{2,y} & \dots & \alpha = 1, \dots, N_{esp} - 1
\end{array}
$$

– les conditions de flux nuls : les points fantômes sont reliés aux points frontières du domaine. Ainsi, pour une frontière de ce type en $x = 0$ on aura :

$$\begin{array}{llll}
(\rho)_{-1,y} & =(\rho)_{0,y} & (\rho)_{-2,y} & =(\rho)_{0,y} \quad \dots \\
(\rho u)_{-1,y} & =(\rho u)_{0,y} & (\rho u)_{-2,y} & =(\rho u)_{0,y} \quad \dots \\
(\rho v)_{-1,y} & =(\rho v)_{0,y} & (\rho v)_{-2,y} & =(\rho v)_{0,y} \quad \dots \\
(\rho w)_{-1,y} & =(\rho w)_{0,y} & (\rho w)_{-2,y} & =(\rho w)_{0,y} \quad \dots \\
(\rho e_t)_{-1,y} & =(\rho e_t)_{0,y} & (\rho e_t)_{-2,y} & =(\rho e_t)_{0,y} \quad \dots \\
(\rho Y_\alpha)_{-1,y} & =(\rho Y_\alpha)_{0,y} & (\rho Y_\alpha)_{-2,y} & =(\rho Y_\alpha)_{0,y} \quad \dots \quad \alpha = 1, \dots, N_{esp} - 1
\end{array}$$

– les conditions NSCBC : on applique ces conditions aux points frontières en modifiant directement les flux Euler selon la méthode explicitée en (2.2.3). On n'impose pas de conditions additionnelles sur les termes visqueux. Les points fantômes sont calculés par extrapolation à l'ordre 0 des points frontières.

3.4.3 Intégration en temps

L'intégration en temps est réalisée avec une méthode Runge-Kutta TVD (*Total Variation Diminishing*) d'ordre 3 comme le suggère Shu [117] pour la résolution des équations différentielles de la forme :

$$\frac{d\vec{U}}{dt} = \vec{F}(\vec{U})$$

ce schéma en temps s'écrit :

$$\begin{aligned}
\vec{U}^{(1)} &= u^n + \Delta t \vec{F}(\vec{U}^n) \\
\vec{U}^{(2)} &= \frac{3}{4}\vec{U}^n + \frac{1}{4}\vec{U}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \vec{F}(\vec{U}^{(1)}) \\
\vec{U}^{n+1} &= \frac{1}{3}\vec{U}^n + \frac{2}{3}\vec{U}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \vec{F}(\vec{U}^{(2)})
\end{aligned}$$

Le pas de temps est variable et évalué régulièrement en fonction du nombre CFL. Les simulations, présentées dans la suite, ont été effectuées avec le schéma d'ordre 3.

3.5 Implémentation dans un code 2D

Comme pour le code de simulation numérique directe, on évoque dans cette section la structure retenue pour le code WENO. Le codage est également réalisé en fortran 90.
Le programme ne traite, pour l'instant, que des simulations en deux dimensions mais l'implémentation d'une direction supplémentaire est très simple compte tenu de la structure informatique du code.

3.5.1 Arbre programmatique

Les difficultés d'implémentation de la méthode étant bien plus importantes que pour le code Compact on a décidé de limiter le nombre de sous-programmes nécessaires à la résolution du problème. Pour cela, on utilise les symétries des flux selon x et y, au prix de quelques transpositions. Le principe de la méthode est représenté schématiquement en figure 3.6.

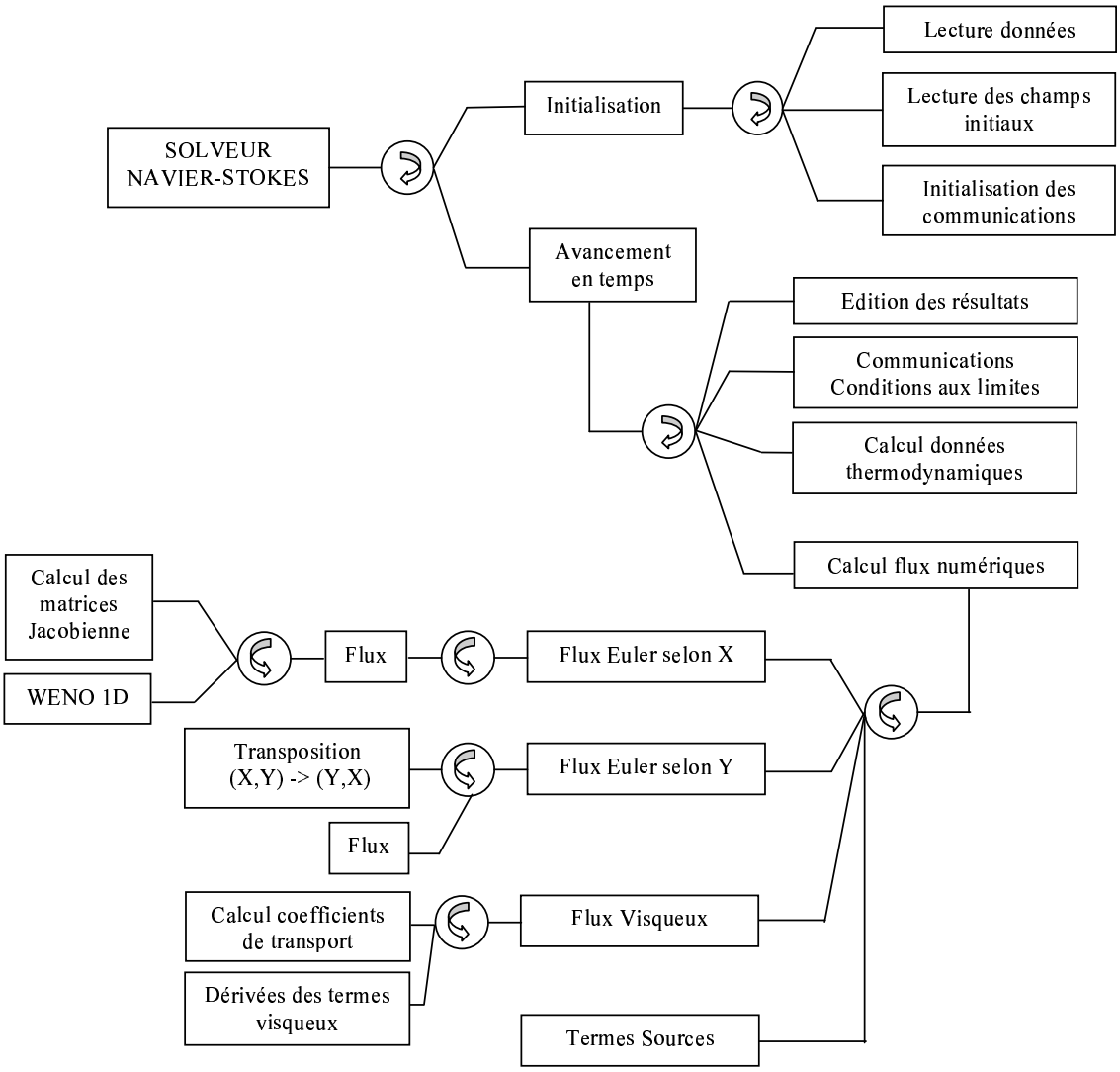


FIG. 3.6: Arbre programmatique simplifié du code WENO.

3.5.2 Optimisation

Optimisation scalaire

L'optimisation informatique du code a débuté par l'optimisation scalaire. Un effort d'écriture important a été consenti afin de respecter les règles classiques :

- accès contigus en mémoire,
- réutilisation des lignes de cache,
- *inlining* de certaines procédures au sein des boucles.

Parallélisation

La parallélisation du code WENO permet de réduire le temps de restitution de calcul et d'augmenter la mémoire disponible (ce qui est particulièrement intéressant pour les simulations tridimensionnelles). Contrairement au programme de DNS, nous avons choisi d'utiliser un pa-

rallélisme à partage de données (mode SIMD). Le principe de cette parallélisation est d'effectuer une exécution simultanée de séquences d'instructions indépendantes sur plusieurs processeurs. Chaque processeur disposant de sa propre mémoire, il est nécessaire de réaliser des synchronisations des calculs par échange de message. On a opté pour la technique de décomposition de domaine, d'une part pour la bonne « scalabilité » de la méthode WENO et d'autre part pour la portabilité sur cluster de PC. Les communications entre les processeurs se font par appel aux bibliothèques d'échange de message MPI [23] (*Message Passing Interface*).
Le découpage du domaine est unidimensionnel et effectué selon la direction y : le nombre de points de discrétisation selon cette direction est proportionnel au nombre de processeurs utilisé.

D'une manière générale, les performances d'un algorithme parallèle sont analysées *via* : le temps de restitution en fonction du nombre de processeurs, le speed up ou accélération et l'efficacité parallèle. Notons T_1 le temps de restitution du programme séquentiel et T_p le temps de restitution du programme parallèle sur p processeurs. On définit alors le speed up par :

$$\text{speed up} = \frac{T_1}{T_p}$$

et l'efficacité parallèle par :

$$\text{efficacité} = \frac{T_1}{p \times T_p}$$

Des simulations 2D de résolution 224×224 nous ont servi de cas test pour évaluer les performances du code WENO, obtenues sur le cluster de la fédération EPEE. Ce cluster Linux comporte 1 noeud maître et 8 noeuds bi-processeurs identiques dont les caractéristiques sont les suivantes :

- processeur AMD Opteron 64 bits (2,4 GHz)
- 2 Go de RAM DDR
- disque dur de 80 Go

Les noeuds communiquent à travers un réseau Gigabit Ethernet.
La figure 3.7 présente les évolutions du temps d'exécution, du speed up et de l'efficacité parallèle en fonction du nombre de processeurs. Le speed up linéaire correspond à une accélération croissante linéaire des performances en fonction du nombre de processeurs. L'efficacité parallèle représente alors le rapport du speed up effectif et du speed up linéaire. On remarque que le speed up effectif croît légèrement moins vite que la loi linéaire. Ceci est également visible sur la courbe d'efficacité parallèle. Ce phénomène est dû au temps de latence du réseau. Les performances du code WENO sont tout à fait satisfaisantes.

3.6 Analyse linéaire du pouvoir de résolution

L'analyse linéaire du schéma WENO est basée sur une extension originale du concept de nombre d'onde modifié au cas des méthodes non linéaires. Cette analyse donne une idée du pouvoir de résolution en 1D et de l'atténuation directionnelle anisotrope en 2D.

Classiquement, l'évaluation du nombre d'onde modifié, introduit en section 2.1.2, revient à examiner la réponse de l'opérateur de dérivation à une fréquence fixée. Pour une méthode linéaire (e.g. différences finies), cette réponse intervient à la même fréquence que le signal initial alors que pour une méthode non linéaire (e.g. WENO) d'autres fréquences peuvent apparaître.

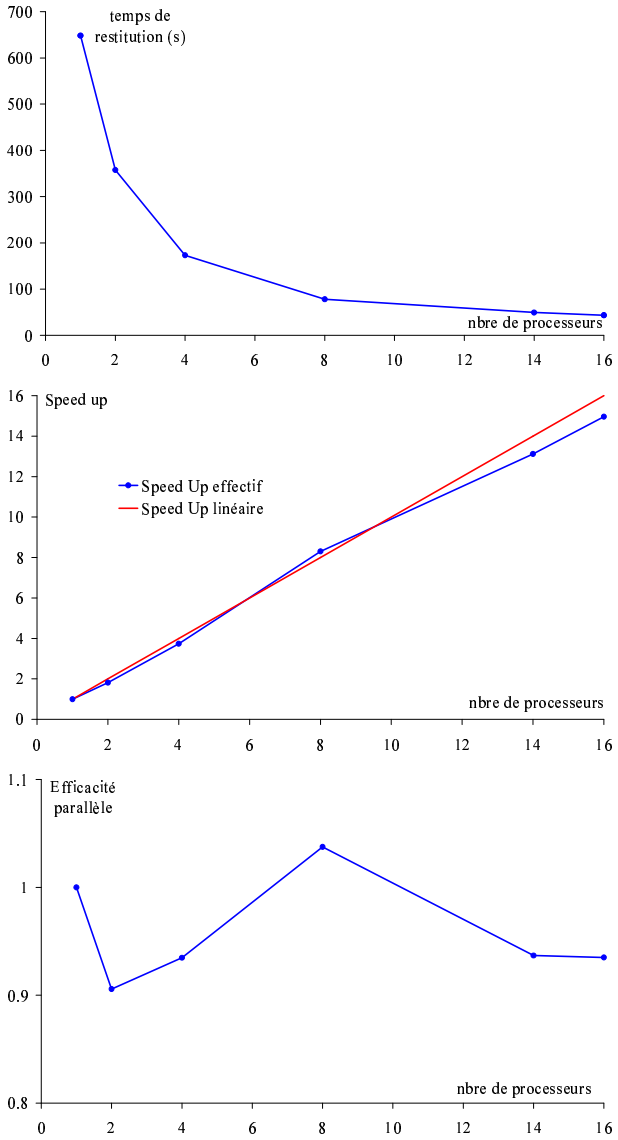


FIG. 3.7: Temps de restitution, speed up et efficacité parallèle du code WENO.

Analyse linéaire 1D

On évalue le nombre d'onde modifié pour les schémas WENO d'ordre 3 à 11. Pour cela, on examine la réponse de l'opérateur de dérivée à une seule fréquence. On ne considère pas les autres fréquences, d'amplitudes plus faibles, pouvant apparaître.

Pour un mode k donné, on s'intéresse à la dérivation de la fonction F_k :

$$F_k(x) = \widehat{F}_k e^{jkx} \tag{3.8}$$

dont la dérivée numérique sur un maillage uniforme de taille N avec des conditions aux limites périodiques s'écrit :

$$\frac{\delta F_k}{\delta x} = F'_k(x) = \sum_{n=-N/2}^{N/2} \widehat{F'_k}(n) e^{jnx}$$

ou encore à partir de (3.8) en introduisant le nombre d'onde modifié k'_k :

$$F'_k(x) = jk'_k \widehat{F}_k e^{jkx}$$

En séparant la contribution au mode k des autres modes, on écrit :

$$jk'_k \widehat{F}_k e^{jkx} = \widehat{F'_k}(k) e^{jkx} + \sum_{n=-N/2\ ;\ n\neq k}^{N/2} \widehat{F'_k}(n) e^{jnx} \tag{3.9}$$

où

$$k'_k = k'_L(k) + k'_{NL}(k) \tag{3.10}$$

$$= k'_L(k) - \sum_{n=-N/2\ ;\ n\neq k}^{N/2} j \frac{\widehat{F'_k}(n)}{\widehat{F}_k} e^{j(n-k)x} \tag{3.11}$$

$k'_L(k) = \frac{\widehat{F'_k}(k)}{j\widehat{F}_k}$ est le nombre d'onde modifié linéaire (seul terme présent pour une méthode linéaire). La partie réelle du nombre d'onde modifié $\mathcal{R}_e(k'_k)$ est associée à la vitesse de phase c'est à dire aux propriétés dispersives du schéma, tandis que la partie imaginaire $\mathcal{I}_m(k'_k)$ est reliée à la dissipation numérique. Celle-ci doit être négative pour que le schéma soit stable.

Les figures 3.8 à 3.11 représentent les parties réelle et imaginaire des nombres d'onde modifiés optimal et effectif en fonction de la pulsation ω (définie au § 2.1.2). Le nombre d'onde modifié optimal est obtenu en supposant un signal régulier (*i.e.* sans fort gradient) : les poids ω_r sont alors pris optimum pour une solution sans raideur ($\beta_r = 0$). Ces figures montrent une large différence entre les deux nombres d'onde modifiés. Les propriétés spectrales des schémas WENO sont relativement altérées avec la prise en compte des indicateurs de raideur β_r (atténuation des fréquences élevées plus importante pour les schémas WENO complets que pour les schémas WENO optimaux).
Globalement, on constate que l'atténuation des hautes fréquences est la principale source d'erreurs numériques de ces schémas WENO. Ce caractère de filtre passe-bas dépend de l'ordre du schéma puisque plus l'ordre est élevé, plus la plage de nombres d'onde résolue est grande. Les schémas WENO d'ordre 9 ($K = 5$) et 11 ($K = 6$) capturent correctement plus d'un tiers de la gamme de nombres d'onde. Néanmoins, cette analyse indique un possible comportement instable du schéma WENO d'ordre 11 ($K = 6$) pour les faibles nombres d'onde, où $\mathcal{I}_m(k'_k)>0$.
La figure 3.10 montre que localement, ces schémas WENO propagent des ondes à une vitesse de phase négative ($\omega = \pi$). Ceci est particulièrement accentué pour le schéma WENO d'ordre 1. De plus, on observe sur les figures 3.10 et 3.11 que du fait de la forme singulière du signal, les indicateurs de raideur de la procédure WENO sont mis en défaut pour $\omega = \pi/n$ (présence de pics).

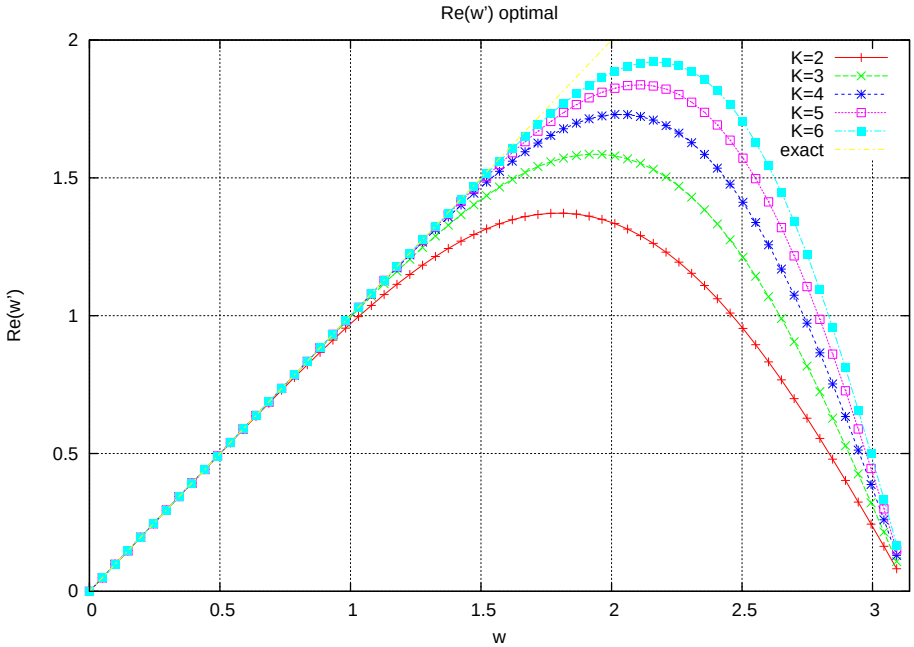


FIG. 3.8: Partie réelle du nombre d'onde modifié optimal des schémas WENO d'ordre 3 à 11.

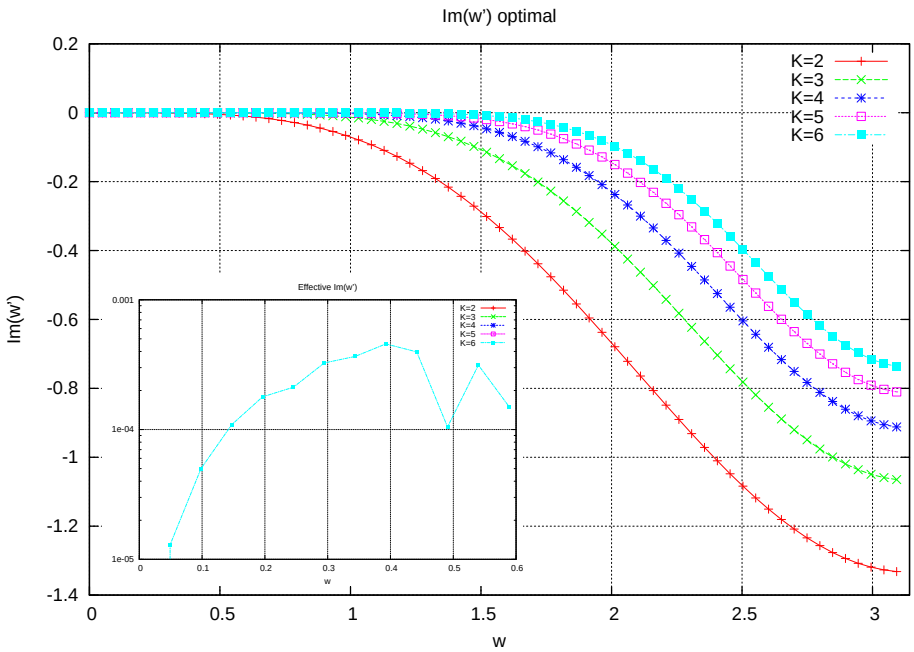


FIG. 3.9: Partie imaginaire du nombre d'onde modifié optimal des schémas WENO d'ordre 3 à 11.

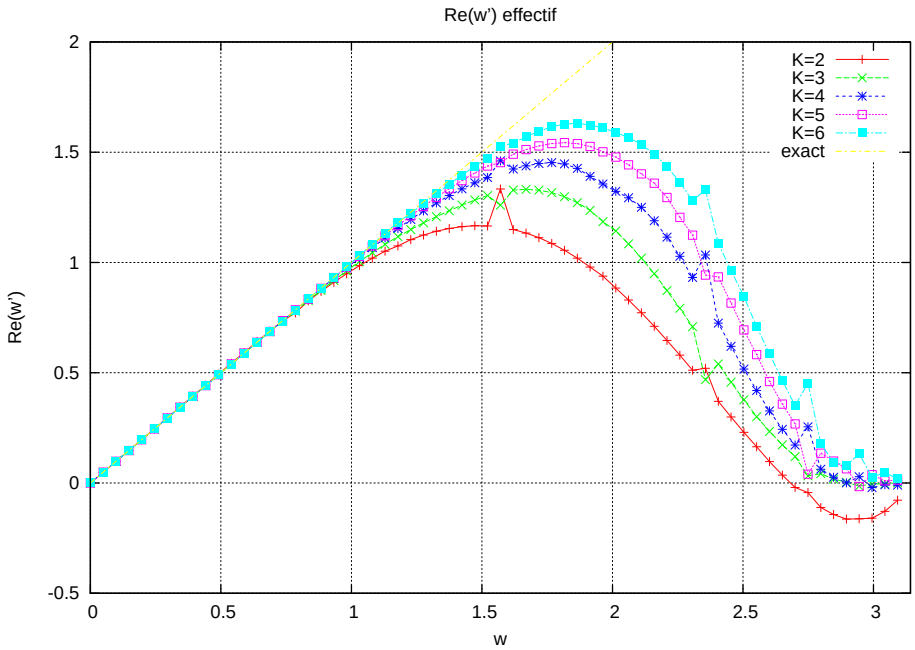


FIG. 3.10: Partie réelle du nombre d'onde modifié effectif des schémas WENO d'ordre 3 à 11.

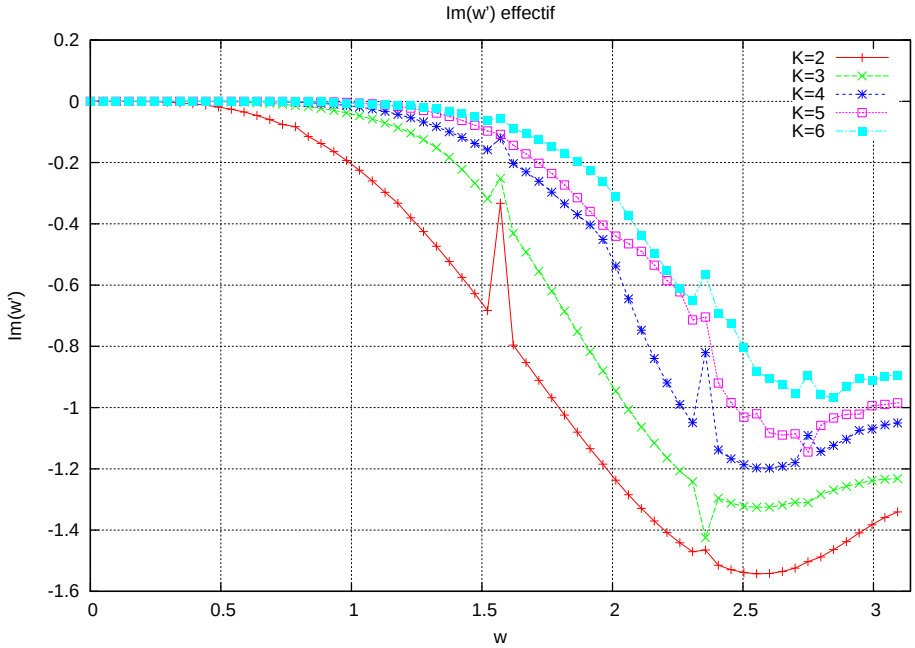


FIG. 3.11: Partie imaginaire du nombre d'onde modifié effectif des schémas WENO d'ordre 3 à 11.

Analyse linéaire 2D

Dans les problèmes multi-directionnels, l'erreur de phase des schémas numériques est anisotrope. Pour caractériser cet aspect, on considère une onde bidimensionnelle faisant un angle θ avec l'axe des x et se déplaçant à vitesse constante c (convection linéaire). La vitesse de phase linéaire modifiée effective s'écrit :

$$\frac{c'}{c} = \frac{\omega'(\omega cos\theta)cos\theta + \omega'(\omega sin\theta)sin\theta}{\omega}$$

Les figures 3.12 à 3.13 représentent la partie réelle $\mathcal{R}_e\left(\frac{c'}{c}\right)$ et la partie imaginaire $\mathcal{I}_m\left(\frac{c'}{c}\right)$ de la vitesse de phase en coordonnées polaires pour $\omega \in \left[\frac{\pi}{10}; \frac{2\pi}{10}; \ldots \frac{9\pi}{10}; \pi\right]$. La partie réelle de cette vitesse de phase donne une indication de l'anisotropie de phase. Les courbes en cercle correspondent à des ondes bien résolues, leur propagation est isotropique et leur vitesse de phase proche de l'unité. Les déviations par rapport au cercle indiquent une anisotropie pour un nombre d'onde donné, alors que la partie imaginaire donne une mesure de la variation de la dissipation numérique dans la direction θ. Plus cette valeur est importante, plus la dissipation est importante.

Ces figures mettent en évidence que tous les schémas WENO souffrent d'importantes erreurs d'anisotropie pour les hautes fréquences. Ceci peut laisser supposer des difficultés à simuler des géométries cylindriques ou sphériques sur un maillage cartésien. Les meilleurs résultats sont obtenus par le schéma d'ordre 9 (K=5) : il est à peu près trois fois plus précis que le schéma d'ordre 3 (K=2). Il faut donc trois fois moins de points de maillage dans chaque direction avec le schéma d'ordre 9 pour obtenir des résultats similaires à ceux obtenus avec le schéma d'ordre 3.

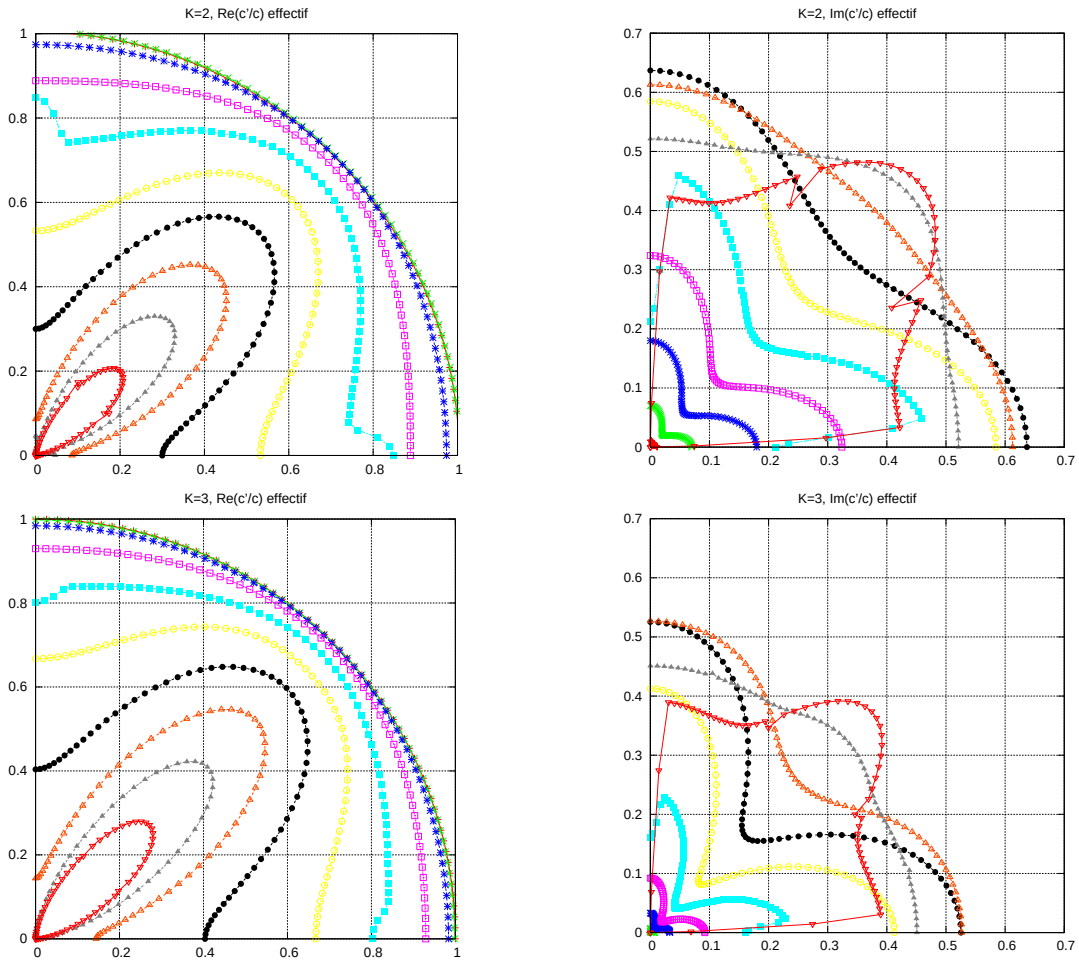


FIG. 3.12: Partie réelle et imaginaire de la vitesse de phase des schémas WENO d'ordre 3 et 5.

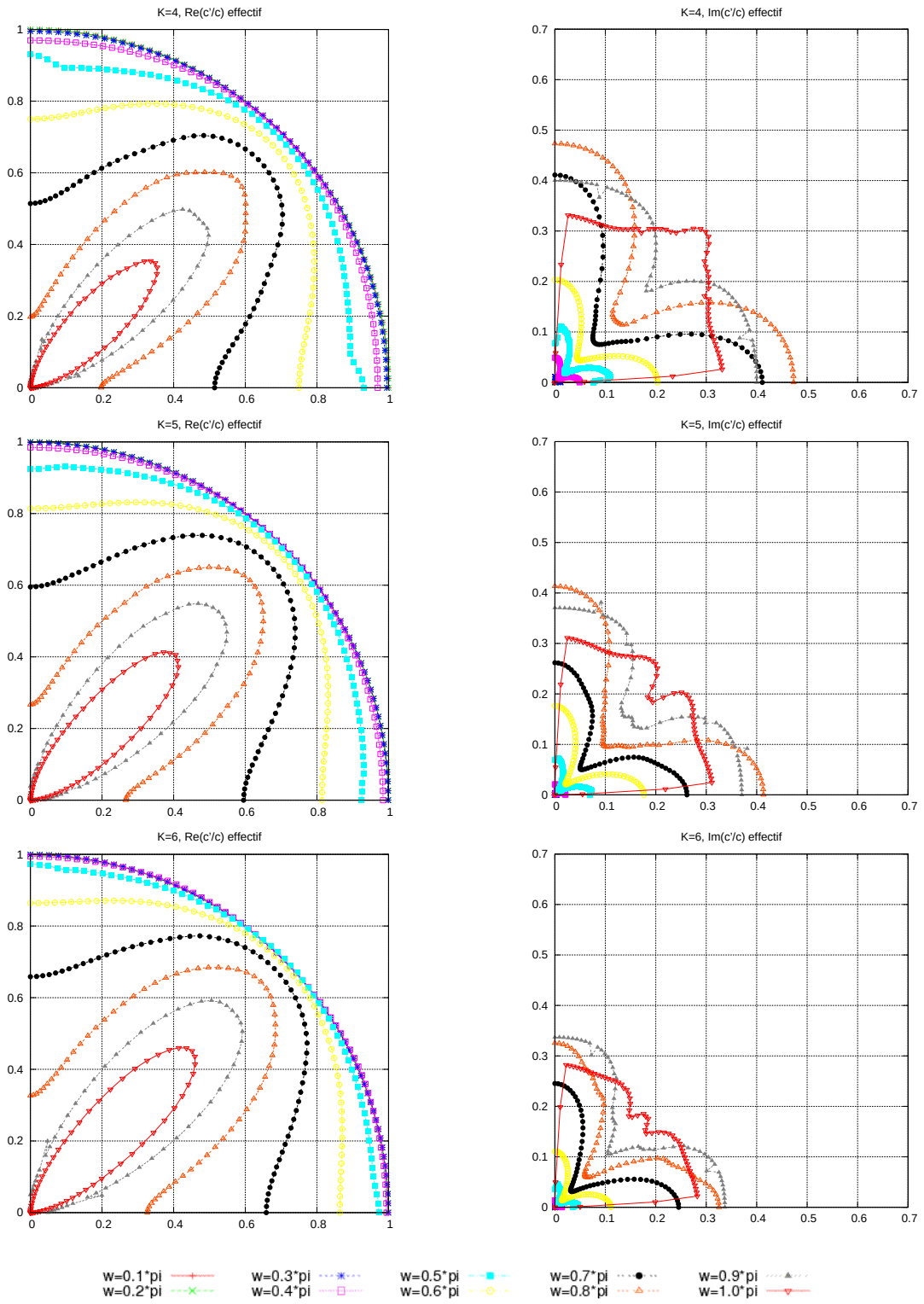


FIG. 3.13: Partie réelle et imaginaire de la vitesse de phase des schémas WENO d'ordre 7, 9 et 11.

3.7 Cas test numériques élémentaires

Dans cette section, on présente une série de cas test élémentaires pour les équations d'Euler en 1D et 2D. Ces tests nous permettent d'évaluer les comportements des schémas WENO d'ordre 3 à 11 ainsi que des différentes reconstructions proposées à travers des tests mono et multi-espèces. On teste également l'influence du maillage sur les résultats. Tous ces cas test ont été effectués avec la décomposition de flux de Lax-Friedrichs globale. Remarque : ces cas test académiques ne correspondent pas à des cas physiques, ils ont été créés pour tester les schémas numériques sur des problèmes spécifiques (capture de discontinuité de contact,...).

3.7.1 Tests 1D mono-espèces

Dans un premier temps, on s'intéresse à des simulations de tubes à choc mono-espèces. Sauf indication contraire, ces calculs ont été réalisés dans un domaine de longueur L_x=1 pour trois maillages : N_x=100, 500 et 2000 avec un nombre CFL de 0,3. Des conditions aux limites de type symétrie sont imposées. Le rapport des chaleurs spécifiques est considéré comme constant, soit $\gamma = 1,4$.
Pour chacun des cas test, on présente les résultats obtenus avec le schéma WENO d'ordre 5 pour les reconstructions #1 et #4 et pour les trois maillages. Ces résultats sont illustrés par les profils de densité ρ, de pression p, de vitesse u_x et de température T dans le domaine à t_{final}. Les solutions analytiques de ces problèmes de Riemann ne sont pas données, celles-ci étant très proches des résultats des simulations avec le maillage le plus raffiné. On présente également les résultats obtenus avec les schémas d'ordre 3 à 11 sur le maillage contenant N_x=500 points de grille pour les deux types de reconstruction (#1 et #4).

Test du tube à choc de Sod

Le premier test est le tube à choc de Sod [121]. La solution analytique de ce problème se compose en une onde de détente à gauche, une discontinuité de contact et un choc à droite. Les conditions initiales sont données dans le tableau 3.4. On observe les résultats au temps final t=0,2.

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1	0,125
u	0	0
p	1	0,1

Tab. 3.4: Données initiales du tube à choc de Sod.

On constate sur les figures 3.15 et 3.14 une nette différence entre les reconstructions #1 et #4. La reconstruction directe, moins chère en temps de calcul, est moins précise que la formulation caractéristique (principalement sur la résolution de la discontinuité de contact et du choc). On note des oscillations sur le profil de densité qui se traduisent par de fortes variations sur la température au niveau de la discontinuité de contact. Ces oscillations diminuent en amplitude mais augmentent en fréquence avec l'augmentation du nombre de points dans le maillage.
Les remarques effectuées précédemment sur le schéma WENO d'ordre 5 peuvent être réitérées pour les autres schémas WENO. Les oscillations s'accroissent particulièrement à partir de l'ordre 7. Les figures 3.16 et 3.17 mettent également en évidence l'augmentation de la précision avec

la montée en ordre du schéma. Comme prévu par l'analyse linéaire (§ 3.6), la simulation avec le schéma d'ordre 11 couplé à la reconstruction #4 présente des oscillations au niveau de la discontinuité de contact ce qui n'est pas le cas aux autres ordres. Le schéma d'ordre 9 couplé à la reconstruction #4 est optimal sur ce cas test.

Tests de Liska

Les neuf tests présentés dans cette section sont issus de l'article de Liska et Wendroff [89] : les tests 1, 2, 4, 5 et 6 ont été développés par Toro [128], le test 3a est une modification du test 3 de Toro, le test Noh est le problème classique Noh en 1D [100], le test du pic a été développé par Kucharik [80] et le dernier test est dû à de Woodward et Collela [135].

Test 1

Ce test de Toro est une variante du problème du tube à choc de SOD. Il diffère de celui-ci par l'existence d'un point sonique dans la zone de raréfaction. Ce test est intéressant pour vérifier que les solutions générées sont entropiques.

x	$x < 0,3L_x$	$x > 0,3L_x$
ρ	1	0,125
u	0,75	0
p	1	0,1

TAB. 3.5: Données initiales du test 1 de Liska.

Les figures 3.19 à 3.21 montrent les résultats du test 1 à t=0,2. Les constatations effectuées sur les résultats du tube à choc de Sod sont valables pour ce cas test. On note néanmoins des oscillations plus importantes au niveau de la discontinuité de contact pour la formulation #1 quel que soit l'ordre du schéma WENO. Le schéma d'ordre 5 donne des résultats moins bons sur ce cas test que sur le tube à choc de Sod classique. En conclusion, comme pour le tube à choc de Sod, c'est le schéma d'ordre 9 avec la reconstruction #4 qui donne les meilleurs résultats sur ce cas test.

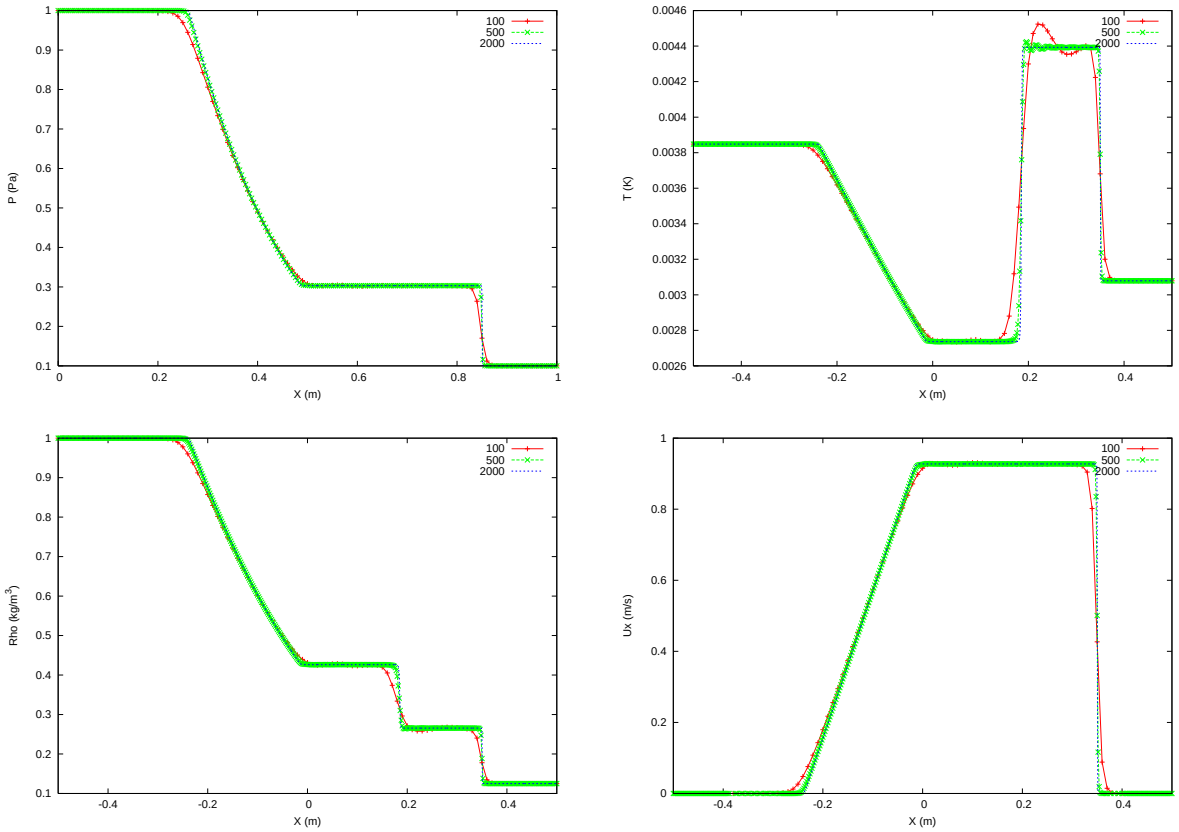


FIG. 3.14: Résultats du test du tube à choc de SOD (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

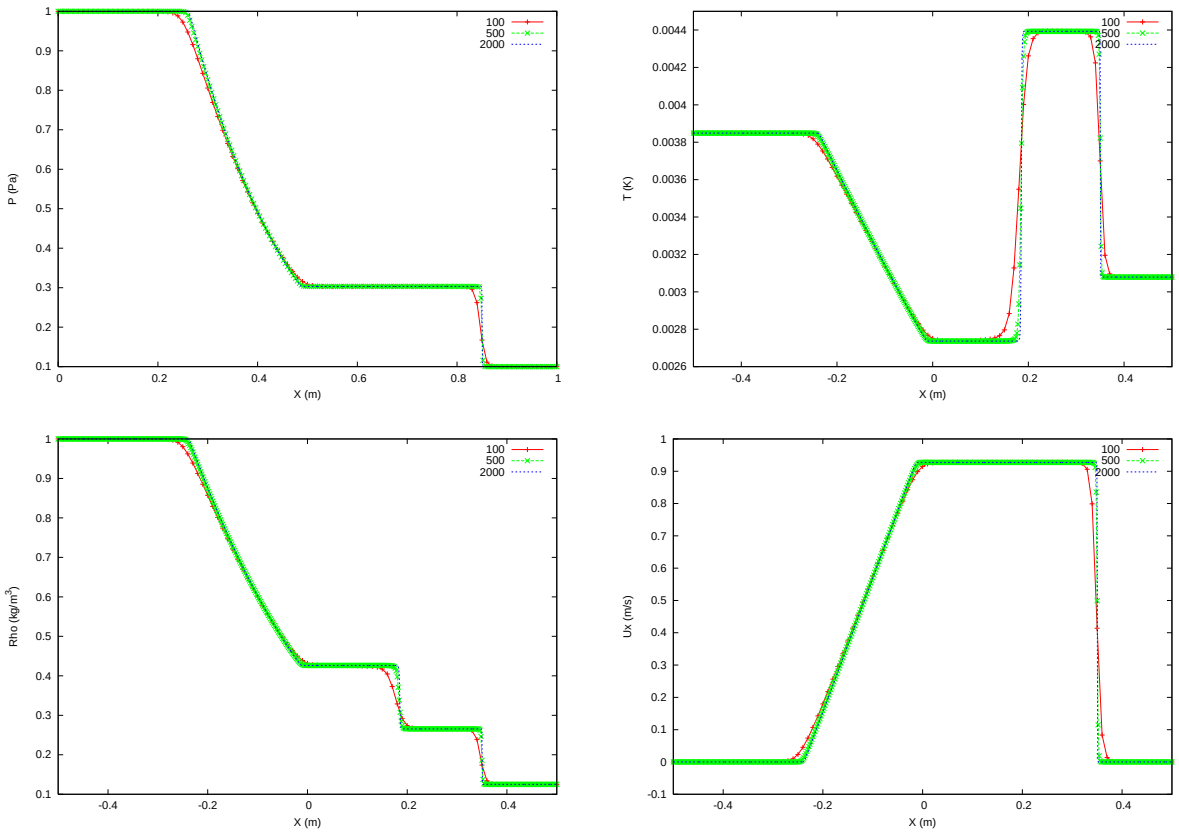


FIG. 3.15: Résultats du test du tube à choc de SOD (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

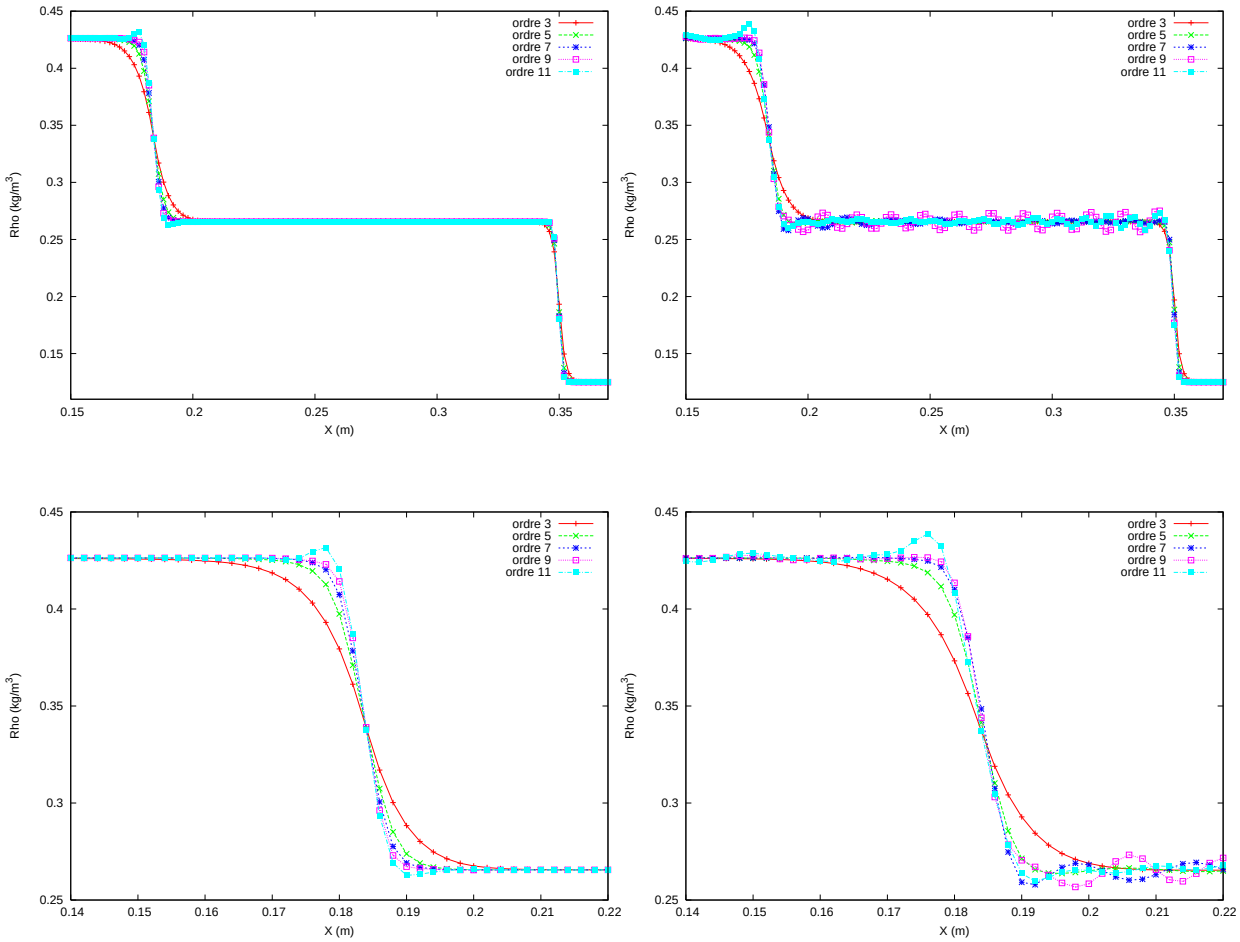


FIG. 3.16: Profil de densité du tube à choc de SOD à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

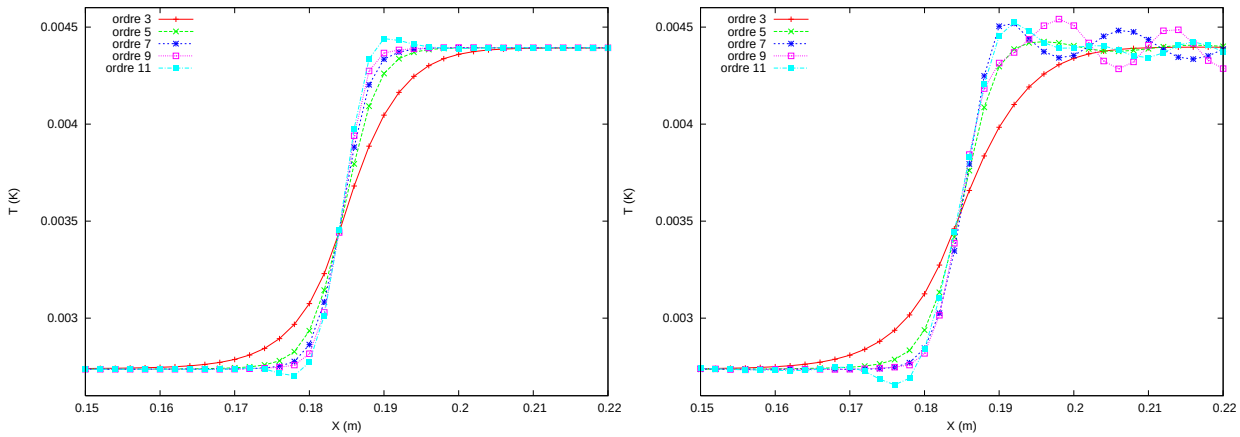


FIG. 3.17: Profil de température du tube à choc de SOD à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

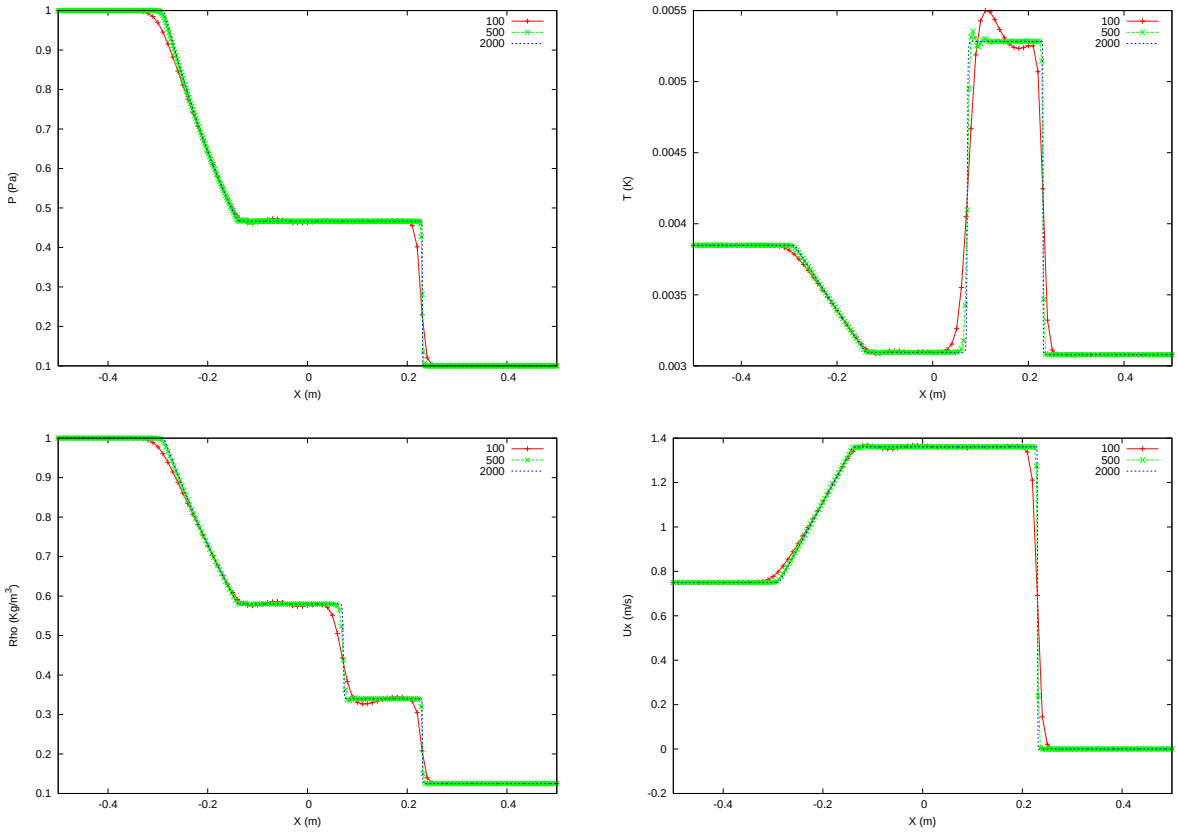


FIG. 3.18: Résultats du test 1 de Liska (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

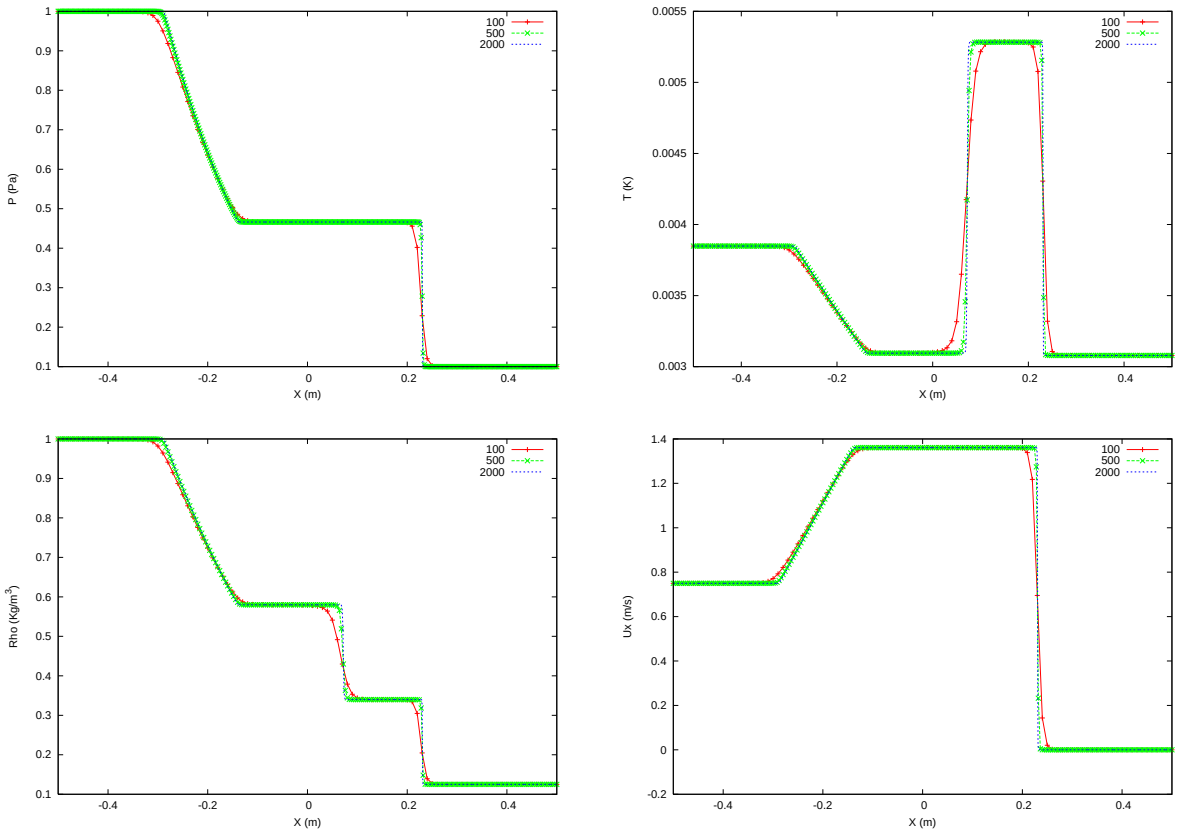


FIG. 3.19: Résultats du test 1 de Liska (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

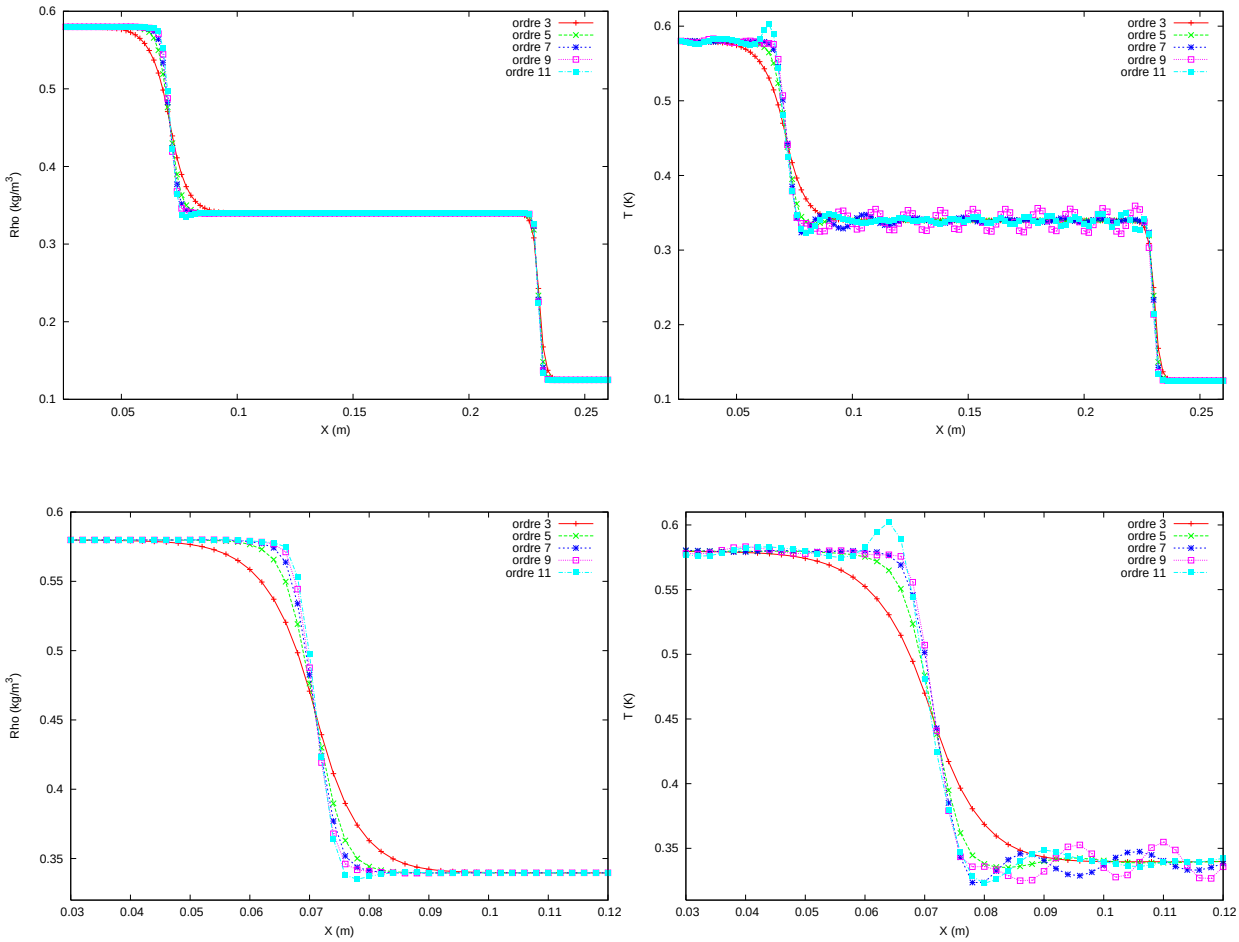


FIG. 3.20: Profil de densité du test 1 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

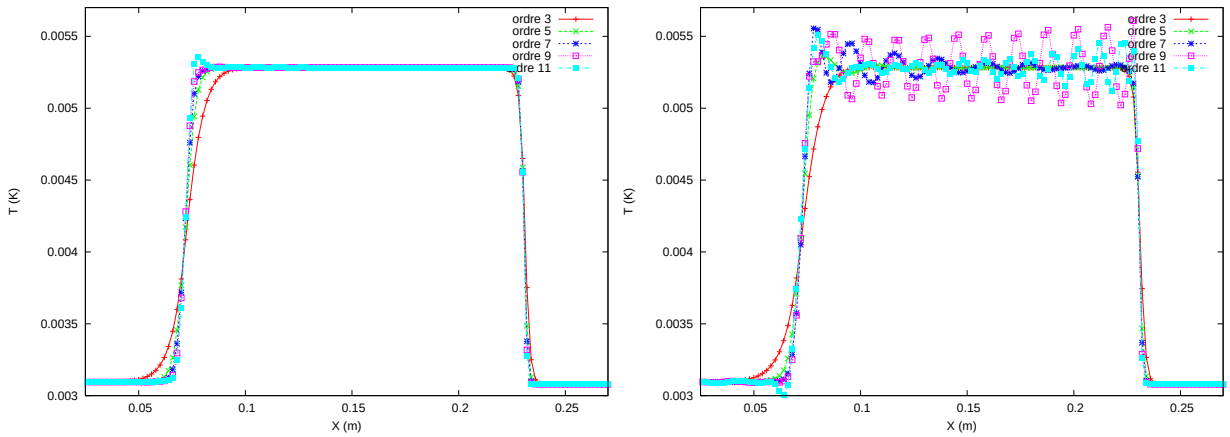


FIG. 3.21: Profil de température du test 1 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test 2

Ce problème de Riemann présente un état central proche du vide *i.e.* tel que la densité et la pression sont proches de zéro, alors que l'énergie interne ne l'est pas. La solution analytique du test 2 se compose de deux ondes de détente symétriques et d'une discontinuité de contact. Du fait de l'existence d'un état proche du vide au niveau de la région centrale, ce test est approprié pour évaluer les capacités d'une méthode numérique à résoudre des écoulements de faible densité. Les conditions initiales sont données dans le tableau suivant :

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1	1
u	-2	2
p	0,4	0,4

TAB. 3.6: Données initiales du test 2 de Liska.

Pour ce test, on observe les résultats à t=0,15. Les profils des figures 3.23 et 3.22 montrent que les ondes de détente sont bien résolues par le schéma WENO quand le maillage est suffisamment fin et ceci quelle que soit la reconstruction.
La pression et la densité au niveau de la discontinuité de contact sont plus faibles quand on utilise la reconstruction #4 (figure 3.25). Le point délicat de ce test est l'évaluation correcte du profil de température. Analytiquement, la température étant proportionnelle au rapport de la pression sur la densité (1.10), présente une indétermination en 0/0. Numériquement, on constate un pic qui s'atténue avec l'augmentation du nombre de points dans le maillage. La figure 3.24 met en évidence des différences de comportement assez importantes entre les deux approches #1 et #4 en fonction de l'ordre du schéma utilisé. Le schéma WENO d'ordre 3 donne quasiment les mêmes résultats avec les deux formulations. Pour les schémas d'ordre plus élevé, la hauteur du pic central de température est plus faible lors de l'utilisation de la reconstruction directe. Avec la reconstruction #4, la hauteur du pic de température décroît avec la montée en ordre (sauf pour le schéma d'ordre 3). La formulation directe engendre de petites oscillations au niveau de la discontinuité de contact.

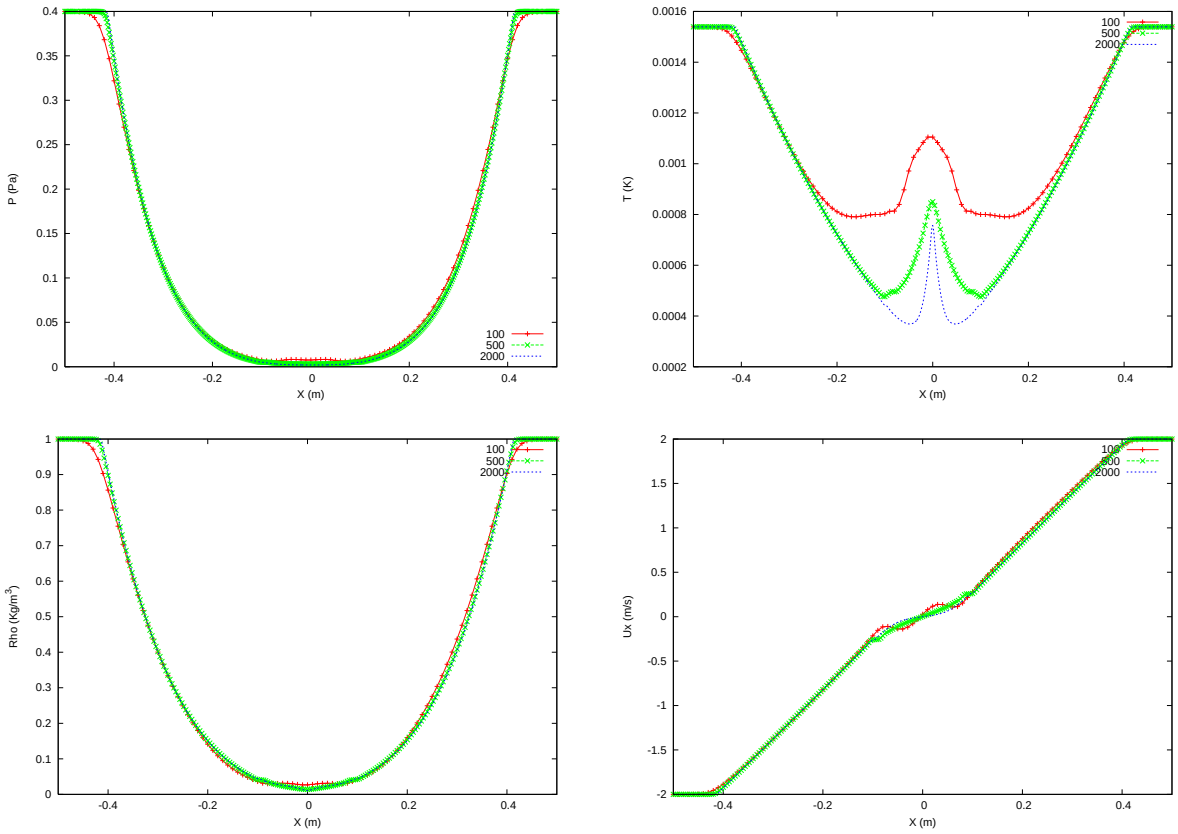


FIG. 3.22: Résultats du test 2 de Liska (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

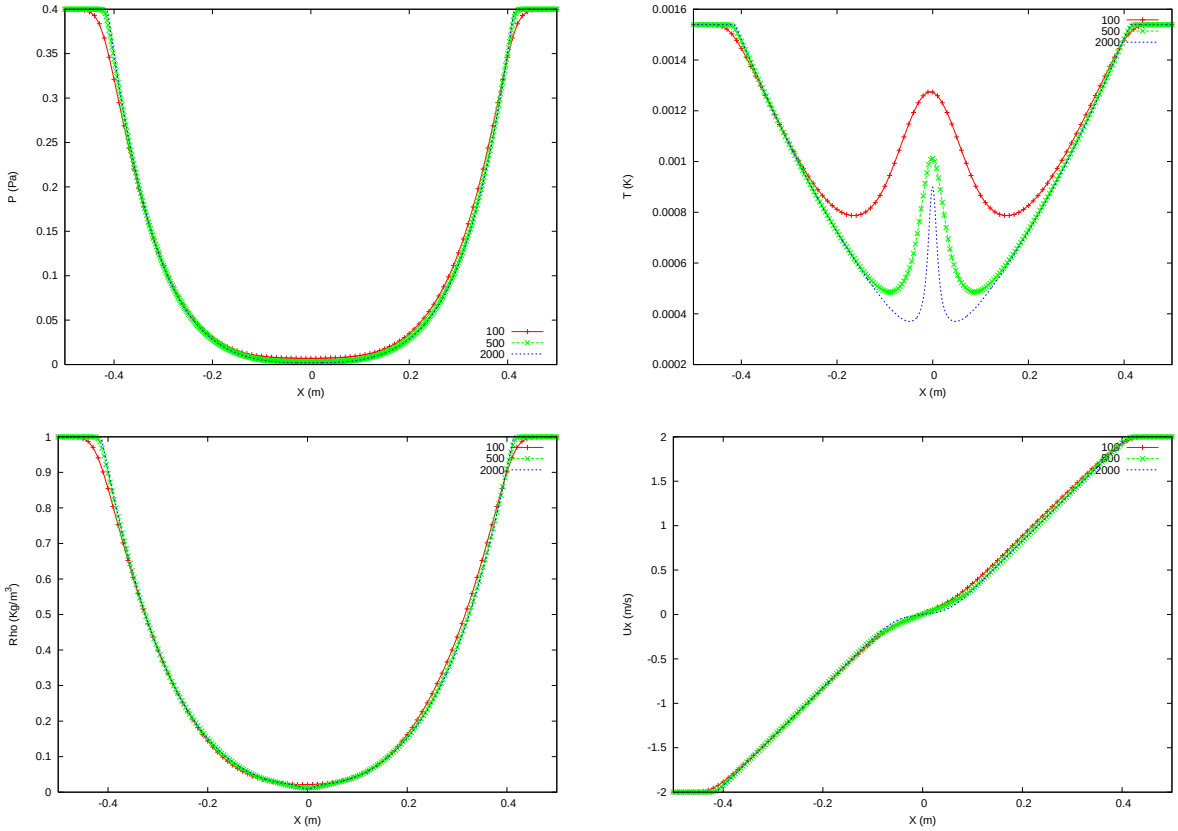


FIG. 3.23: Résultats du test 2 de Liska (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

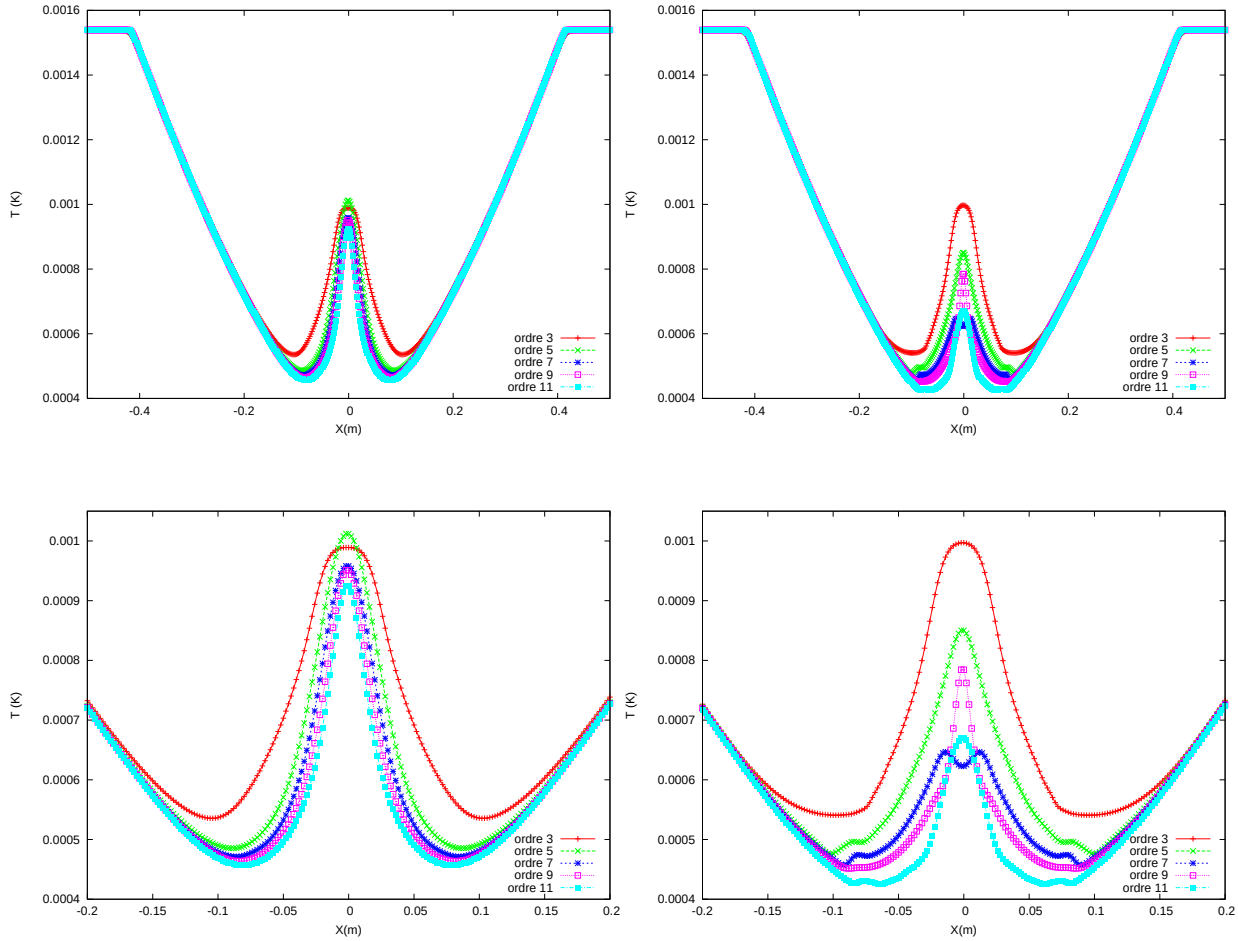


FIG. 3.24: Profil de température du test 2 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

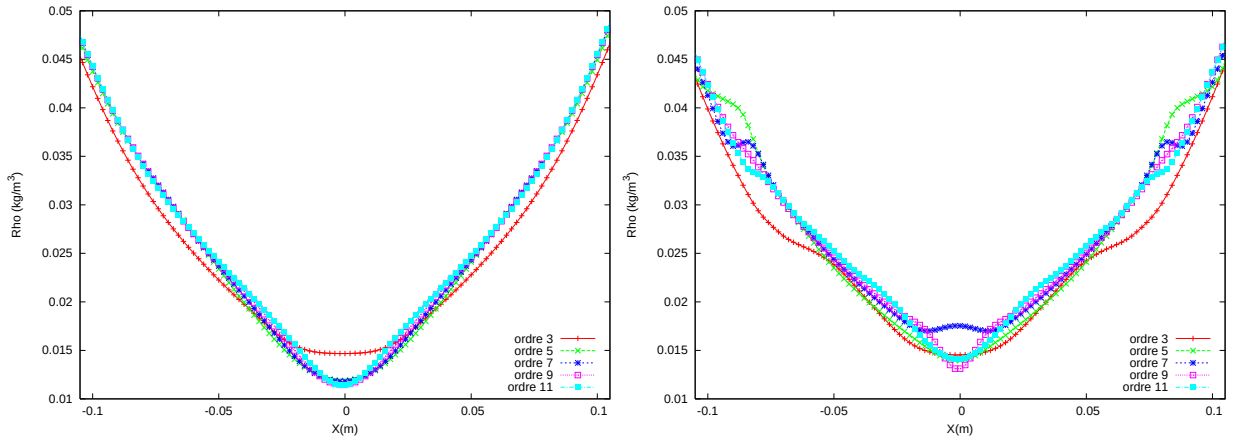


FIG. 3.25: Profil de densité du test 2 de Liska à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test de Noh

Ce test de Noh [100] a été simulé pour un gaz de rapport de chaleurs spécifiques $\gamma = 5/3$. La solution de ce problème correspond à la propagation de deux chocs forts du centre vers l'extérieur du domaine. La densité et la pression sont constantes après le passage de ces chocs.

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1	1
u	1	-1
p	10^{-6}	10^{-6}

TAB. 3.7: Données initiales du test de Noh.

Les figures 3.26 à 3.28 présentent les résultats du test de Noh à t=1 pour la formulation #4, les simulations utilisant la formulation directe n'ont pas abouti sur ce cas test numériquement raide. On constate sur ces figures que les deux chocs sont résolus assez précisément par les schémas WENO d'ordre supérieur à 5. On remarque également que la pression et la densité à l'abscisse x=0 ne sont pas constantes comme le prédit la solution analytique. Une augmentation du nombre de points dans le maillage favorise la diminution du puits de densité. La montée en ordre engendre l'effet inverse (hormis le schéma d'ordre 11 mais celui-ci créé des oscillations de pression et de densité) : le schéma d'ordre 3 est celui qui donne les meilleurs résultats dans cette partie du domaine. En outre, les schémas d'ordre élevé engendrent de légères oscillations sur la vitesse (fig. 3.28).

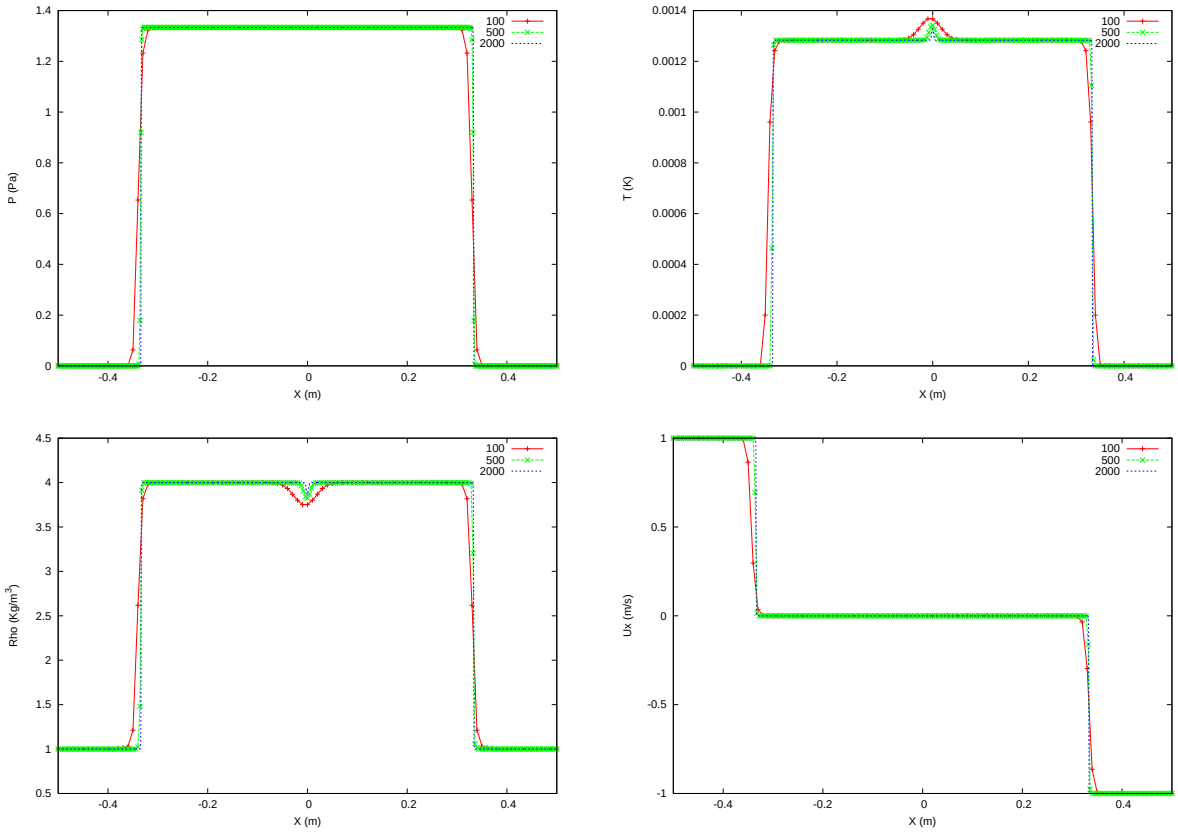


FIG. 3.26: Résultats du test de Noh (#4) à t=1. Schéma WENO d'ordre 5.

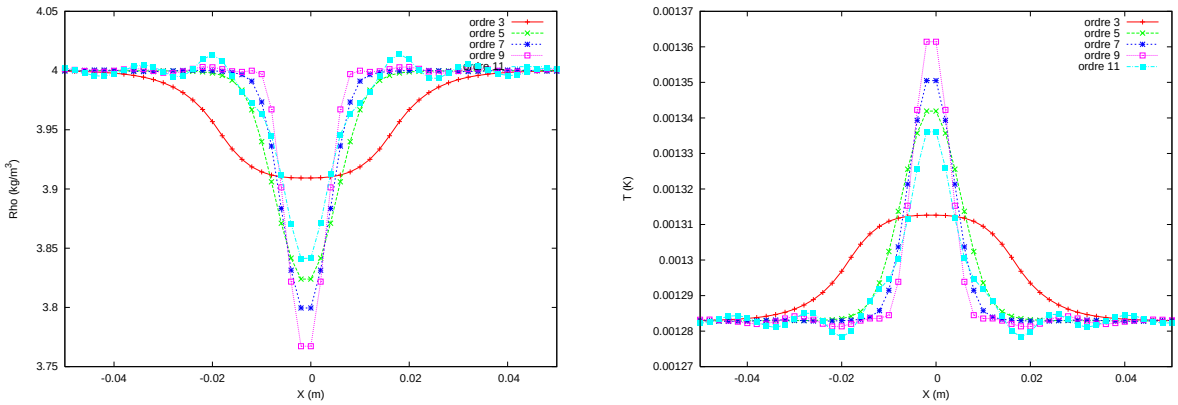


FIG. 3.27: Profil de densité (à gauche) et de température (à droite) du test de Noh à t=1. N_x=500.

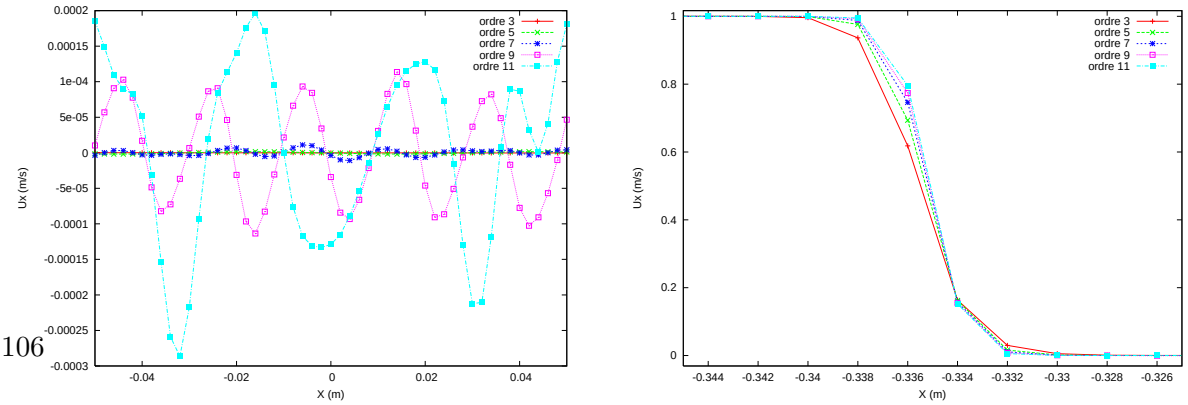


FIG. 3.28: Profil de vitesse du test de Noh à t=1. N_x=500.

Test 3a

Dans cette variante du test 3 de Toro, la discontinuité de contact engendrée à l'abscisse x=0,3 est stationnaire. Le reste de la solution consiste en une détente à gauche et une onde de choc fort à droite. Ce problème de Riemann est approprié pour évaluer la robustesse et la précision d'un schéma numérique. Les conditions initiales sont explicitées dans le tableau 3.8. On peut noter qu'en pratique, le schéma WENO ne sera pas confronté à des conditions aussi extrêmes au vu des applications auxquelles il est destiné.

x	$x < 0,8L_x$	$x > 0,8L_x$
ρ	1	1
u	-19,59745	-19,59745
p	1000	0,01

TAB. 3.8: Données initiales du test 3a de Liska.

Les résultats sont montrés à t=0,012. Ce test est relativement sévère et le schéma WENO d'ordre 11 ne réussit pas à converger quelle que soit la méthode de reconstruction, de même pour les schémas WENO d'ordre 7 et 9 avec la reconstruction directe.
Les figures 3.30 et 3.29 montrent que le schéma WENO d'ordre 5 a des difficultés à résoudre la détente même avec 500 points de maillage. Ceci est confirmé avec les figures 3.31 à 3.33 pour les autres ordres du schéma WENO. Le profil de vitesse présente un pic à l'abscisse x =-0,09 (inexistant dans la solution analytique). La hauteur de ce pic est moins importante pour une reconstruction directe. La discontinuité de contact et le choc sont bien résolus avec un maillage suffisamment fin et un schéma WENO d'ordre 5 ou 7.

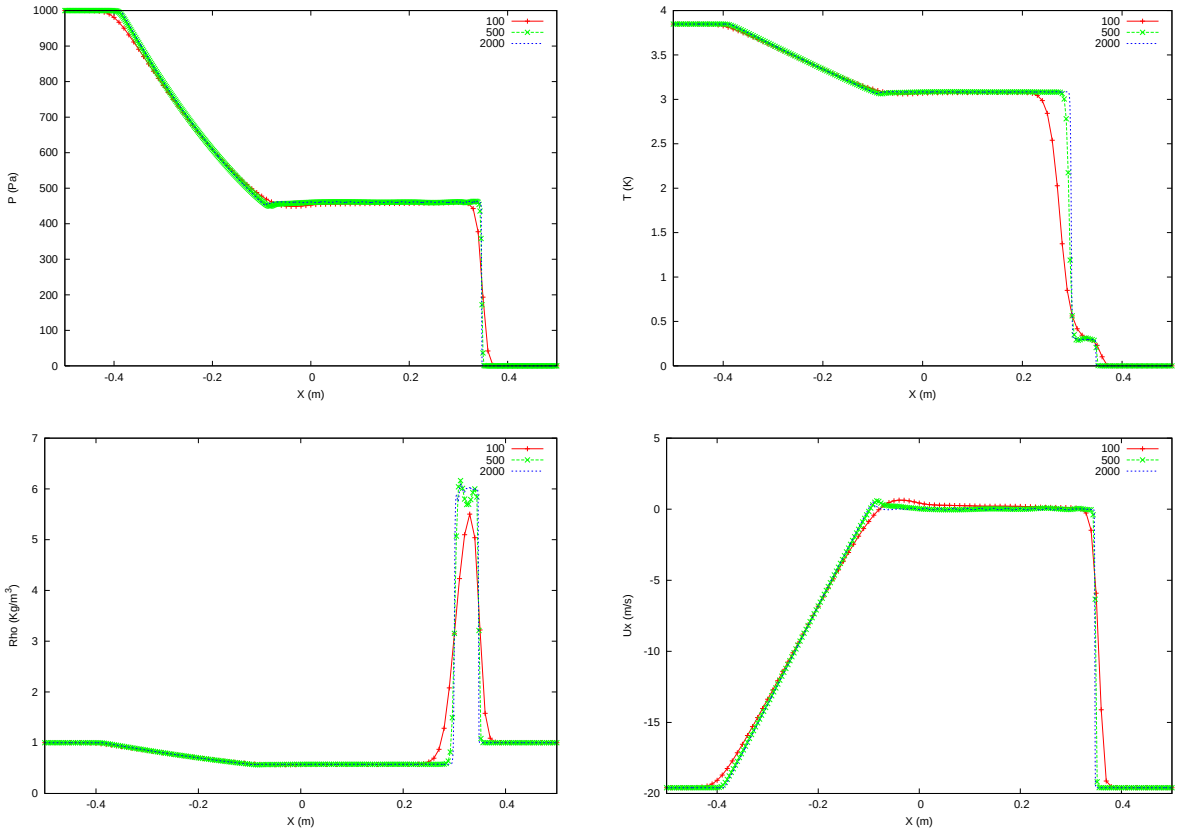


FIG. 3.29: Résultats du test 3a de Liska (#1) à t=0,012. Schéma WENO d'ordre 5.

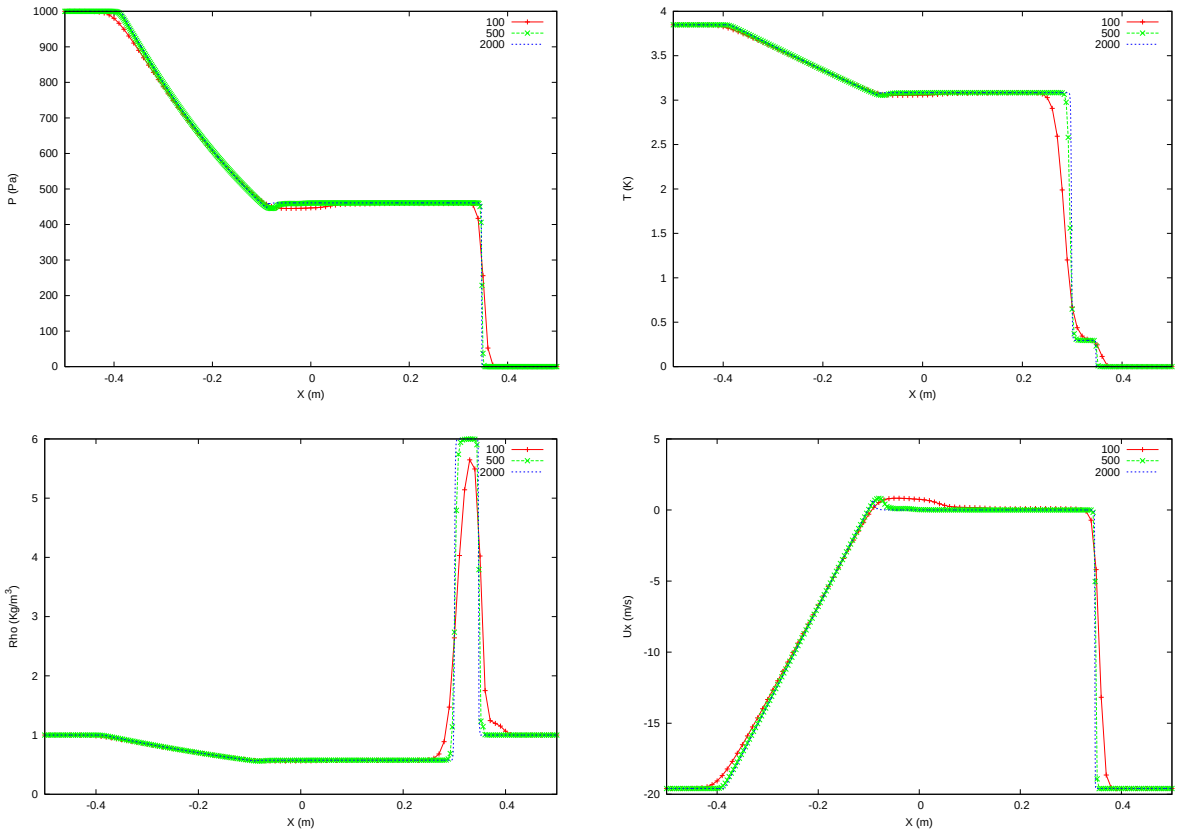


 FIG. 3.30: Résultats du test 3a de Liska (#4) à t=0,012. Schéma WENO d'ordre 5.

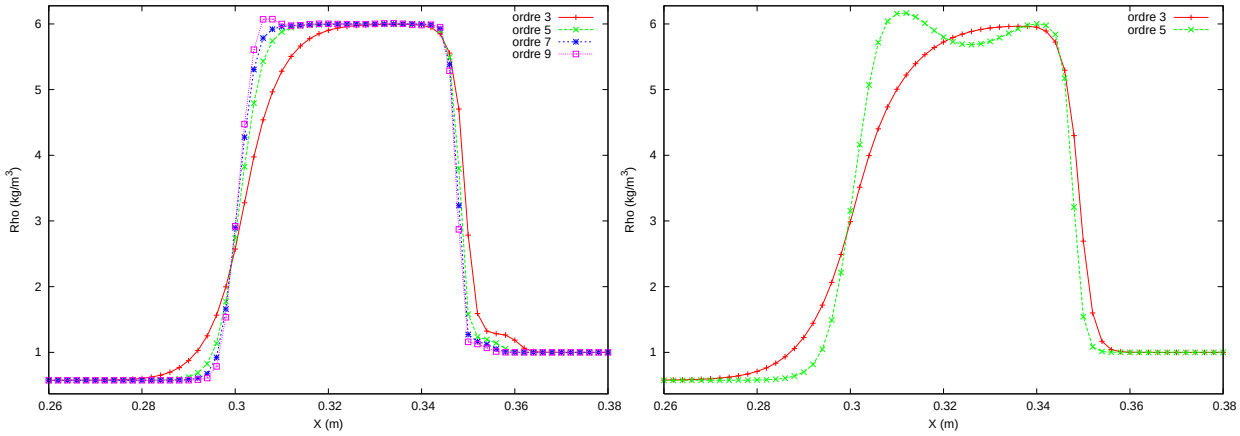


FIG. 3.31: Profil de densité du test 3a de Liska à t=0,012. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

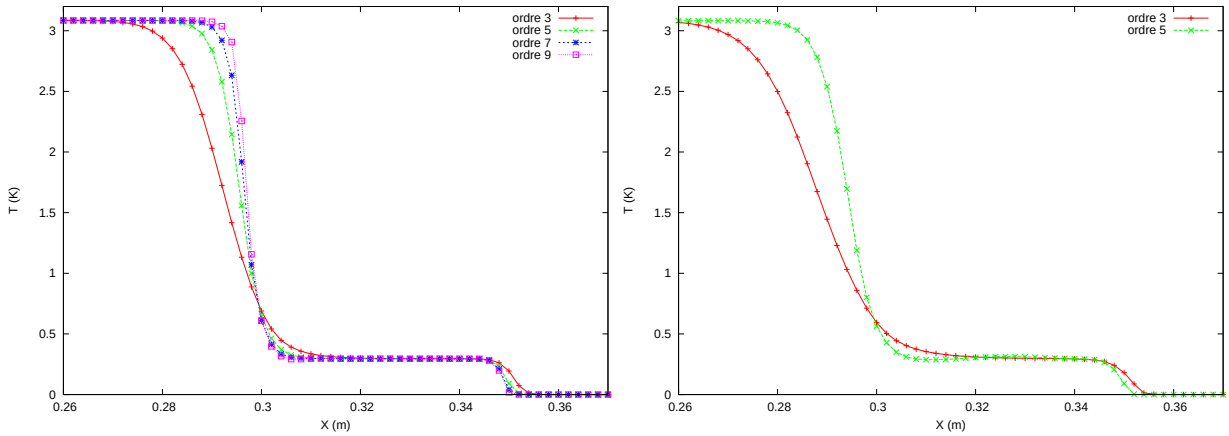


FIG. 3.32: Profil de température du test 3a de Liska à t=0,012. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

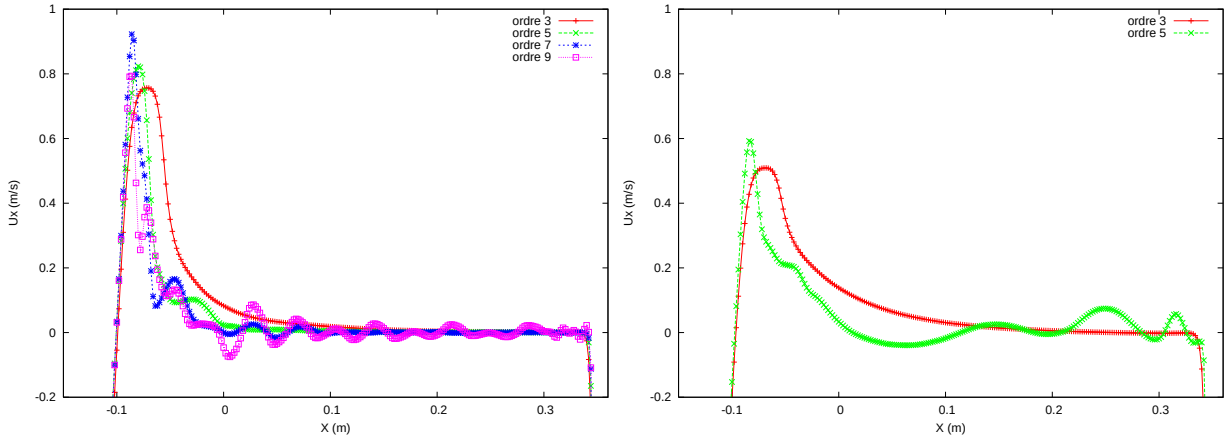


FIG. 3.33: Profil de vitesse du test 3a de Liska à t=0,012. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test 4

Le test 4 de Liska est également un cas test relativement sévère. Sa solution se compose de deux chocs (à droite et à gauche) se déplaçant vers l'intérieur du domaine et d'une discontinuité de contact au milieu.

x	$x < 0,4L_x$	$x > 0,4L_x$
ρ	5,99924	5,99242
u	19,5975	-6,19633
p	460,894	46,095

TAB. 3.9: Données initiales du test 4 de Liska.

Les résultats sont montrés à t=0,035. Les deux chocs et la discontinuité de contact sont résolus de façon précise avec le schéma d'ordre 5 et la reconstruction caractéristique (fig. 3.35). En revanche, la formulation directe génère des oscillations au niveau de la discontinuité de contact (3.34). Ces remarques se vérifient sur les figures 3.36 et 3.37. La montée en ordre provoque une augmentation de l'amplitude des oscillations observées au niveau de la discontinuité de contact avec la reconstruction #1. Le schéma d'ordre 11 ne parvient pas à résoudre ce test avec cette formulation.

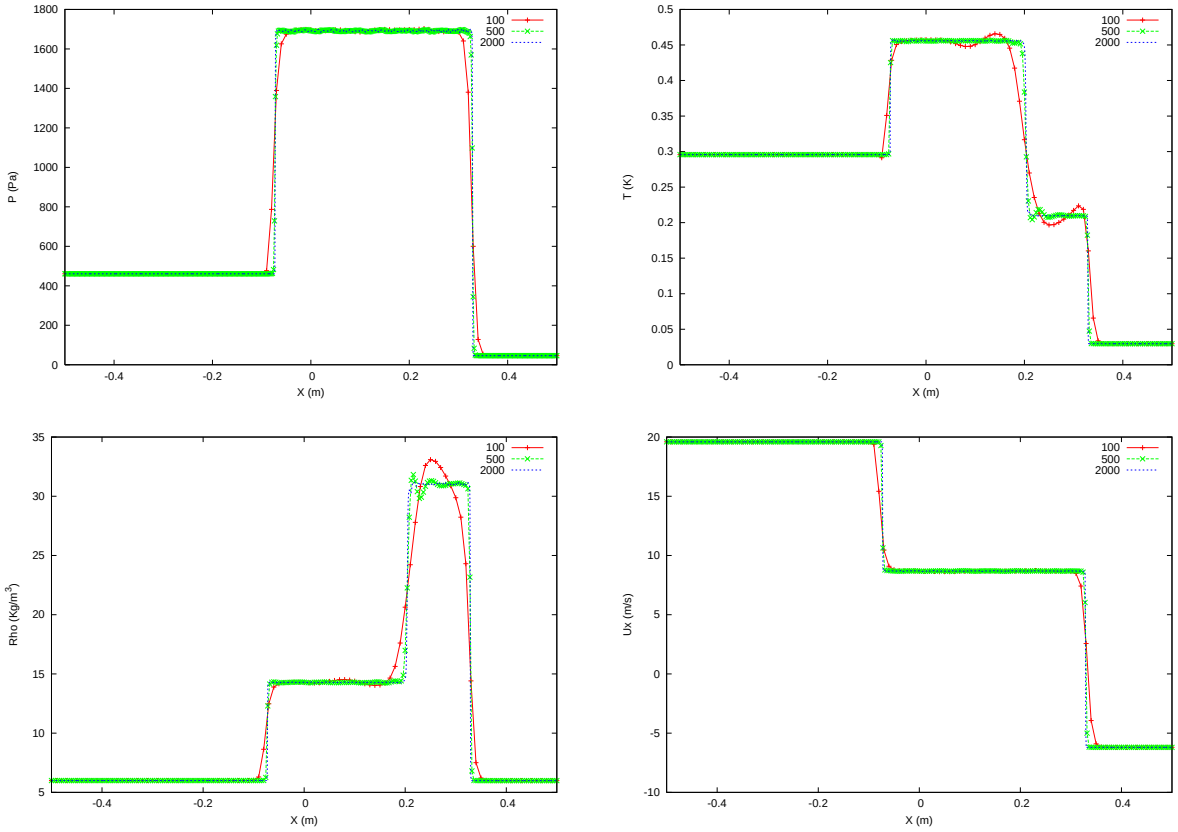


FIG. 3.34: Résultats du test 4 de Liska (#1) à t=0,035. Schéma WENO d'ordre 5.

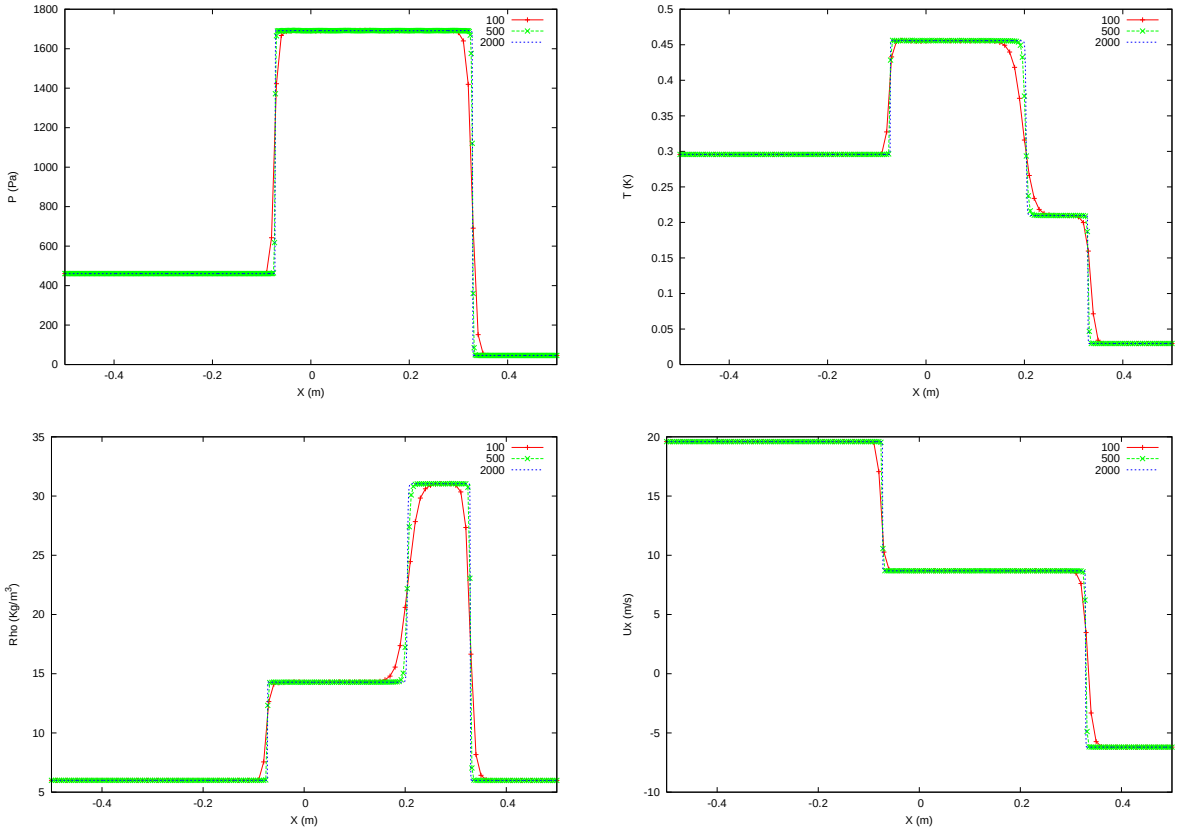


FIG. 3.35: Résultats du test 4 de Liska (#4) à t=0,035. Schéma WENO d'ordre 5.

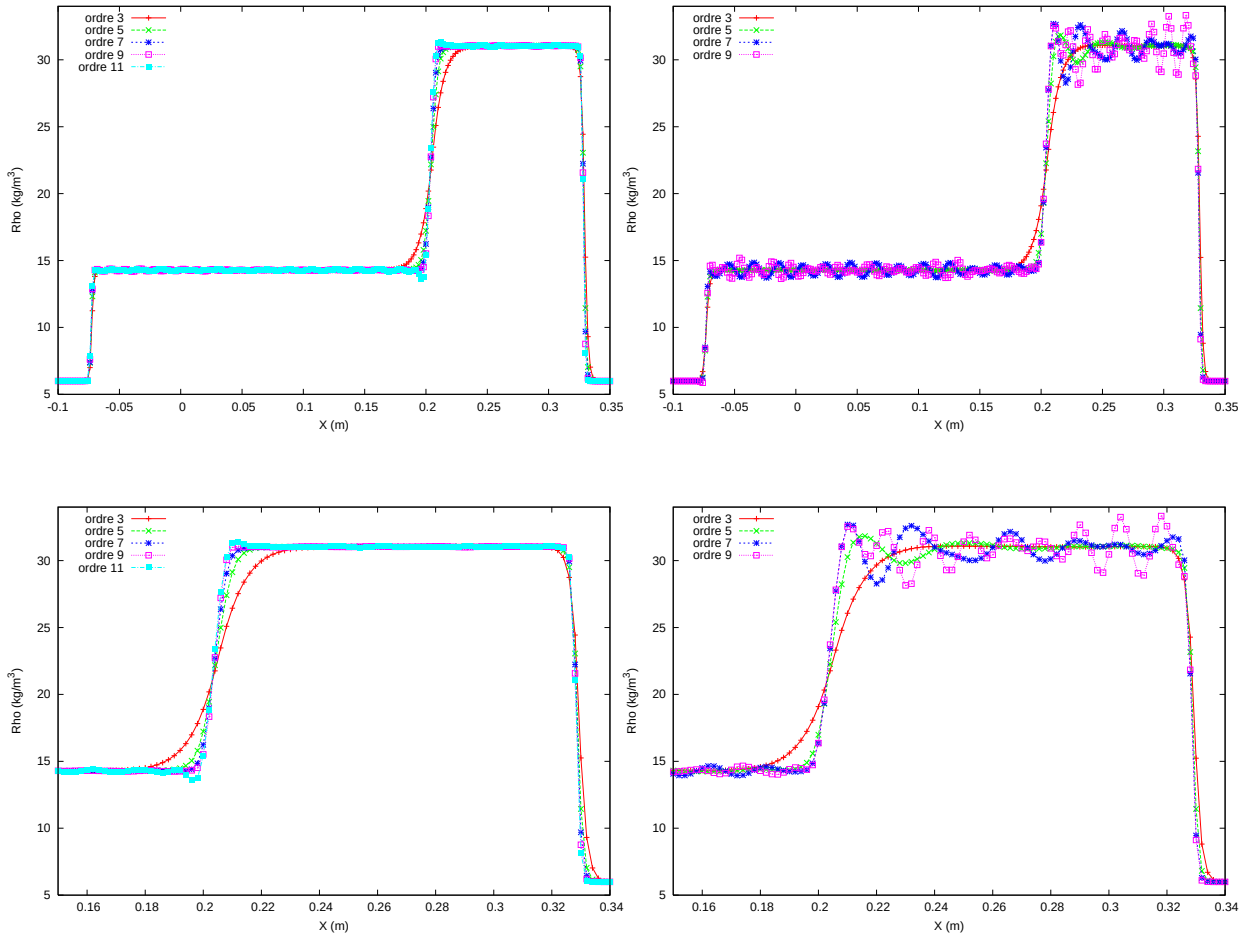


FIG. 3.36: Profil de densité du test 4 de Liska à t=0,035. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

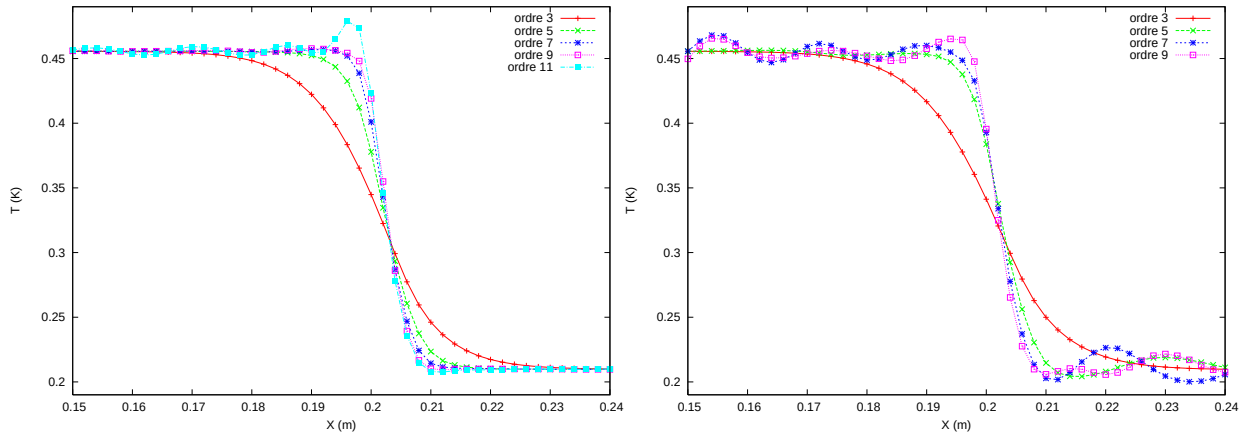


FIG. 3.37: Profil de température du test 4 de Liska à t=0,035. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test 5

Le test 5 correspond à une discontinuité de contact stationnaire. L'objectif de ce test est de démontrer les capacités d'un schéma numérique à capturer des discontinuités de contact.

x	$x < 0, L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1,4	1
u	0	0
p	1	1

TAB. 3.10: Données initiales du test 5 de Liska.

Les figures 3.39 à 3.41 présentent les résultats pour le test 5 à t=2. Le schéma WENO résout précisément la discontinuité de contact avec la reconstruction #4 quel que soit l'ordre utilisé. En revanche, la formulation #1 est nettement moins performante et est beaucoup plus sensible à l'ordre du schéma et au maillage. Le schéma d'ordre 11 est encore une fois à proscrire sur ce type de cas car il provoque des oscillations au niveau de la discontinuité.

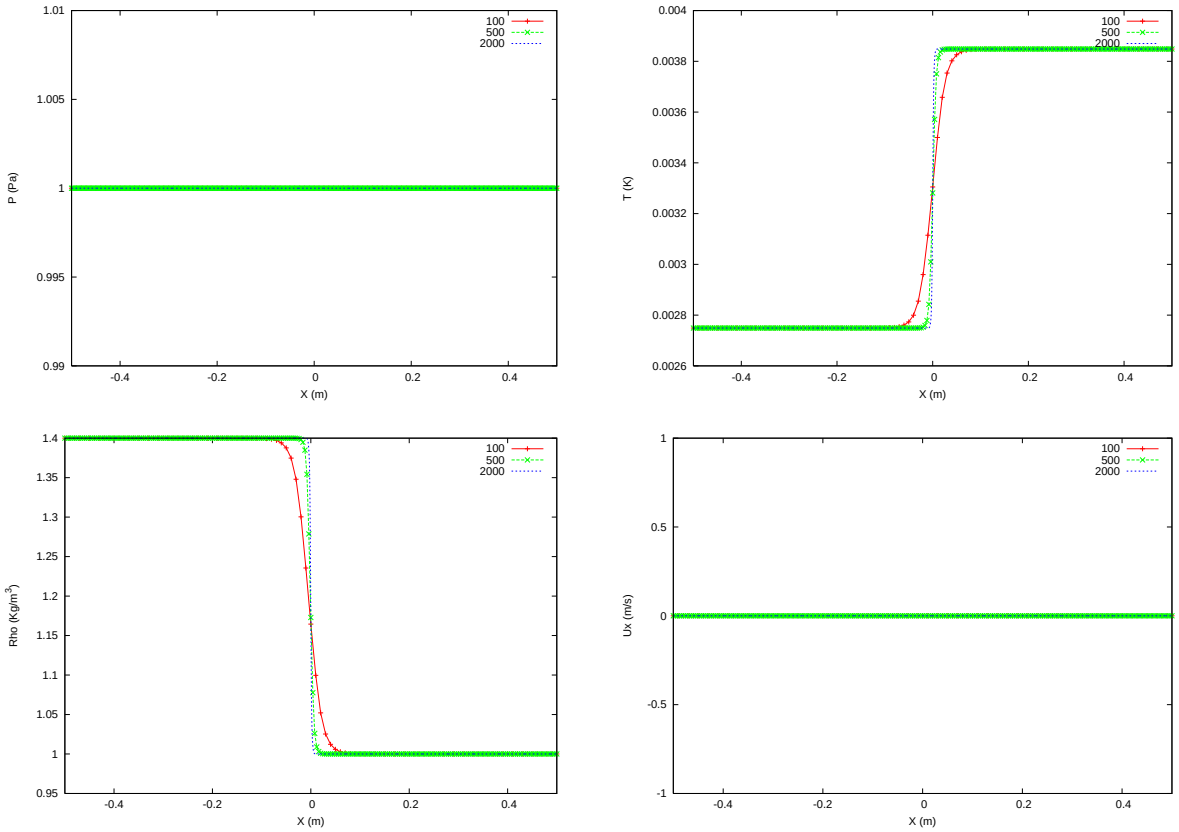


FIG. 3.38: Résultats du test 5 de Liska (#1) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5.

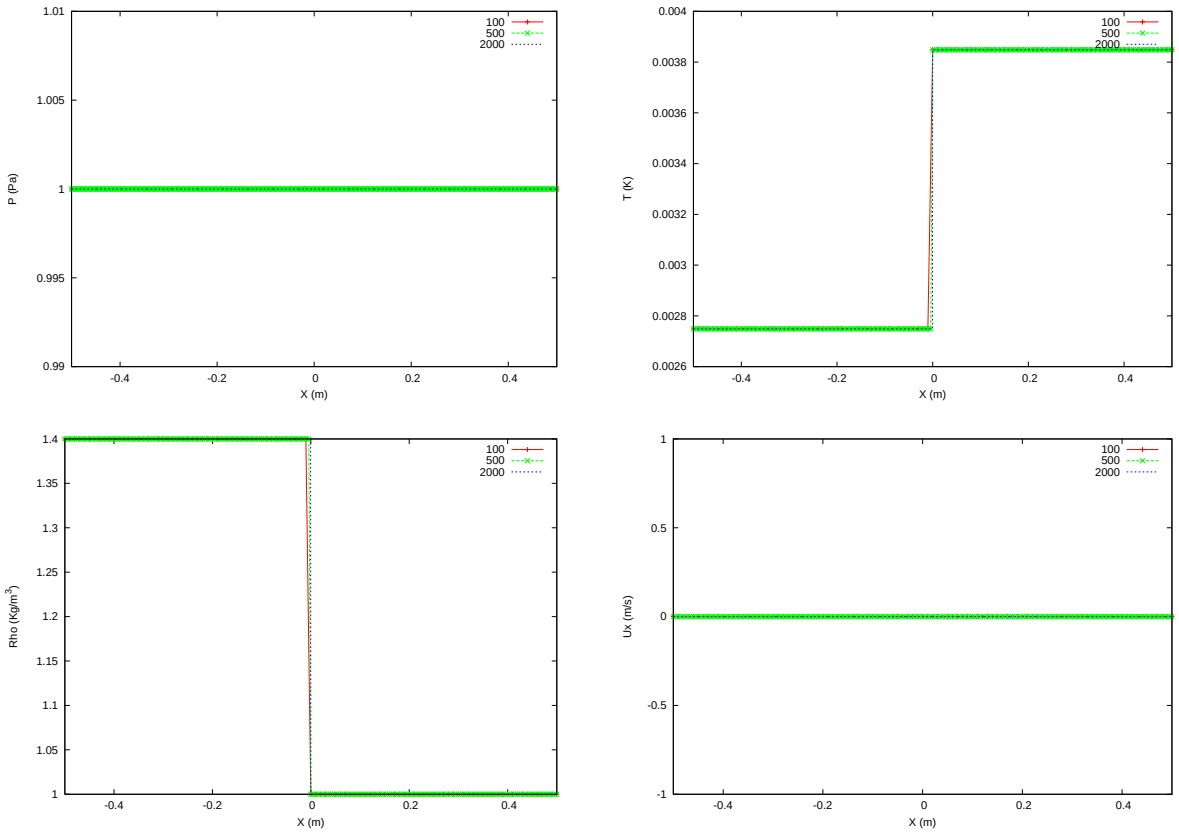


 FIG. 3.39: Résultats du test 5 de Liska (#4) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5.

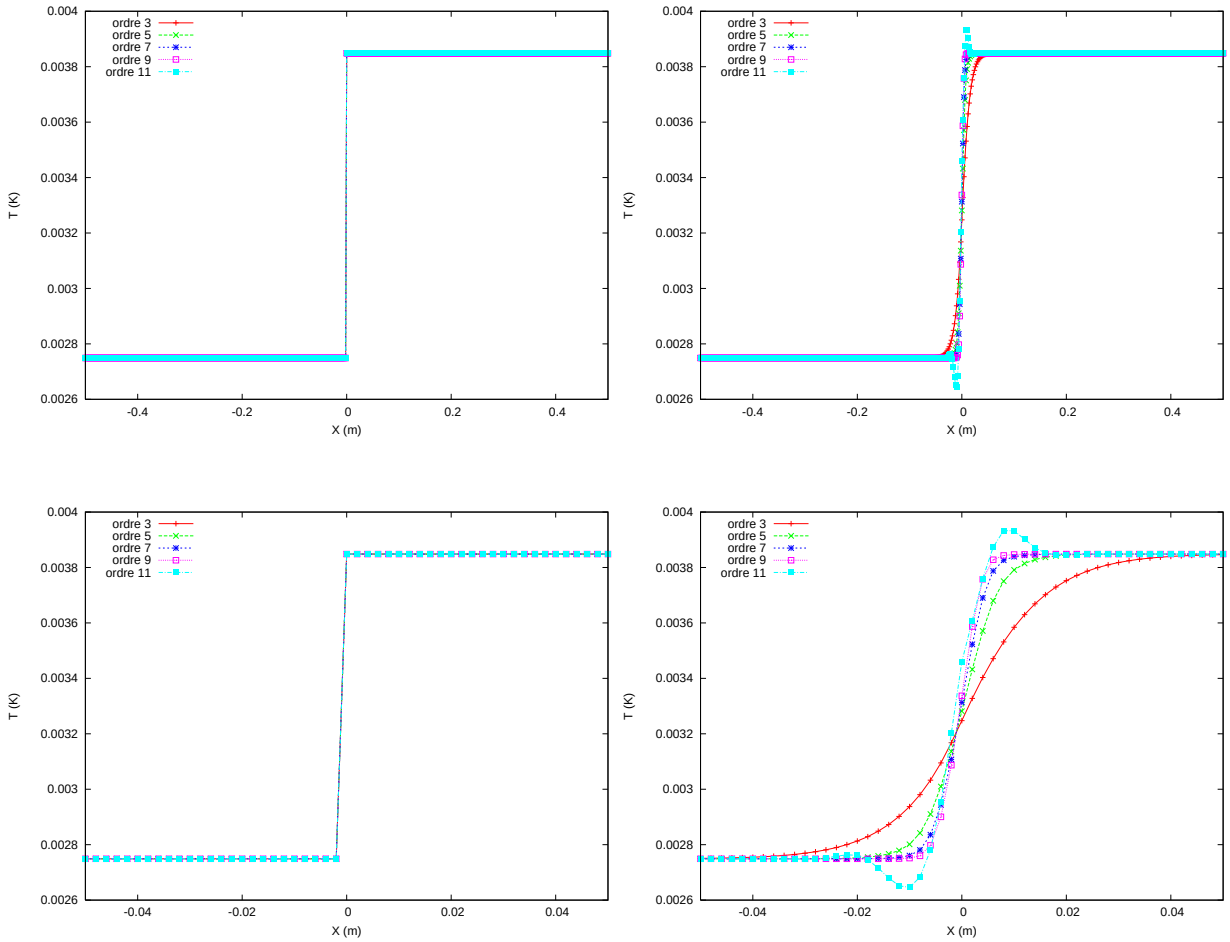


FIG. 3.40: Profil de température du test 5 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

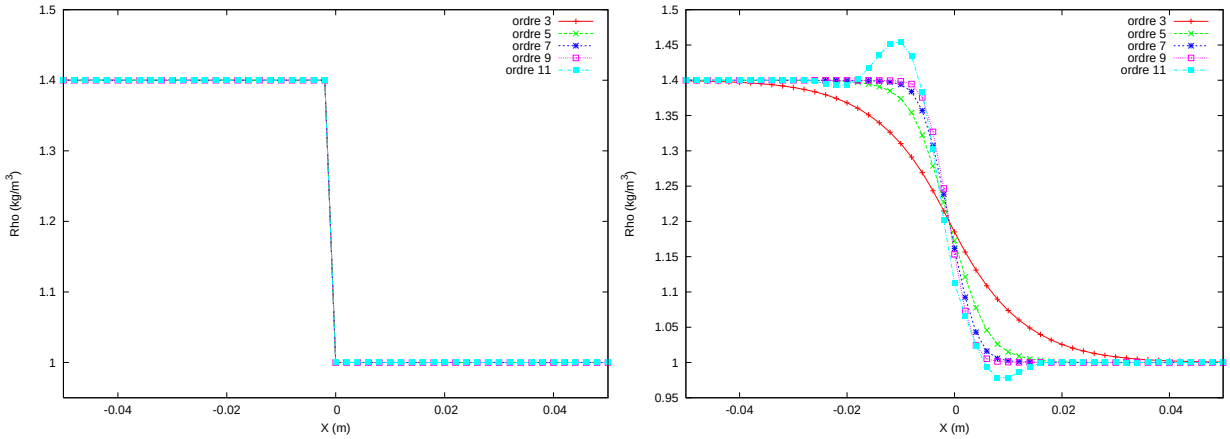


FIG. 3.41: Profil de densité du test 5 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test 6

Comme pour le test 5 la solution analytique du test 6 se compose d'une discontinuité de contact isolée mais se déplaçant lentement vers la droite. L'objectif de ce test est similaire à celui du test 5.

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1,4	1
u	0,1	0,1
p	1	1

TAB. 3.11: Données initiales du test 6 de Liska.

Les résultats sont présentés à t=2 sur les figures 3.43 à 3.45. On constate que la résolution de la discontinuité de contact est moins précise que celle pour le test 5 où elle était stationnaire. Néanmoins, le schéma WENO couplé à une reconstruction caractéristique donne de bons résultats si l'ordre du schéma est suffisamment élevé. En revanche, la formulation #1 engendre des oscillations sur la pression et la vitesse d'amplitude décroissante avec la résolution de la simulation.

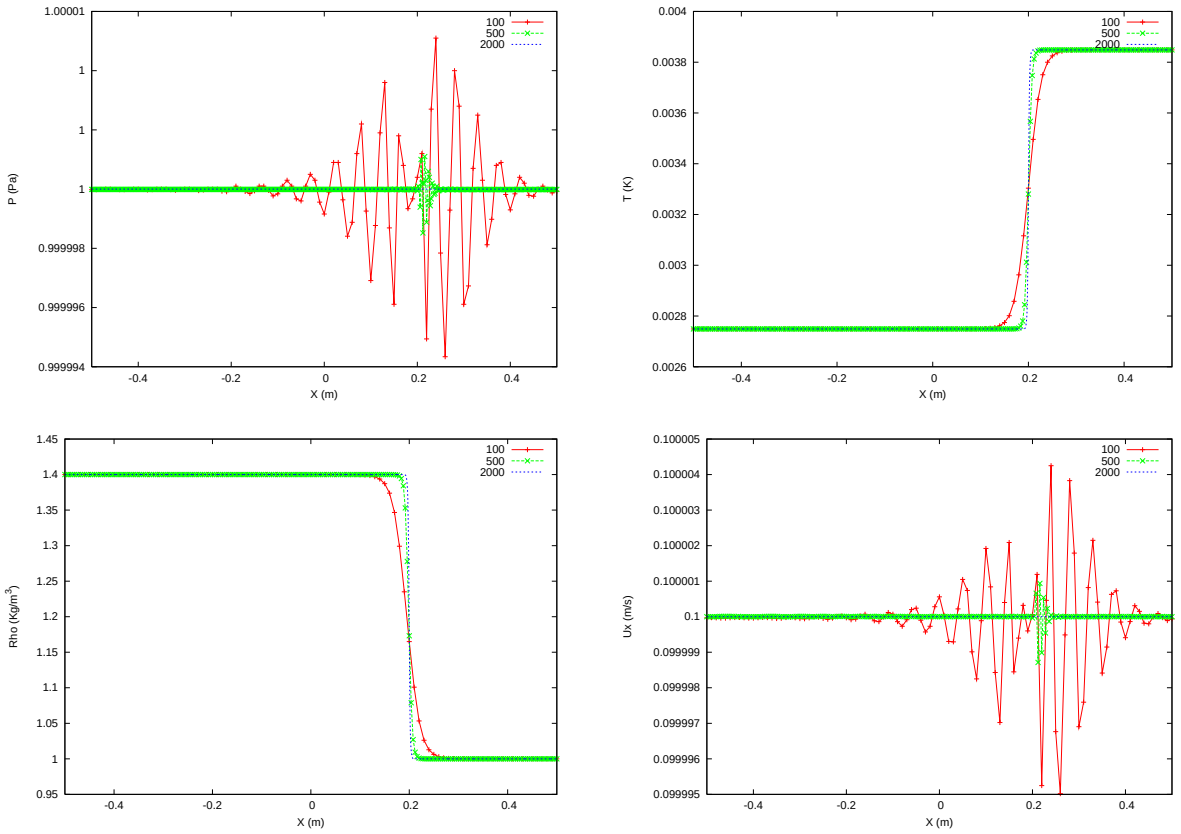


FIG. 3.42: Résultats du test 6 de Liska (#1) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5.

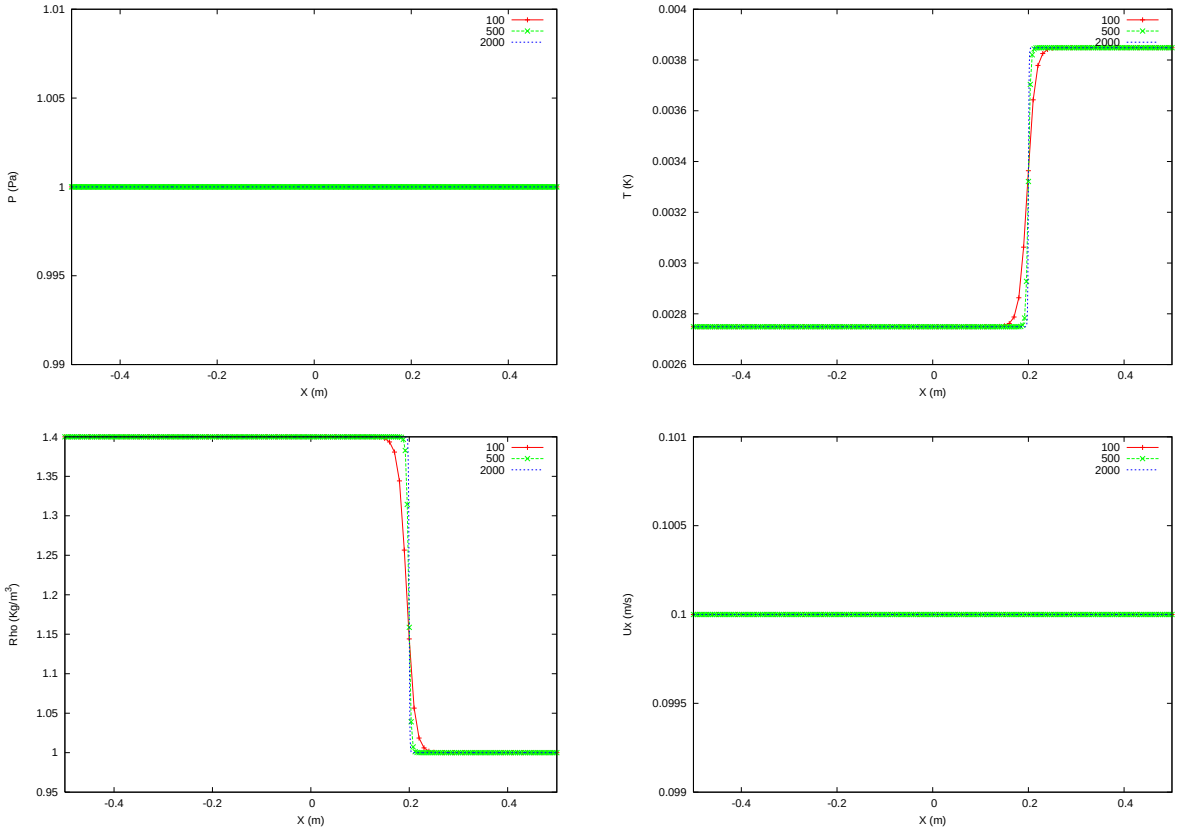


FIG. 3.43: Résultats du test 6 de Liska (#4) à t=2. Schéma WENO d'ordre 5.

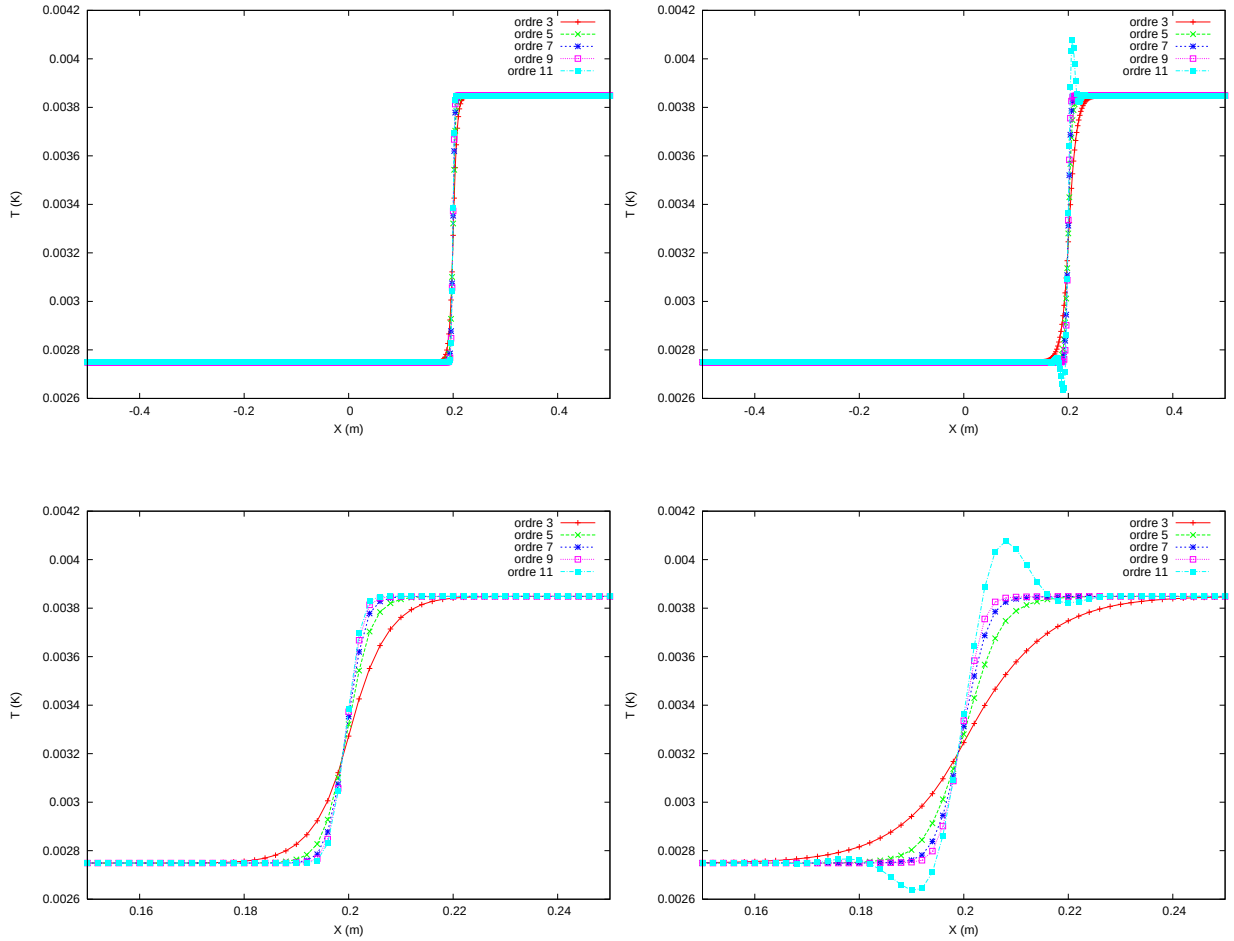


FIG. 3.44: Profil de température du test 6 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

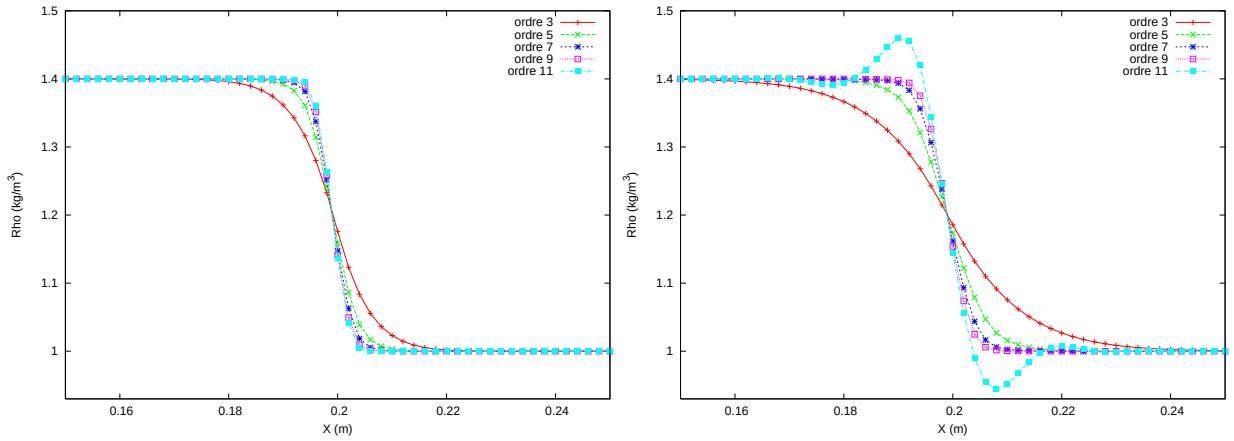


FIG. 3.45: Profil de densité du test 6 de Liska à t=2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test de pic

Pour ce test, on a utilisé deux maillages comprenant 800 et 2000 points. La solution se compose d'une détente (autour de l'abscisse x=0,15), d'une discontinuité de contact et d'un choc.

x	$x < 0,4L_x$	$x > 0,4L_x$
ρ	0,1261192	6,591493
u	8,9047029	2,2654207
p	782,92899	3,1544874

TAB. 3.12: Données initiales du test de pic de Liska.

Ce test est très sévère car il comporte un pic de densité étroit et élevé. Les rapports de densité et de pression entre les deux côtés de la membrane sont très importants et ne correspondent pas à cas test physique. Le schéma d'ordre 11 ne parvient pas à le simuler quelle que soit la reconstruction. Les simulations, utilisant la reconstruction #4 n'aboutissant pas sur ce test, ont été débutées avec la formulation directe jusqu'à t=10^{-4} afin de permettre leur convergence.
Les résultats sont présentés au temps final t=0,0039. On constate sur les figures 3.47 et 3.46 qu'il y a peu de différence entre les deux formulations. Un zoom sur le pic de densité nous permet d'apprécier le mauvais comportement du schéma WENO d'ordre 3 au niveau de la discontinuité de contact et du choc. La figure 3.50 montre que tous les schémas ont des difficultés à simuler la vitesse au niveau de la détente. Les schémas d'ordre 7 et plus particulièrement d'ordre 9 créent des oscillations sur la vitesse.

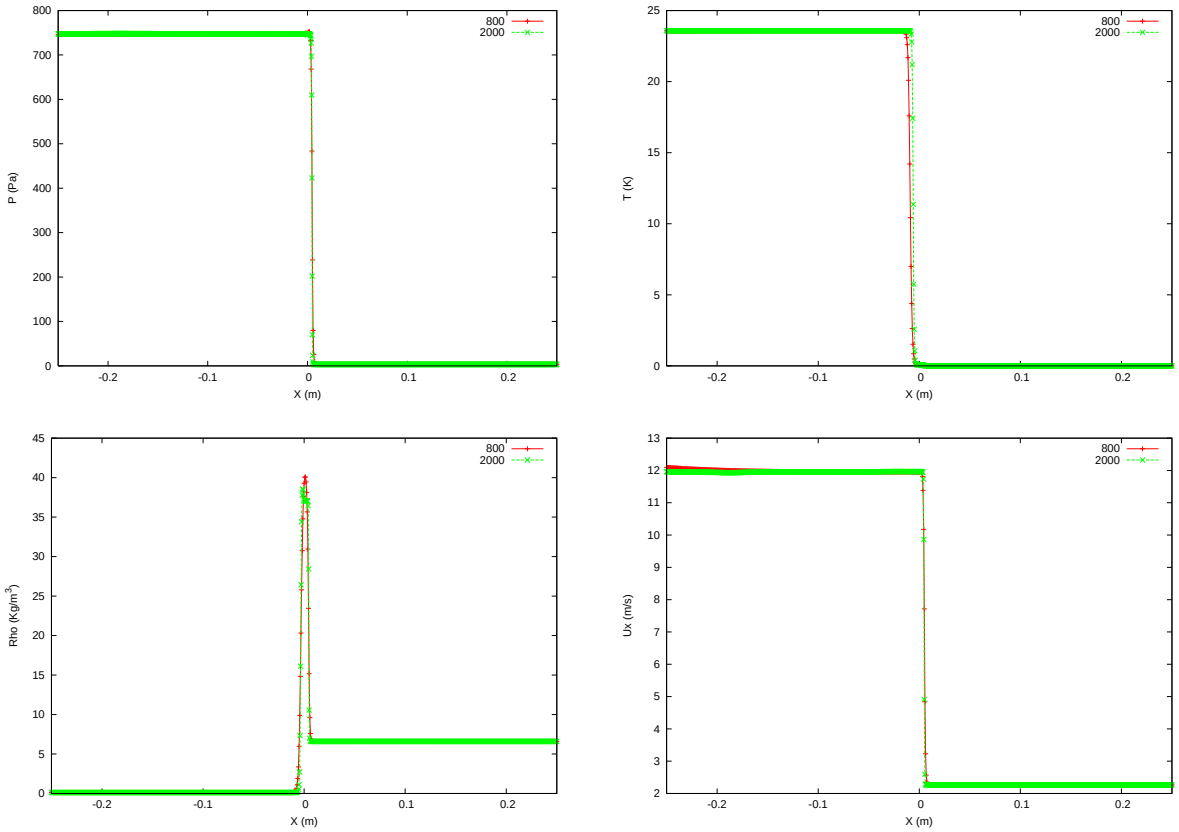


FIG. 3.46: Résultats du test du pic de Liska (#1) à t=0,0039. Schéma WENO d'ordre 5.

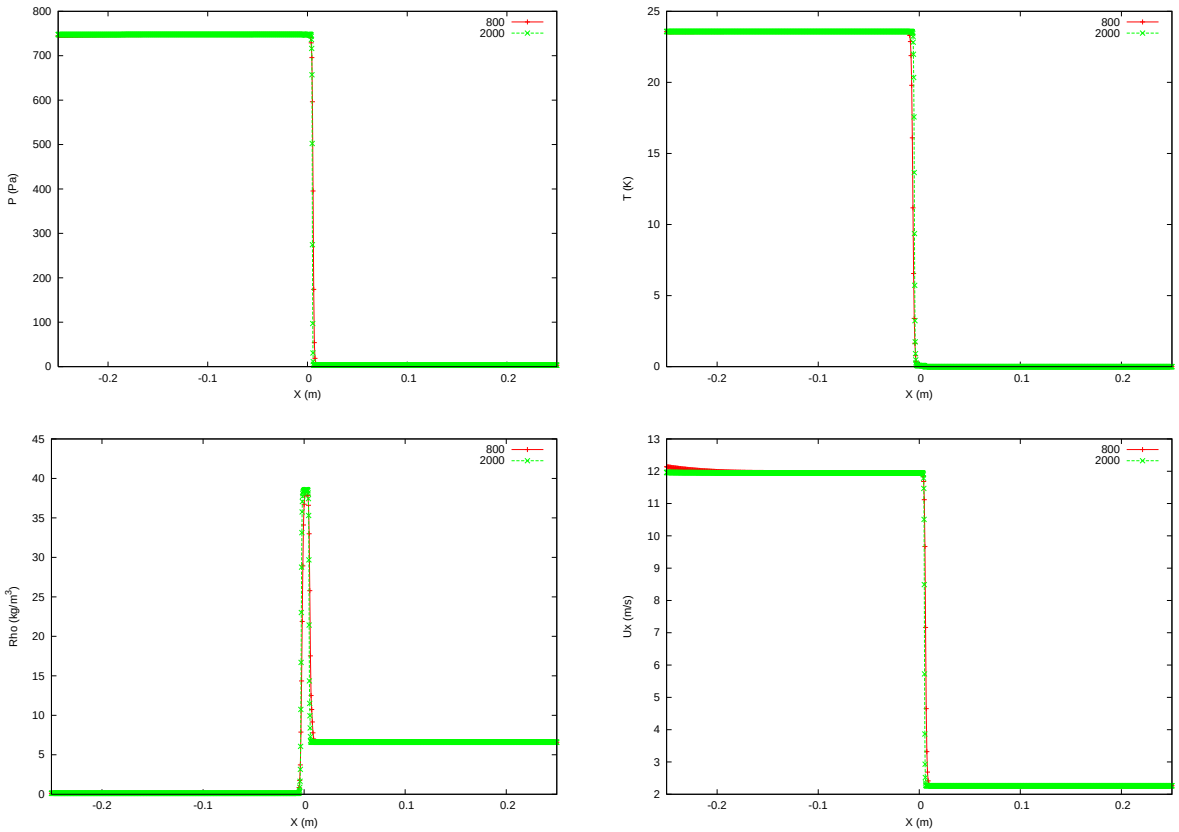


FIG. 3.47: Résultats du test du pic de Liska (#4) à t=0,0039. Schéma WENO d'ordre 5.

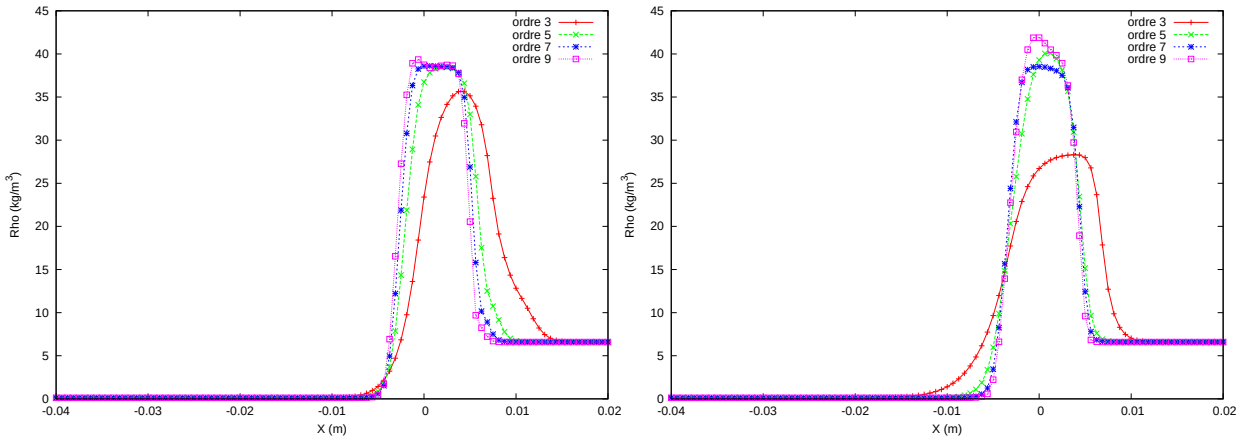


FIG. 3.48: Profil de densité du test du pic de Liska à t=0,039. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

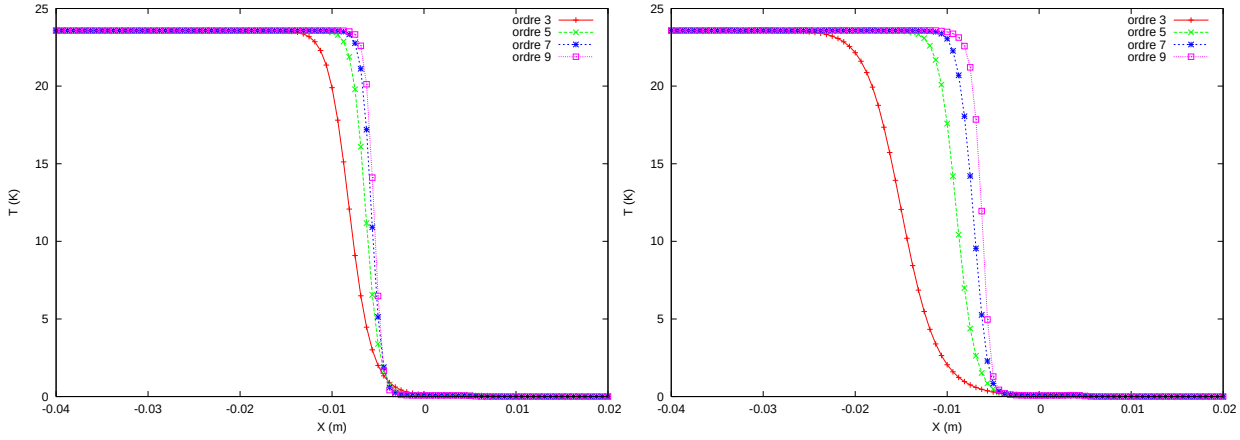


FIG. 3.49: Profil de température du test du pic de Liska à t=0,0039. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

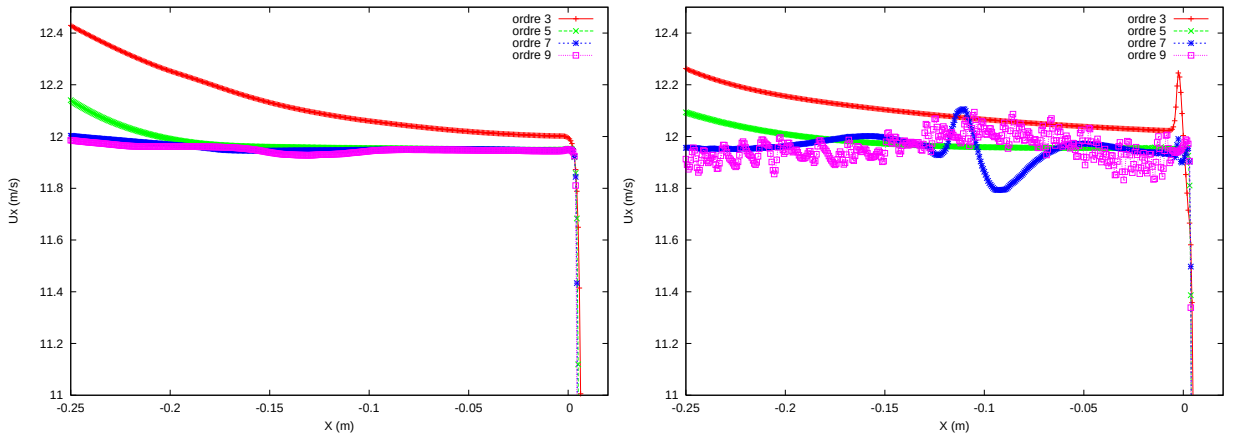


FIG. 3.50: Profil de vitesse du test du pic de Liska à t=0,0039. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Test de Woodward-Colella

Ce problème a été développé par Woodward et Collela [135] pour comparer les performances de différentes méthodes hydrodynamiques sur des problèmes faisant intervenir d'importantes structures de chocs. Ce test correspond à l'interaction d'ondes issues de deux problèmes de Riemann. Des conditions limites de flux nul sont utilisées pour cette simulation.

x	$x < 0,1L_x$	$0,1L_x < x < 0,9L_x$	$x > 0,9L_x$
ρ	1	1	1
u	0	0	0
p	1000	0,01	100

TAB. 3.13: Données initiales du test de Woodward-Colella.

Les résultats de ce test sont présentés sur les figures 3.52 à 3.55 à t=0,038. Seuls les schémas WENO d'ordre 3 et 5 couplés à une reconstruction #4 sont parvenus à résoudre ce problème extrêmement sévère. Ces figures montrent que le schéma d'ordre 5 donne des résultats beaucoup plus précis que celui d'ordre 3.

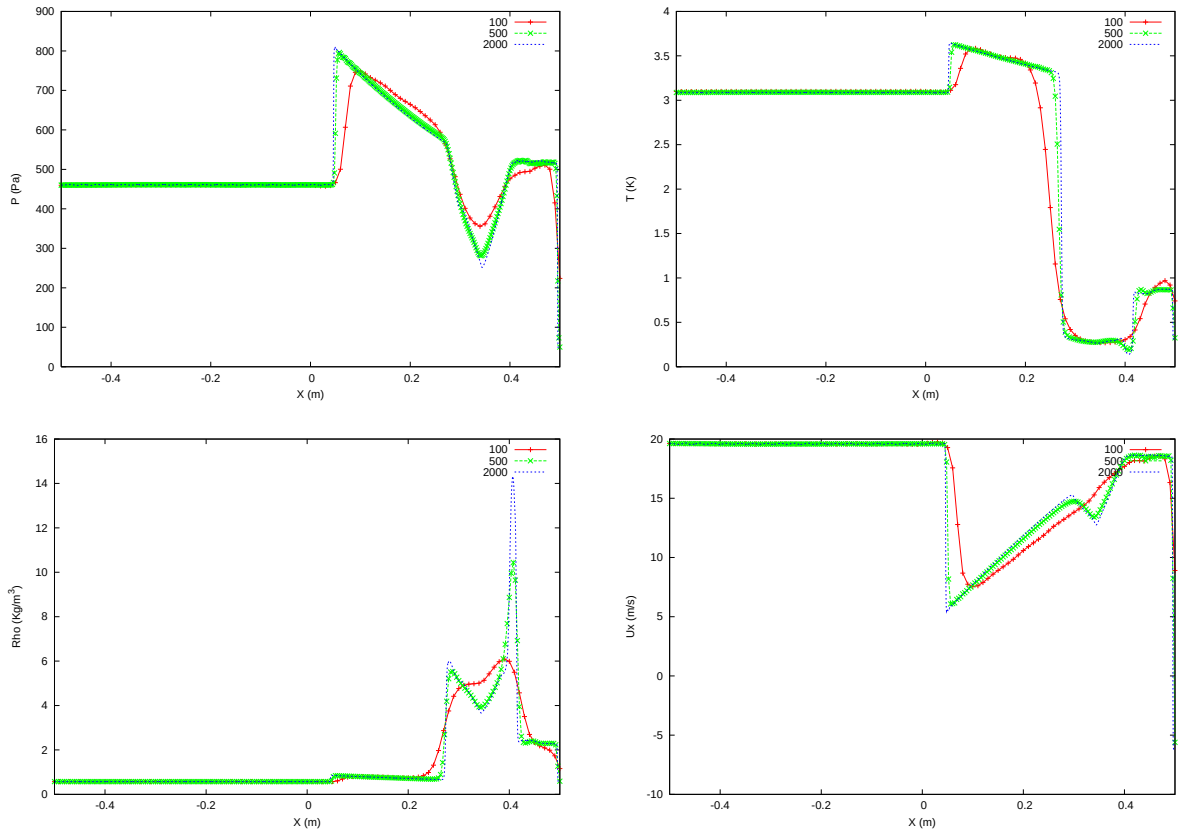


FIG. 3.51: Résultats du test de Woodward et Collela (#1) à t=0,038. Schéma WENO d'ordre 5.

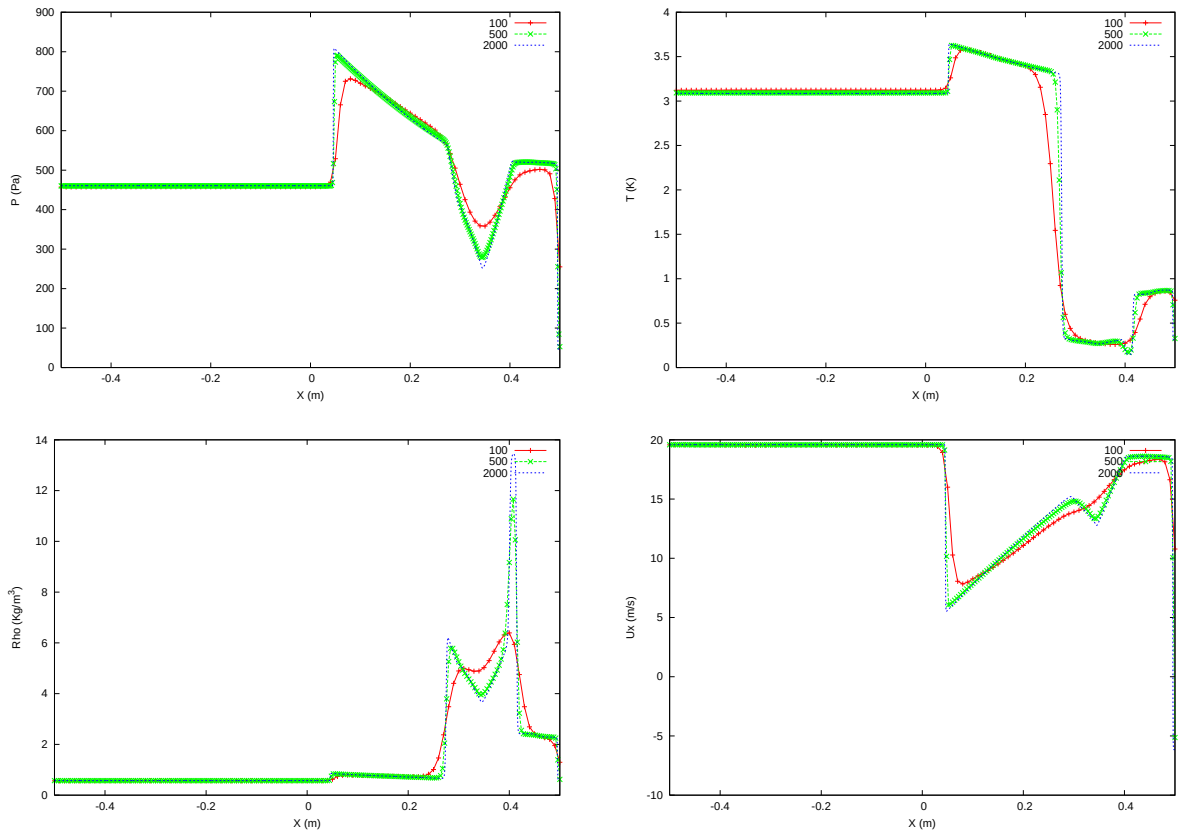


FIG. 3.52: Résultats du test de Woodward et Collela (#4) à t=0,038. Schéma WENO d'ordre 5.

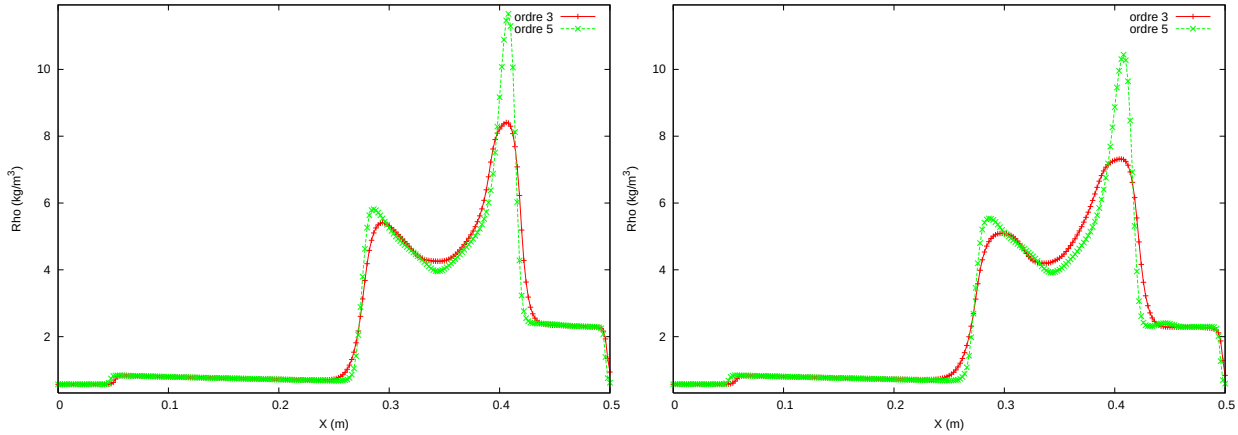


FIG. 3.53: Profil de densité du test de Woodward et Collela à t=0,038. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

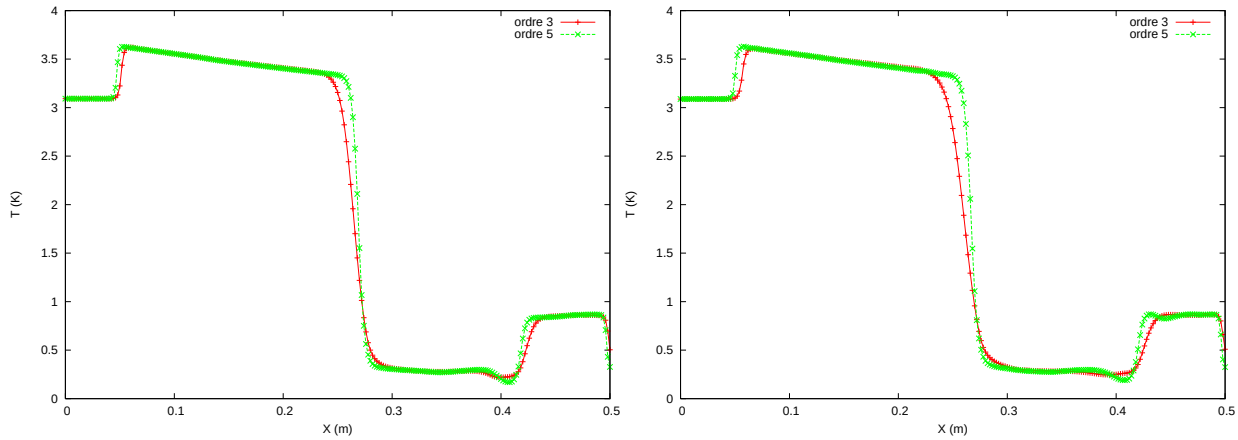


FIG. 3.54: Profil de température du test de Woodward et Collela à t=0,038. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

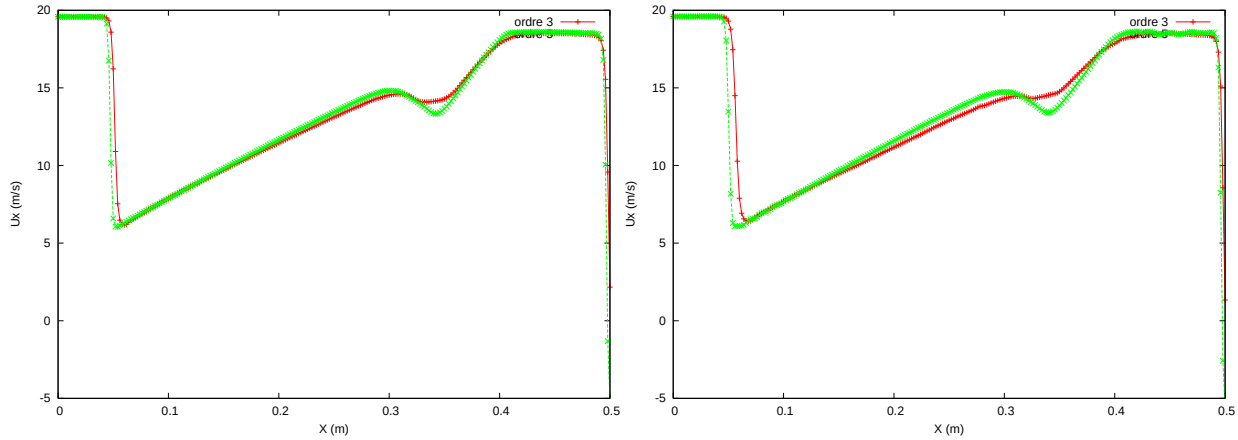


FIG. 3.55: Profil de vitesse du test de Woodward et Collela à t=0,038. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Tests de Deiterding

Ce dernier cas test mono-espèce est issu de la thèse Deiterding [33]. La solution de ce problème de Riemann consiste en une détente à droite, une discontinuité de contact au milieu et un choc à gauche comme pour le tube à choc de Sod. Les différences entre ces deux cas test se situent sur le niveau des variables ρ et p et sur l'existence d'une vitesse initiale.

x	$x < 0,3L_x$	$x > 0,3L_x$
ρ	1,1	0,25
u	270	170
p	110	25

Tab. 3.14: Données initiales du cas test de Deiterding.

La simulation est arrêtée à t=0,08 quand les trois ondes simples ont été clairement séparées. Les figures 3.57 à 3.56 ne laissent pas apparaître de grosses différences entre les deux formulations pour les maillages contenant 500 et 2000 points. La détente et le choc sont résolus précisément par le schéma d'ordre 5. La difficulté de ce test est la simulation correcte de la discontinuité de contact. On observe sur la figure 3.58 des oscillations sur la densité au niveau de la détente et de la discontinuité de contact d'amplitudes plus élevées pour la reconstruction #1 . Le schéma WENO d'ordre 11 est le moins bon sur ce cas test.

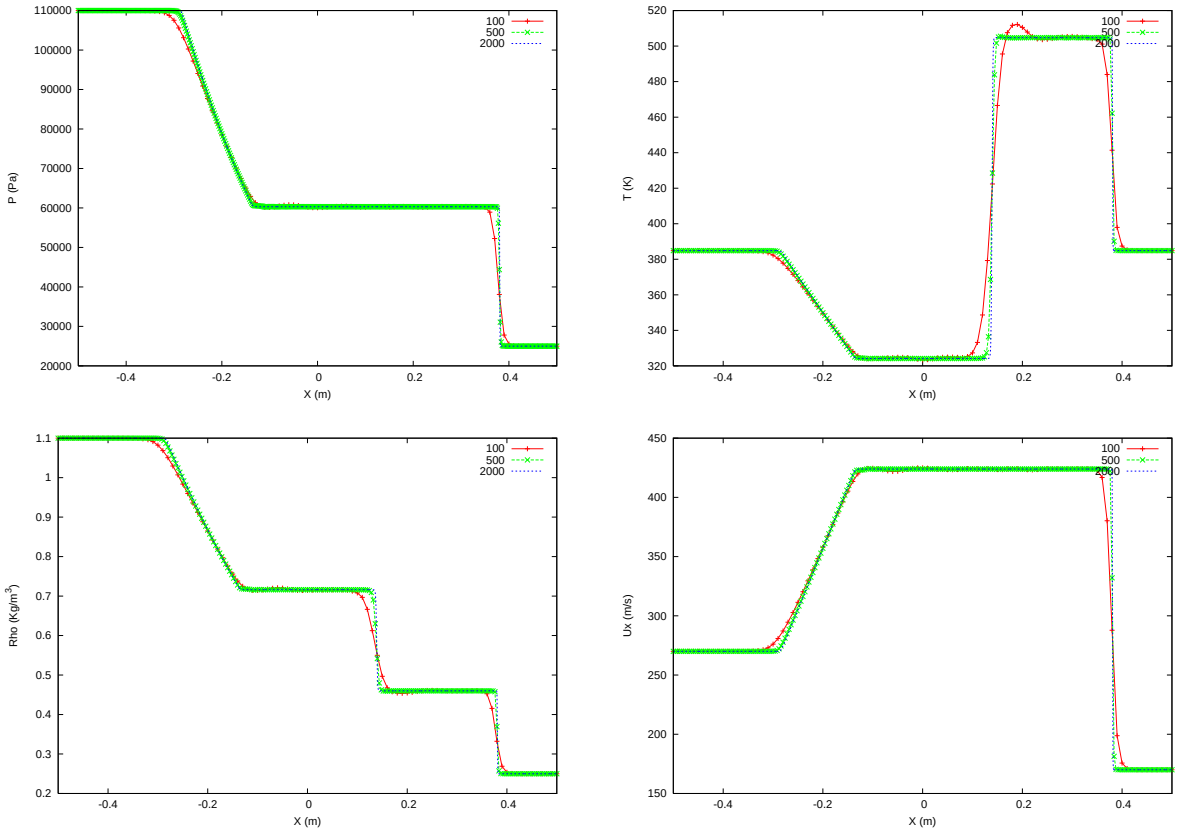


FIG. 3.56: Résultats du test de Deiterding (#1) à t=0,08. Schéma WENO d'ordre 5.

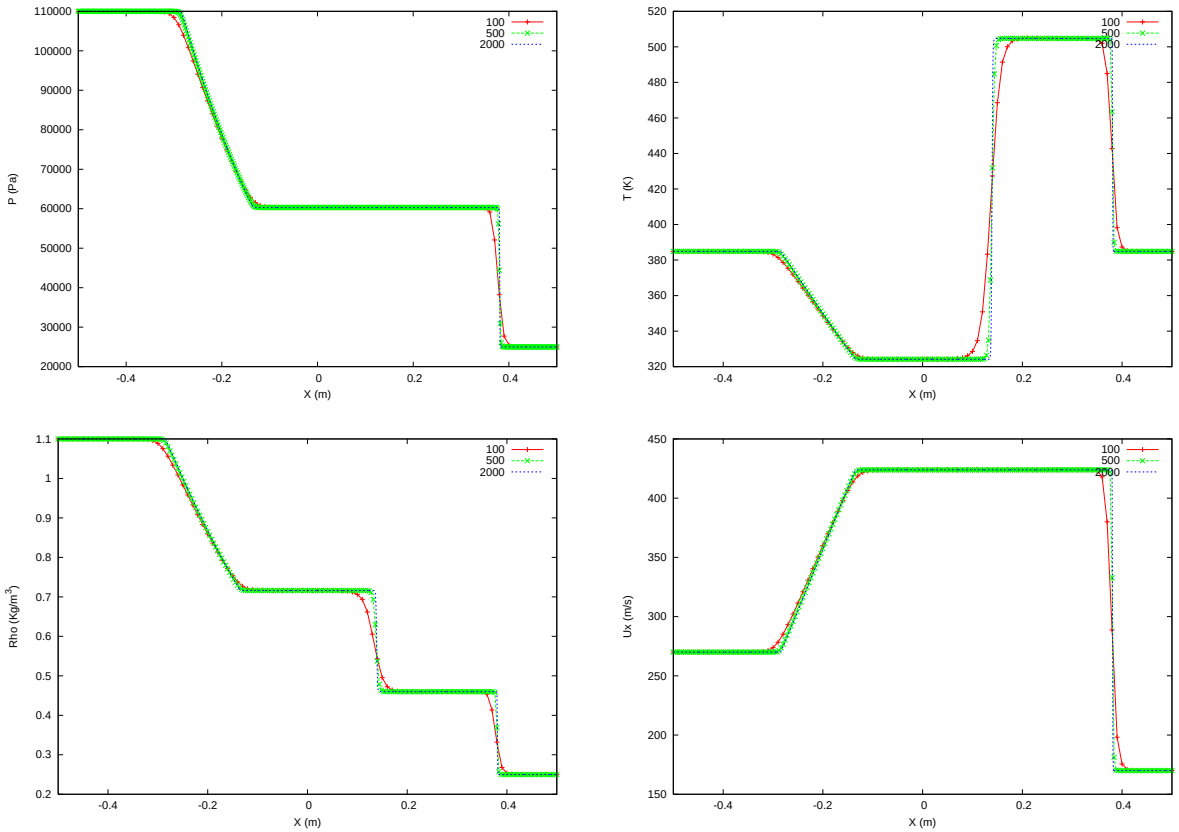


 FIG. 3.57: Résultats du test de Deiterding (#4) à t=0,08. Schéma WENO d'ordre 5.

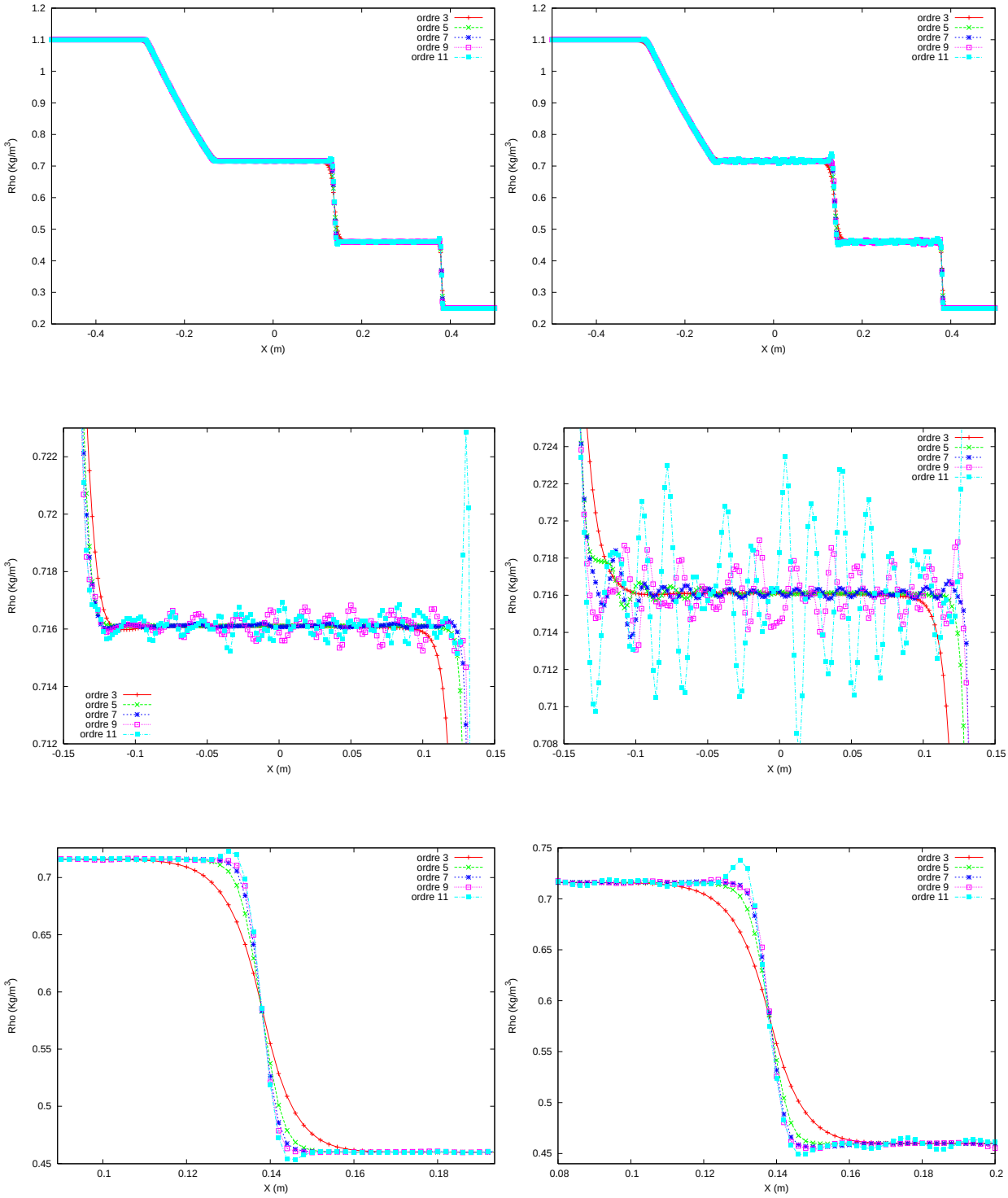


FIG. 3.58: Profil de densité du test de Deiterding à t=0,08. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

Synthèse

Ces cas test nous ont permis de mettre en évidence les comportements du schéma WENO en fonction de l'ordre et du type de reconstruction. La formulation directe est à proscrire pour tous ces cas. Avec la reconstruction caractéristique, les discontinuités de contact sont bien résolues et le schéma WENO donne des résultats satisfaisants sur les cas test sévères. Si on souhaite un schéma robuste, on choisira le schéma d'ordre 5 avec la reconstruction #4, en revanche on privilégiera le schéma d'ordre 9 couplé à la reconstruction #4 pour plus de précision. Ces test ne sont pas des cas réels et en pratique les schémas WENO ne seront pas confrontés à des problèmes aussi sévères.

3.7.2 Tests 1D bi-espèces : tests d'Abgrall et Karni

Les exemples suivants illustrent les difficultés numériques rencontrées par le schéma de discrétisation lors de simulations d'écoulements multi-espèces à γ variable. Ils démontrent également la capacité du schéma couplé à la méthode de Larouturrou à gérer ces difficultés. Ces tests numériques sont issus de [1]. Comme pour les cas mono-espèces, nous avons réalisé ces tests dans un domaine de longueur L_x=1 avec trois maillages (N_x=100, N_x=500 et N_x=2000). Les conditions aux limites sont de type symétrie. Le nombre CFL est de 0,3.

Test 1

Les conditions initiales de ce tube à choc sont données dans le tableau 3.15. La solution analytique de ce problème consiste en une détente, une discontinuité de contact et un choc. Le front d'espèce est situé au niveau de la discontinuité de contact.

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1	0,125
u	0	0
p	1	0,1
γ	1,6	1,2

Tab. 3.15: Données initiales du test 1 d'Abgrall et Karni.

La simulation est arrêtée à t=0,2. Les figures 3.60 et 3.59 montrent les profils des variables primitives et de γ pour le schéma d'ordre 5 couplé aux reconstructions #1 et #4. La discontinuité de contact n'est pas correctement résolue avec la reconstruction directe : elle engendre des oscillations sur les profils de vitesse et de γ à l'abscisse x=0,18. Les figures 3.61 à 3.63 confirment le mauvais comportement induit par l'utilisation de la formulation #1 avec les schémas WENO des autres ordres (oscillations importantes sur la température au niveau de la discontinuité de contact). La figure 3.64 met en évidence l'amélioration des résultats avec la méthode de Larrouturou pour la reconstruction #2. La reconstruction #3 apparaît être la plus précise sur l'évaluation du profil de densité mais elle ne parvient pas à maintenir une vitesse uniforme à travers la discontinuité de contact. L'association de la méthode de Larrouturou avec la reconstruction caractéristique corrige en partie ce défaut dont souffrent les autres reconstructions. On obtient également une résolution plus précise et une meilleure prédiction des profils de densité, température et vitesse avec la reconstruction #5 qu'avec la reconstruction #4. Néanmoins, on

remarque peu de différence sur le profil de fraction massique de l'espèce 1.

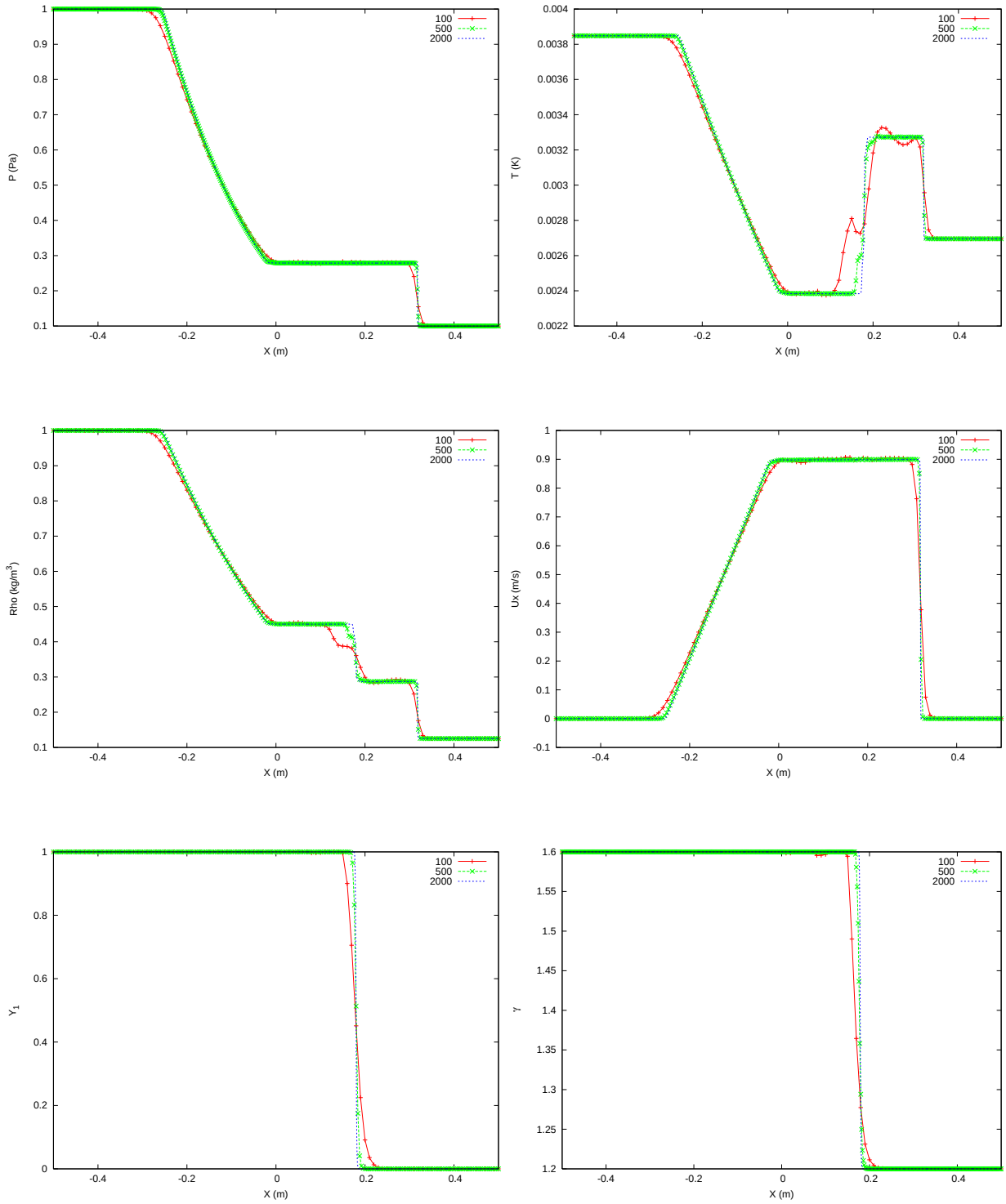


FIG. 3.59: Résultats du test 1 d'Abgrall et Karni (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

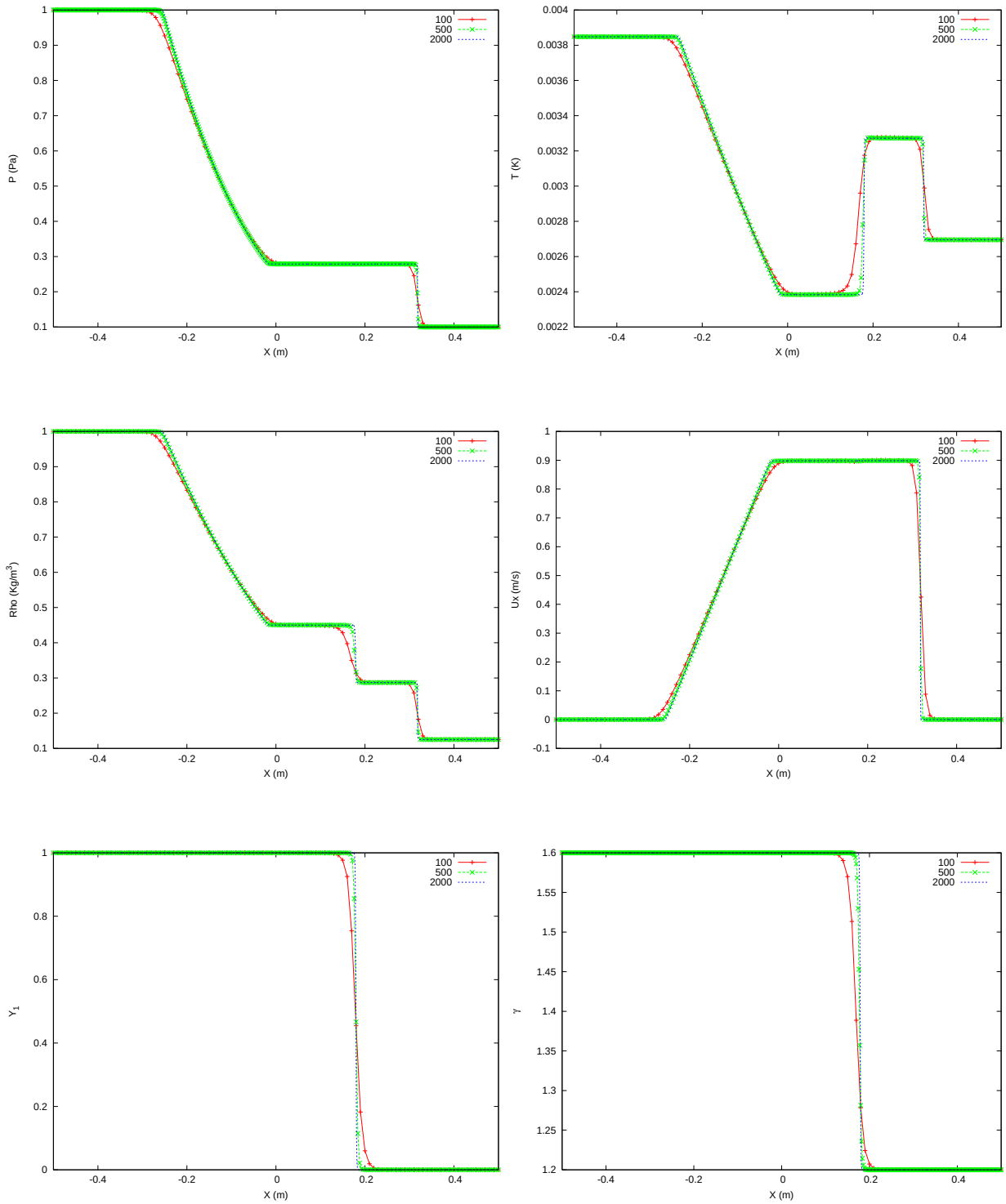


FIG. 3.60: Résultats du test 1 d'Abgrall et Karni (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

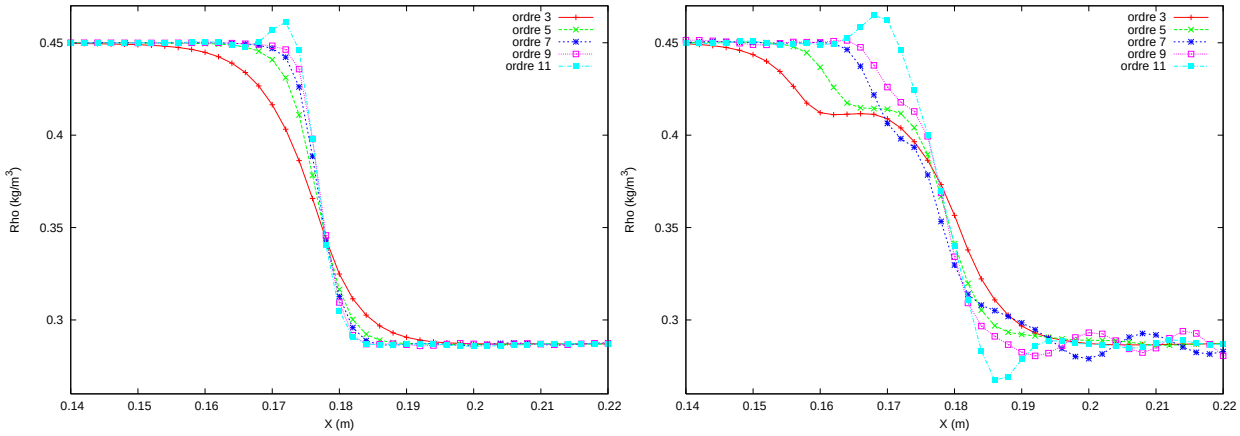


FIG. 3.61: Profil de densité du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

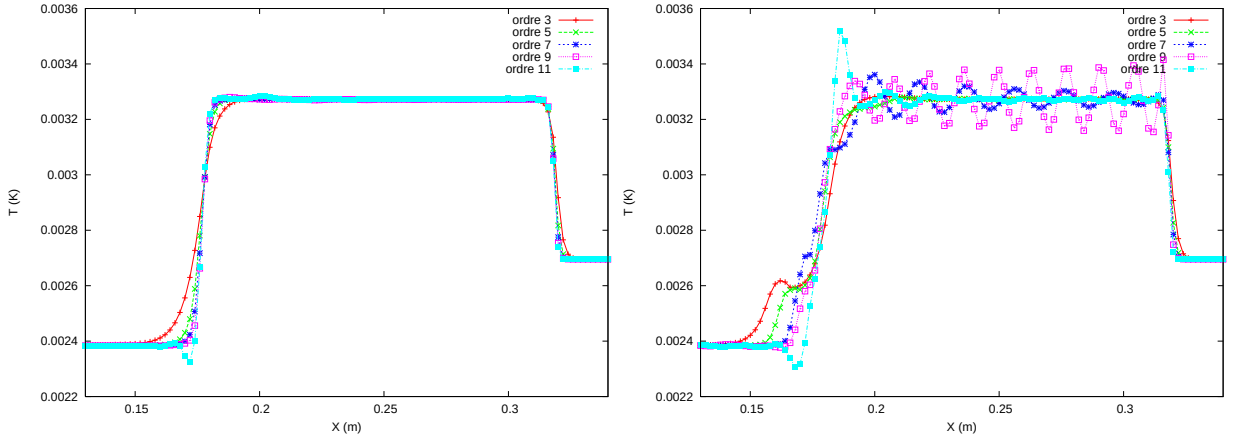


FIG. 3.62: Profil de température du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

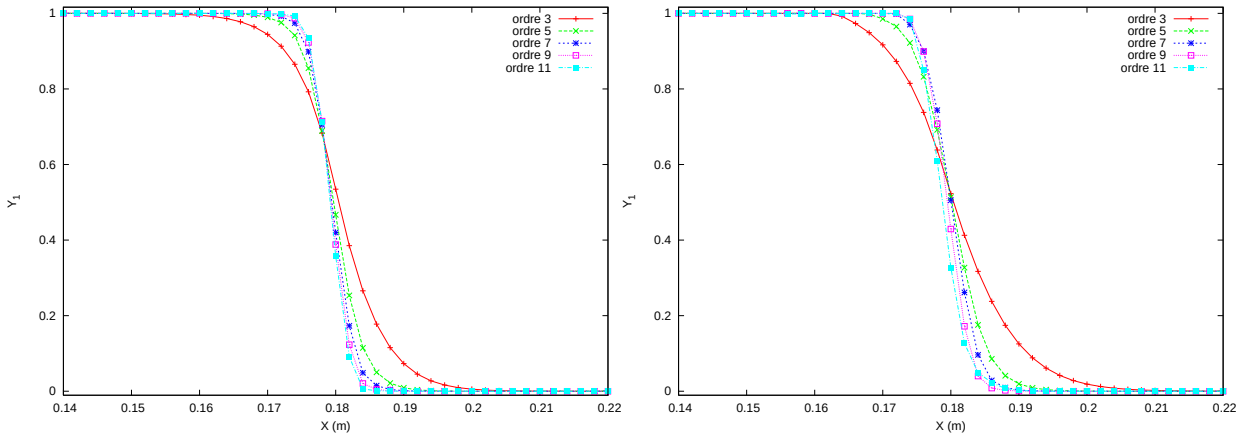


FIG. 3.63: Profil de fraction massique de l'espèce 1 du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

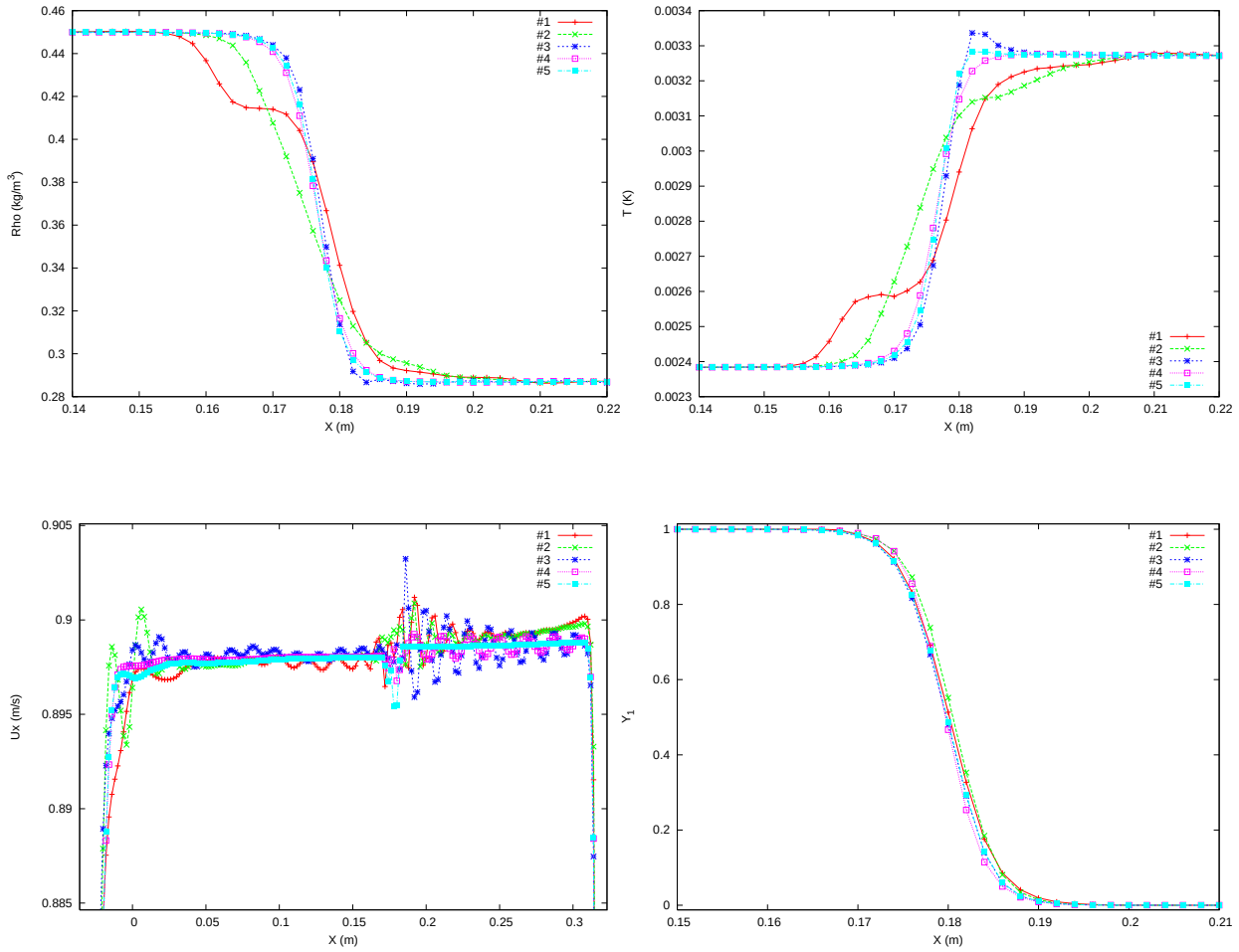


FIG. 3.64: Résultats du test 1 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. Schéma WENO d'ordre 5.

Test 2

Ce cas test met en évidence le problème d'oscillations de pression au voisinage d'une discontinuité de contact matérielle. Les conditions initiales sont données dans le tableau 3.16.

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	0,1	1
u	1	1
p	1	1
γ	1,4	1,6

TAB. 3.16: Données initiales du test 2 d'Abgrall et Karni.

La simulation est arrêtée à t=0,2. La difficulté de ce test est de résoudre précisément les discontinuités de densité, de température et de fraction massique en maintenant la vitesse et la pression uniformes à travers cette discontinuité. Les figures 3.66 et 3.65 montrent que le schéma WENO d'ordre 5, s'il prédit de façon assez précise le profil de densité et de température quelle que soit la reconstruction, conduit à une solution oscillatoire sur les profils de vitesse et de pression. L'amplitude de ces oscillations est plus importante avec la reconstruction #1. En outre, on note que le raffinement du maillage atténue ces oscillations mais ne parvient pas à les faire disparaître complètement.
Les figures 3.67 à 3.69 montrent les profils de densité, pression et fraction massique de l'espèce 1 pour les différents ordres du schéma WENO. On constate qu'une montée en ordre du schéma WENO permet d'augmenter la précision de résolution de la discontinuité de densité et de température mais cause des oscillations plus importantes sur la pression. L'utilisation de la méthode de Larrouturou ne pallie ce défaut voire l'amplifie pour la reconstruction #3 (fig. 3.70). Seul le profil de fraction massique est résolu plus précisément avec l'utilisation de cette méthode (reconstruction #5).
Aucun remède à ce problème n'ayant été implémenté, on constate que quel que soit le cas, la pression ne reste pas constante au voisinage de la discontinuité de contact lorsque γ est variable. Néanmoins l'utilisation d'un schéma d'ordre 5 avec la reconstruction #5 permet d'atténuer l'amplitude des oscillations.

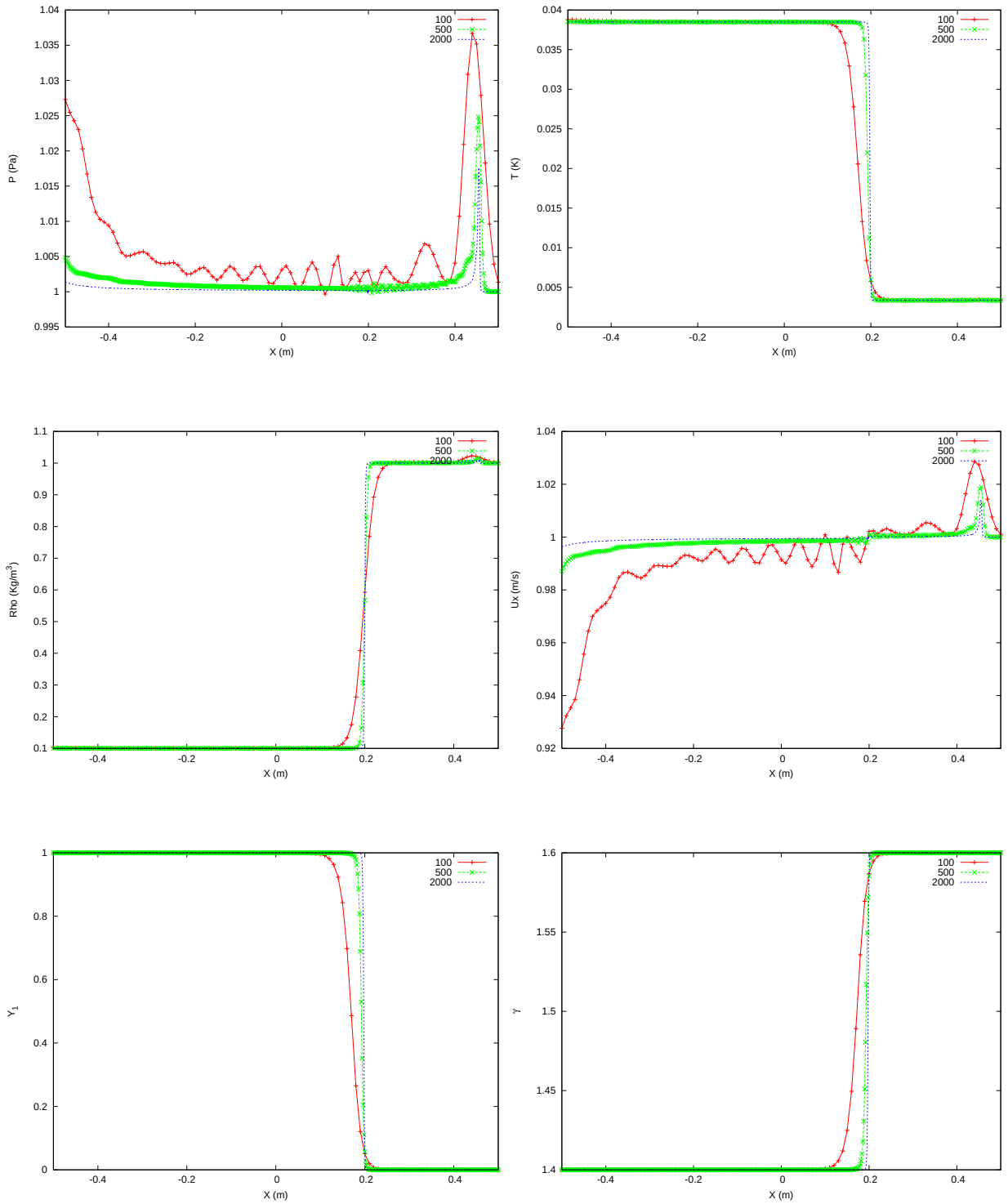


FIG. 3.65: Résultats du test 2 d'Abgrall et Karni (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

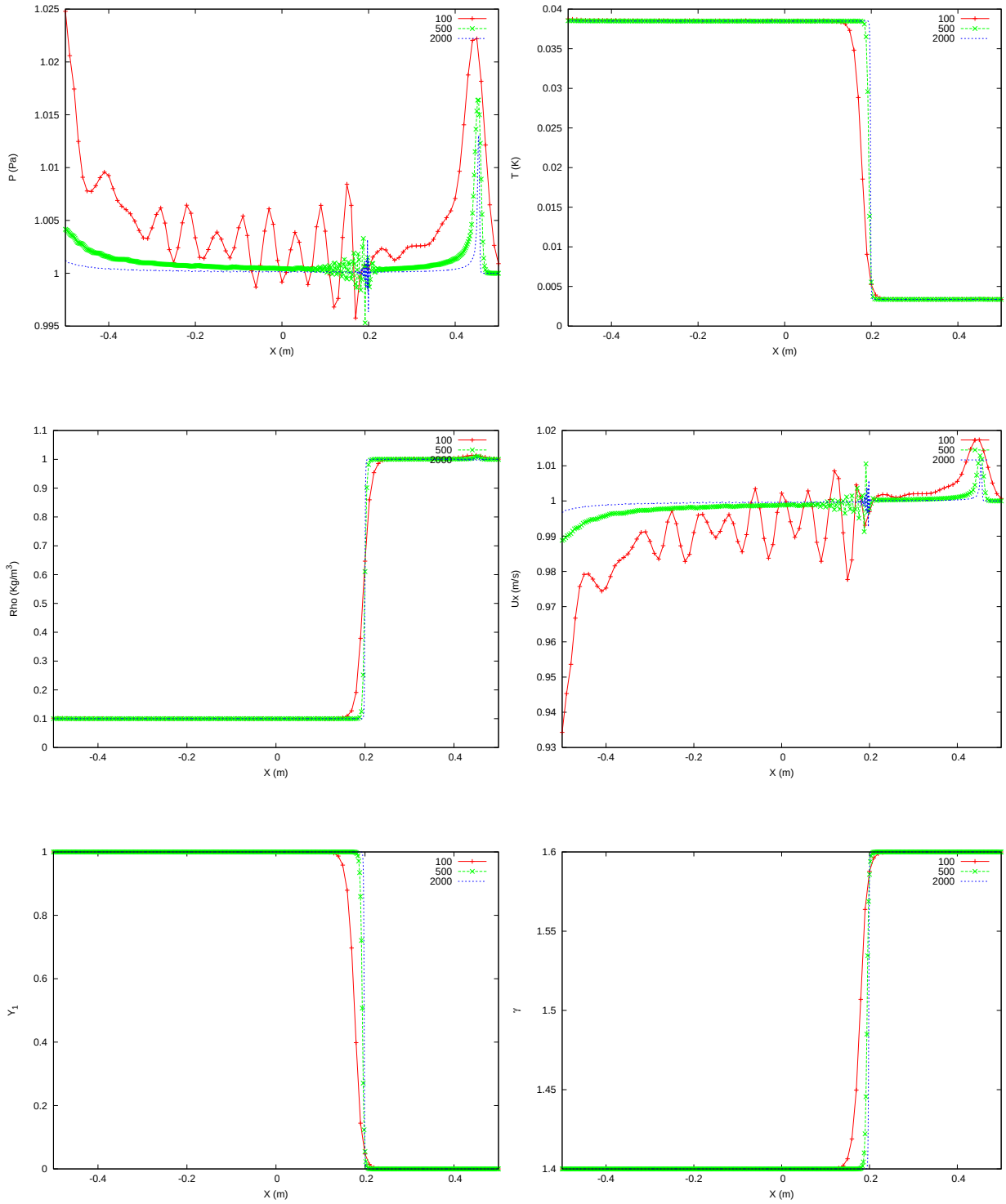


FIG. 3.66: Résultats du test 2 d'Abgrall et Karni (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

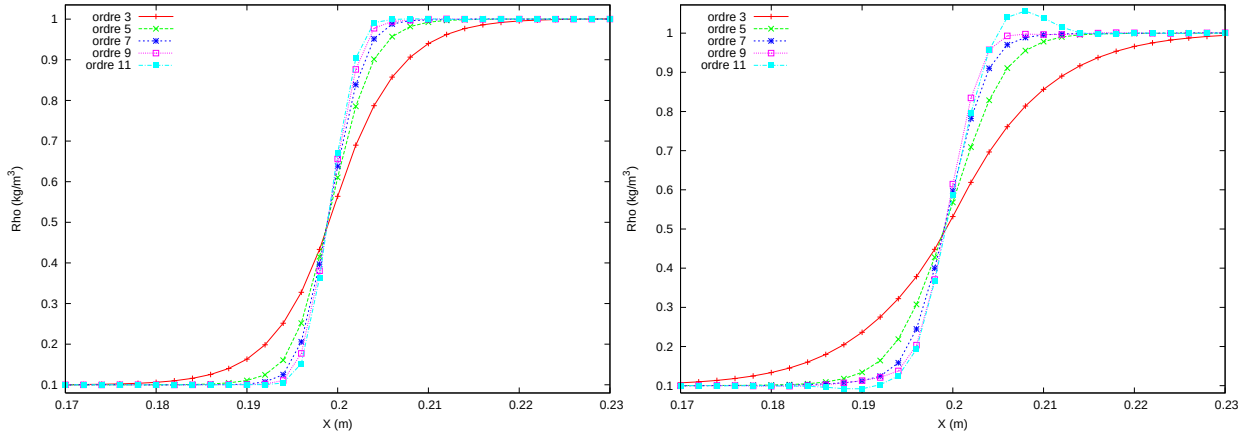


FIG. 3.67: Profil de densité du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

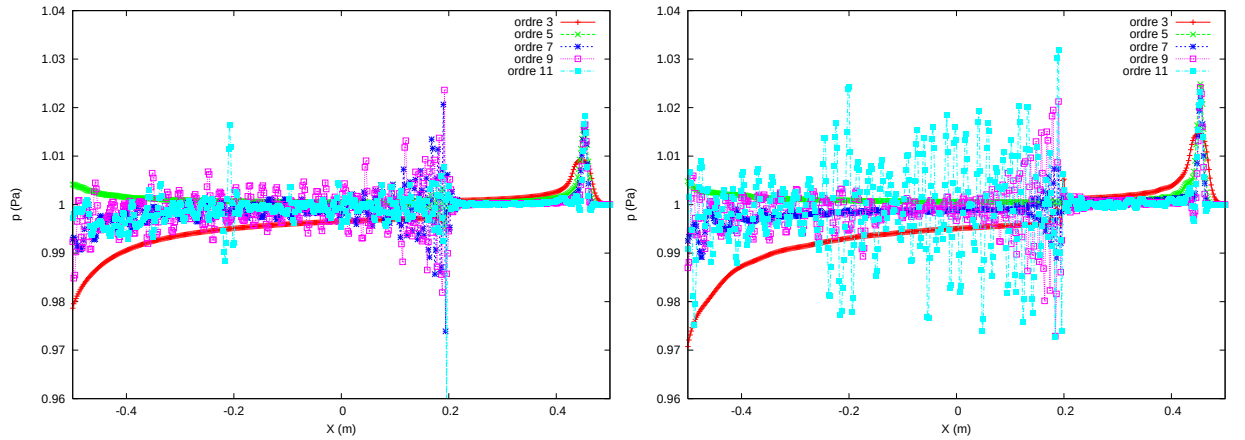


FIG. 3.68: Profil de pression du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

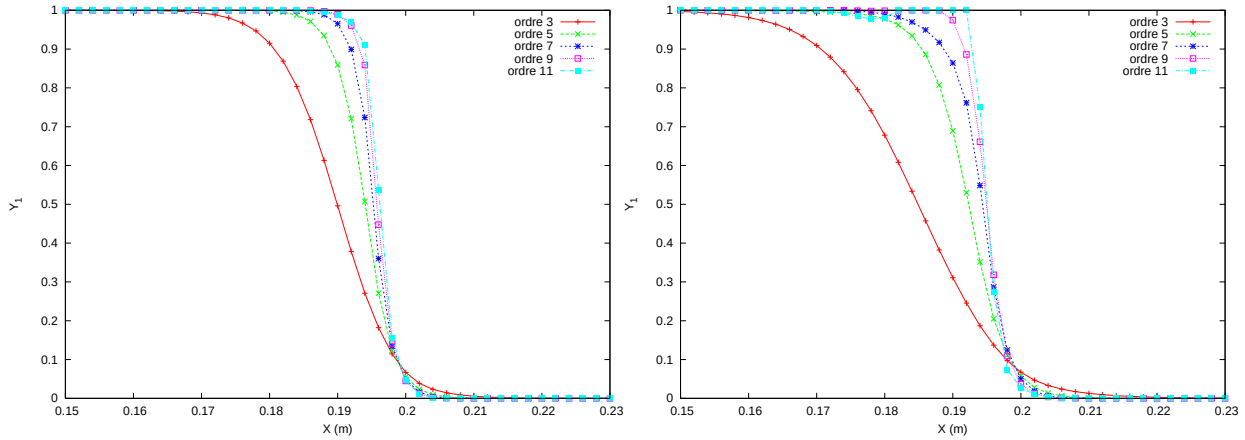


FIG. 3.69: Profil de fraction massique de l'espèce 1 du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

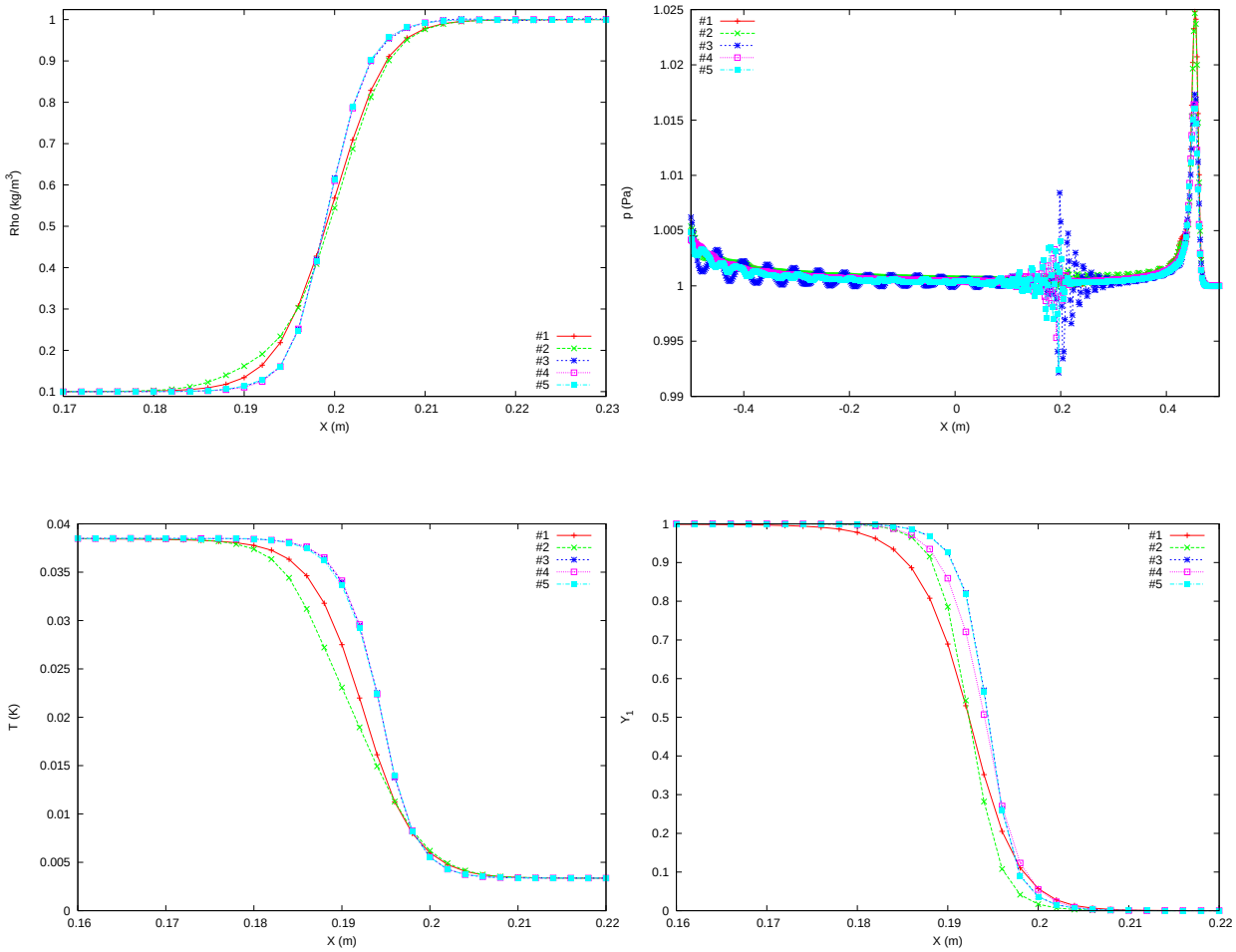


FIG. 3.70: Résultats du test 2 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. Schéma WENO d'ordre 5.

Test 3

Le dernier exemple de tube à choc multi-espèces correspond au tube à choc de Sod bi-espèce :

x	$x < 0,5L_x$	$x > 0,5L_x$
ρ	1	0,125
u	0	0
p	1	0.1
γ	1,4	1,6

TAB. 3.17: Données initiales du test 3 d'Abgrall et Karni.

La solution analytique est similaire à celle du tube à choc de Sod mono-espèce (détente à droite, discontinuité de contact et choc à gauche) avec une discontinuité de fraction massique. Les résultats sont présentés à t=0,2. Les figures 3.72 et 3.71 montrent que le schéma WENO d'ordre 5 donne de très bons résultats sur ce type de problème avec la reconstruction #4. La formulation directe affiche encore une fois quelques difficultés à résoudre la discontinuité de contact. Un zoom sur les profils de densité (fig. 3.73) et de température (fig. 3.74) met en évidence des oscillations d'amplitude croissante avec la montée en ordre du schéma WENO. La répartition de la fraction massique de l'espèce 1 est bien évaluée par les schémas d'ordre supérieur à 5 (fig. 3.75). La figure 3.76 montre une atténuation des oscillations de température avec la reconstruction #5. Néanmoins, les profils de densité et de fraction massique sont prédits de façon plus précise par la reconstruction #4.

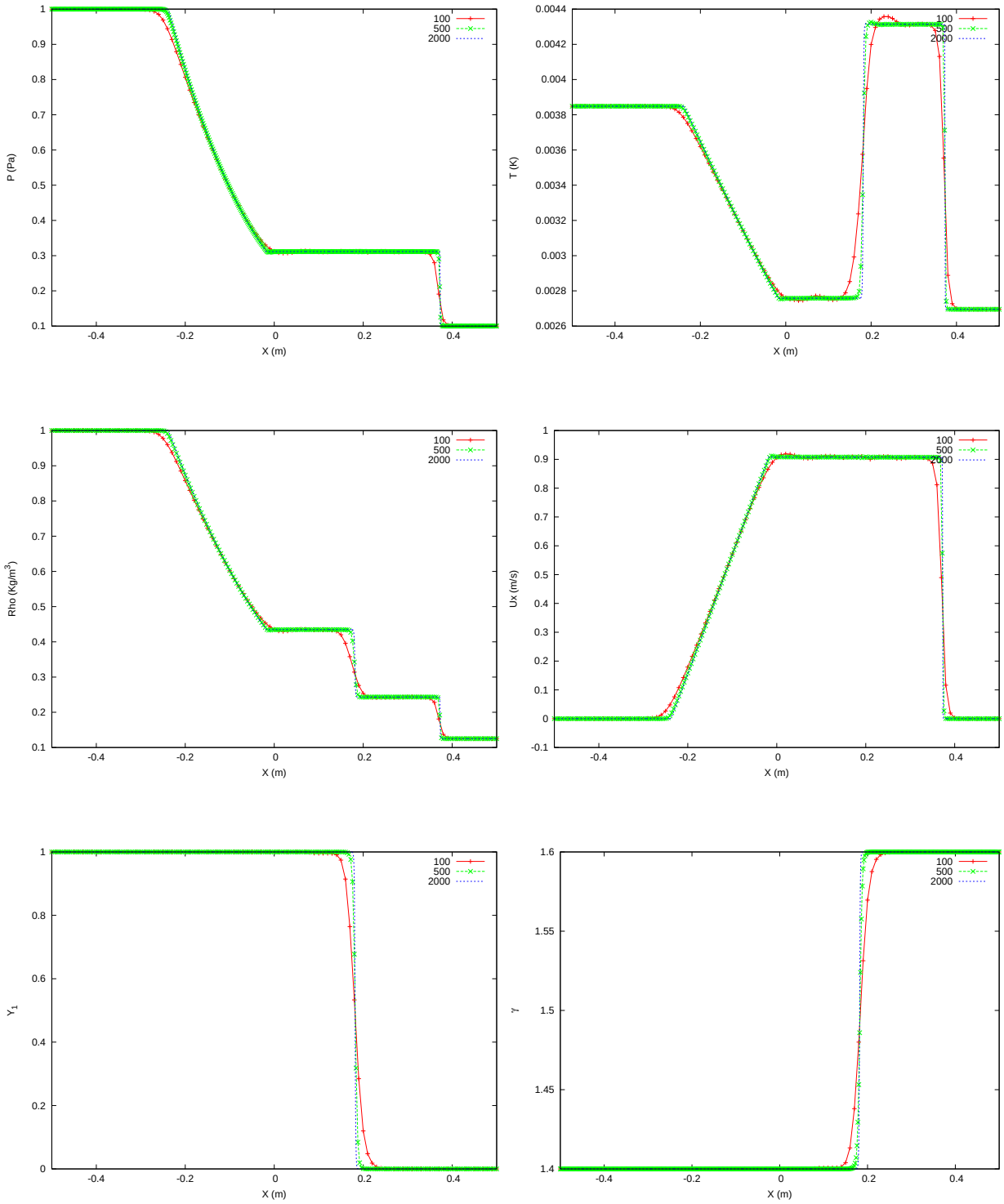


FIG. 3.71: Résultats du test 3 d'Abgrall et Karni (#1) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

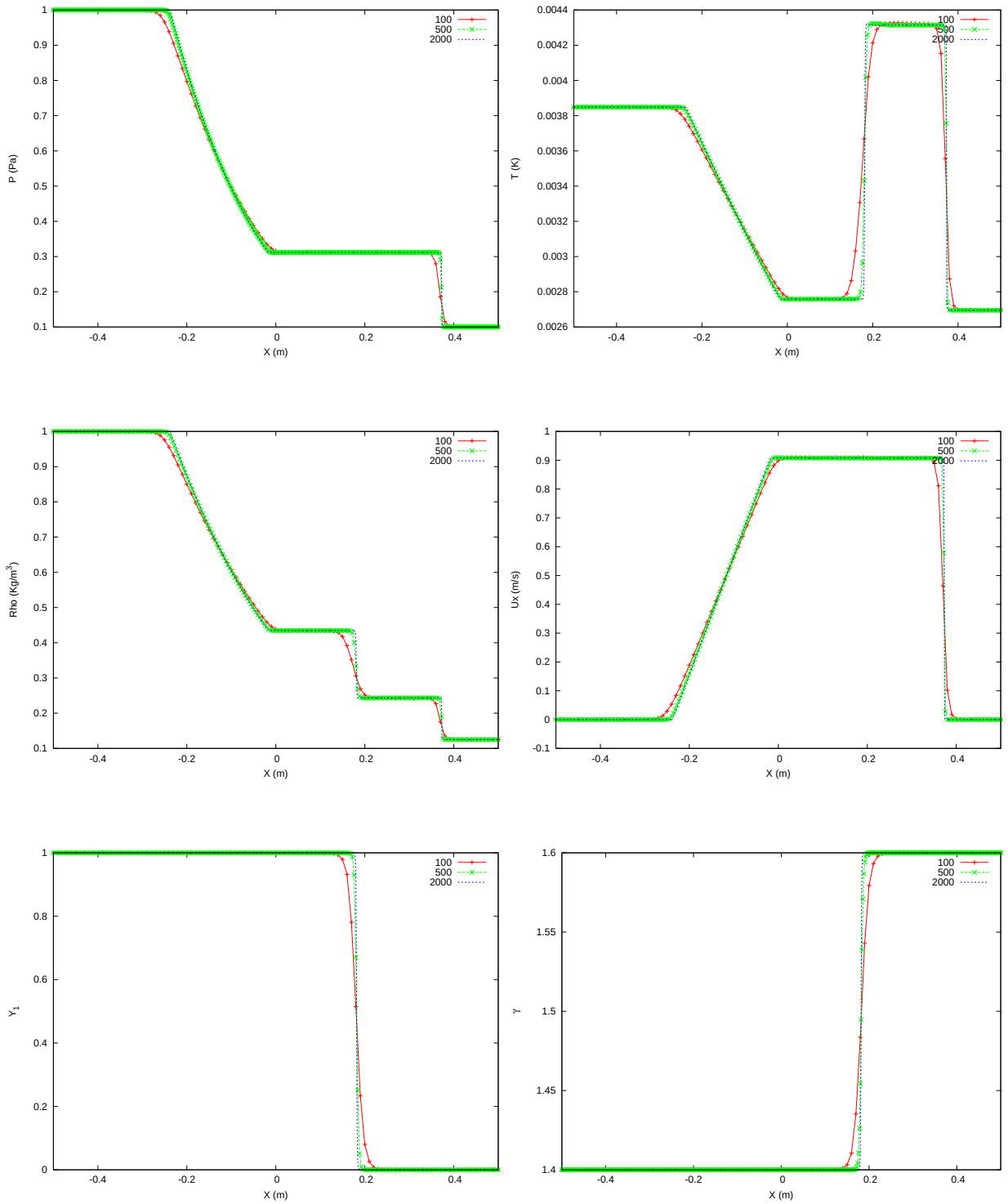


FIG. 3.72: Résultats du test 3 d'Abgrall et Karni (#4) à t=0,2. Schéma WENO d'ordre 5.

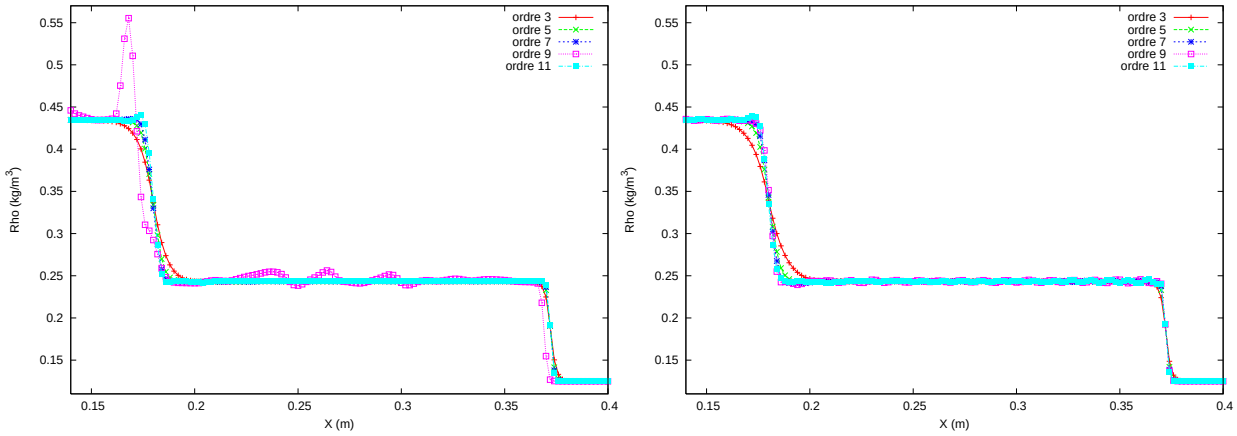


FIG. 3.73: Profil de densité du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

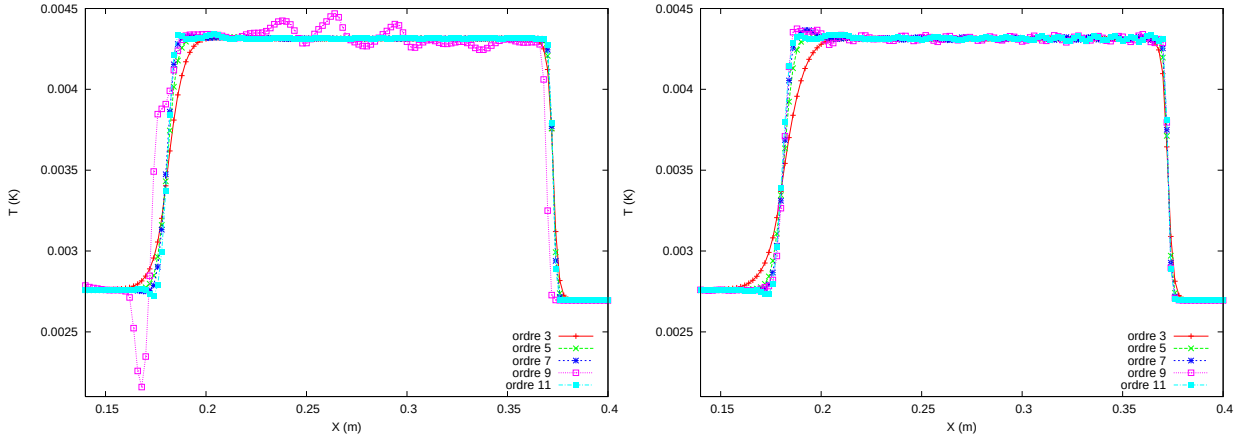


FIG. 3.74: Profil de température du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

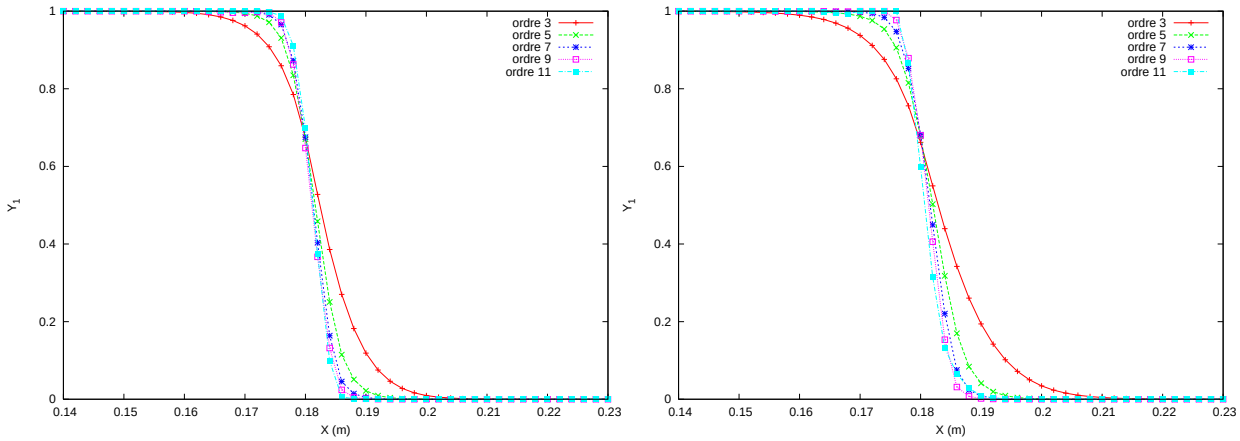


FIG. 3.75: Profil de fraction massique de l'espèce 1 du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. À gauche (#4) et à droite (#1).

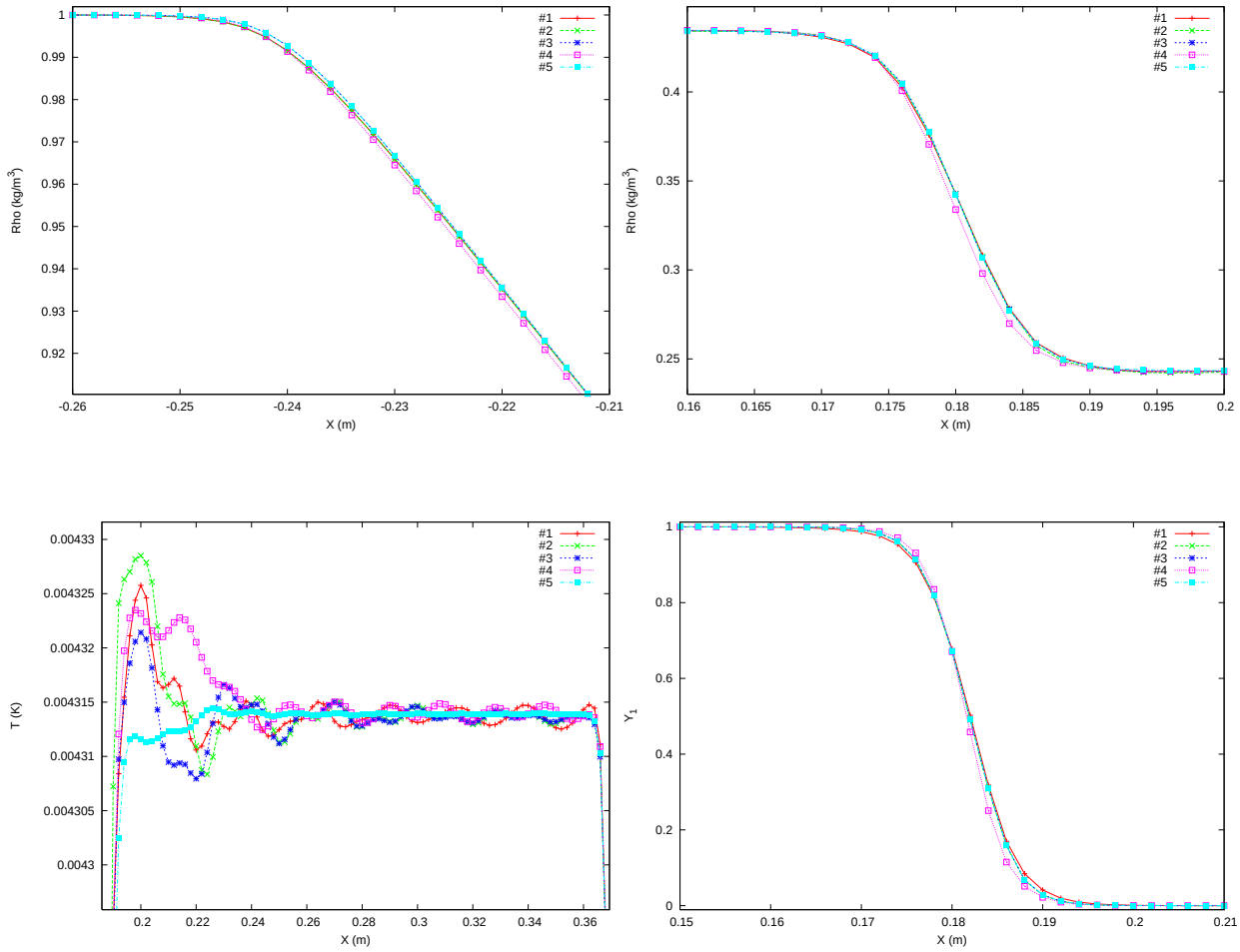


FIG. 3.76: Résultats du test 3 d'Abgrall et Karni à t=0,2. N_x=500. Schéma WENO d'ordre 5.

3.7.3 Synthèse

Sur ces tests multi-espèces, la méthode de Larrouturou en association avec le schéma WENO d'ordre 9 donne des résultats satisfaisants est à privilégier. Le test 2 a mis en évidence le problème du γ variable à travers les oscillations de pression près des discontinuités de contact. Des solutions existent pour résoudre cette difficulté ([2], [45]) mais elles sont assez complexes et ne sont pas générales. Pour cette étude, on choisit de ne pas s'occuper de ce problème.

3.7.4 Tests 2D de Riemann

Les six tests choisis sont une série de problèmes de Riemann en deux dimensions collectés par Liska. Ces cas test ont été proposés par [112] et utilisés par [81] et [85]. Ces tests sont réalisés dans un domaine carré $(x, y) \in ([0, 1] \times [0, 1]$ de résolution 400×400. Le domaine de calcul est initialement séparé en quatre quadrants par les lignes $x = 1/2$ et $y = 1/2$. Chaque problème de Riemann est défini par un état constant dans chaque quadrant (densité (ρ), pression (p), composante de la vitesse sur x (u) et composante de la vitesse sur y (v)). Les conditions initiales dans les quadrants gauche/droite et haut/bas sont données dans le tableau 3.18, t représente le temps final de la simulation. Ces cas test sont mono-espèces et on considère le rapport des chaleurs spécifiques comme constant, soit $\gamma = 1,4$.
La solution analytique de ces tests 2D n'est pas connue mais les solutions des quatre problèmes de Riemann sur les quatre quadrants se décomposent exactement en une onde (choc, détente ou ligne de glissement). Notons D la détente, C le choc et G la ligne de glissement. Alors, commençant coté gauche et allant dans le sens des aiguilles d'une montre, les cas présentés se décomposent de la manière indiquée dans le tableau 3.18.

test	gauche				droite				t	état
	p	ρ	u	v	p	ρ	u	v		
3	0,3	0,5323	1,206	0	1,5	1,5	0	0	0,3	CC
	0,029	0,138	1,206	1,206	0,3	0,5323	0	1,206	CC	
4	0,35	0,5065	0,8939	0	1,1	1,1	0	0	0,25	CC
	1,1	1,1	0,8939	0,8939	0,35	0,5065	0	0,8939	CC	
6	1	2	0,75	0,5	1	1	0,75	-0,5	0,3	GG
	1	1	-0,75	0,5	1	3	-0,75	-0,5	GG	
12	1	1	0,7276	0	0,4	0,5313	0	0	0,25	GC
	1	0,8	0	0	1	1	0	0,7276	GC	
15	0,4	0,5197	-0,6259	-0,3	1	1	0,1	-0,3	0,2	GD
	0,4	0,8	0,1	-0,3	0,4	0,5313	0,1	0,4276	GC	
17	1	2	0	-0,3	1	1	0	-0,4	0,3	CG
	0,4	1,0625	0	0,2145	0,4	0,5197	0	-1,1259	GD	

TAB. 3.18: État initial dans les quadrants gauche/droite-haut/bas des problèmes 2D de Riemann.

Les résultats de ces tests sont illustrés comme dans l'article de Liska et Wendroff [89] : la pression est représentée par la couleur, la densité par les contours noirs et la vitesse par les vecteurs. Cette représentation permet d'analyser comment les schémas WENO d'ordre 1 à 11 se comportent sur ces cas test.

test 3 de Liska

Les résultats du test 3 sont présentés sur la figure 3.77, la densité est tracée avec 32 contours noirs de 0,16 à 1,71 par pas de 0,05. Les quatre chocs 1D qui composent ce cas test sont bien résolus par tous les schémas WENO. La structure de base de la région où ces quatre chocs 1D interagissent est similaire pour tous les schémas excepté celui d'ordre 1. On observe également sur ces figures des puits de densité rémanent de la condition initiale. Ces puits sont d'autant plus élevés que l'ordre du schéma l'est. On remarque également que les simulations avec la reconstruction #1 génèrent plus d'oscillations de densité que celle avec la reconstruction #4.

test 4 de Liska

Les résultats du test 4 sont présentés sur la figure 3.78, la densité est tracée avec 29 contours noirs de 0,52 à 1,92 par pas de 0,05. Hormis le schéma WENO d'ordre 1 avec la reconstruction #1, tous les autres schémas donnent des résultats semblables. Les quatre chocs 1D qui composent ce test sont bien résolus par les schémas d'ordre 3 à 11. Les structures de la région d'interaction sont symétriques pour tous les schémas quelle que soit la méthode de reconstruction. On constate, comme pour le test 3, des oscillations de densité pour les schémas d'ordre élevé et pour la reconstruction #1. Néanmoins ces schémas permettent d'obtenir des structures plus fines dans la région englobant les deux chocs courbes.

test 6 de Liska

Les résultats du test 6 sont présentés sur la figure 3.79, la densité est tracée avec 29 contours noirs de 0,25 à 3,05 par pas de 0,05. Les lignes de glissement qui composent ce test sont mieux résolues par les schémas d'ordre élevé. Le schéma WENO d'ordre 9 avec la reconstruction #1 génère des oscillations de densité dans la partie supérieure du domaine. On constate également des artefacts de densité alignés sur le maillage dans la partie haute pression.

test 12 de Liska

Les résultats du test 12 sont présentés sur la figure 3.80, la densité est tracée avec 32 contours noirs de 0,54 à 1,7 par pas de 0,04. La difficulté de ce test est la résolution des discontinuités de contact stationnaires présentes en bas à gauche du domaine. Les schémas WENO donnent tous une solution symétrique par rapport à la diagonale (0,0)(1,1) et résolvent les discontinuités de contact assez précisément (sauf le schéma d'ordre 1). Comme pour le test 4, on observe des oscillations de densité au milieu du domaine pour les schémas d'ordre supérieur à 7 couplés à la reconstruction #1.

test 15 de Liska

Les résultats du test 15 sont présentés sur la figure 3.81, la densité est tracée avec 29 contours noirs de 0,43 à 0,99 par pas de 0,02. La sévérité de ce test tient dans la résolution des discontinuités de contact mobiles qui bordent la région d'état constant dans la partie basse gauche du domaine. Ce test peut-être comparé au test unidimensionnel 6 de Liska. Les simulations avec la

reconstruction #4 produisent des résultats plus fins que celles avec la reconstruction #1.

test 17 de Liska

Les résultats du test 17 sont présentés sur la figure 3.82, la densité est tracée avec 30 contours noirs de 0,53 à 1,98 par pas de 0,05. Les deux points difficiles de ce cas test sont la résolution de la discontinuité de contact située en x=0,5 m et la ligne de glissement. On constate que la reconstruction #4 conduit à des lignes de contact plus fines que la reconstruction #1. Cette figure met également en évidence un artefact horizontal de densité qui vient perturber les contours de densité au milieu du domaine pour les schémas WENO d'ordre 3 à 11. Ce phénomène est plus important pour les configurations générant moins de dissipation numérique (schéma d'ordre élevé, reconstruction #1). Enfin, on remarque des oscillations de densité engendrées par les schémas d'ordre 9 et 11 avec la reconstruction directe.

Synthèse

En conclusion, ces tests 2D de Riemann reproduisent correctement, dans la plupart des cas, les résultats obtenus par Liska avec divers schémas. La méthode #4 donne des résultats mieux résolus et avec moins d'oscillations que la méthode #1. On préférera choisir des schémas WENO d'ordre supérieur à 5.

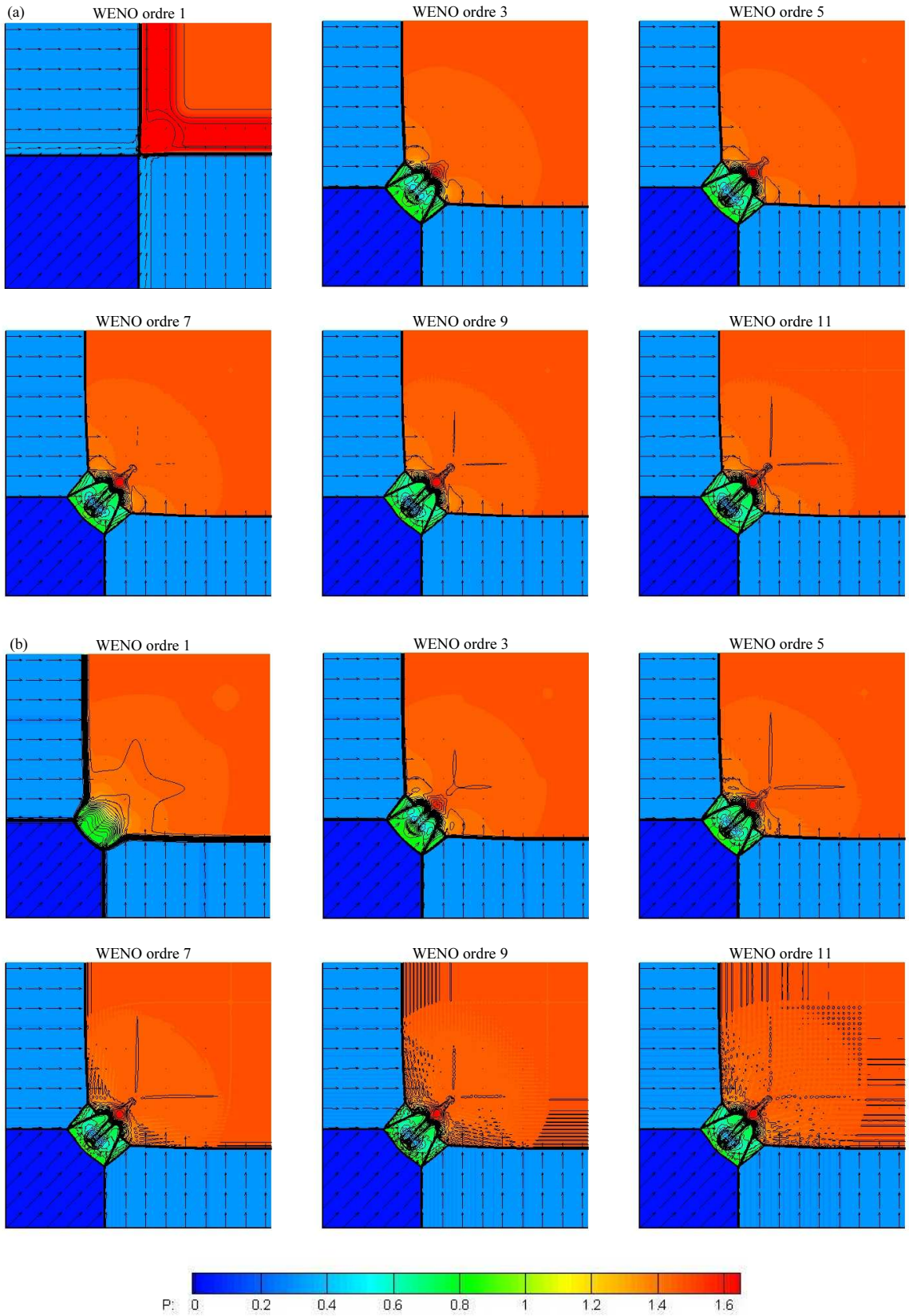


FIG. 3.77: Résultats du test 3 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b).

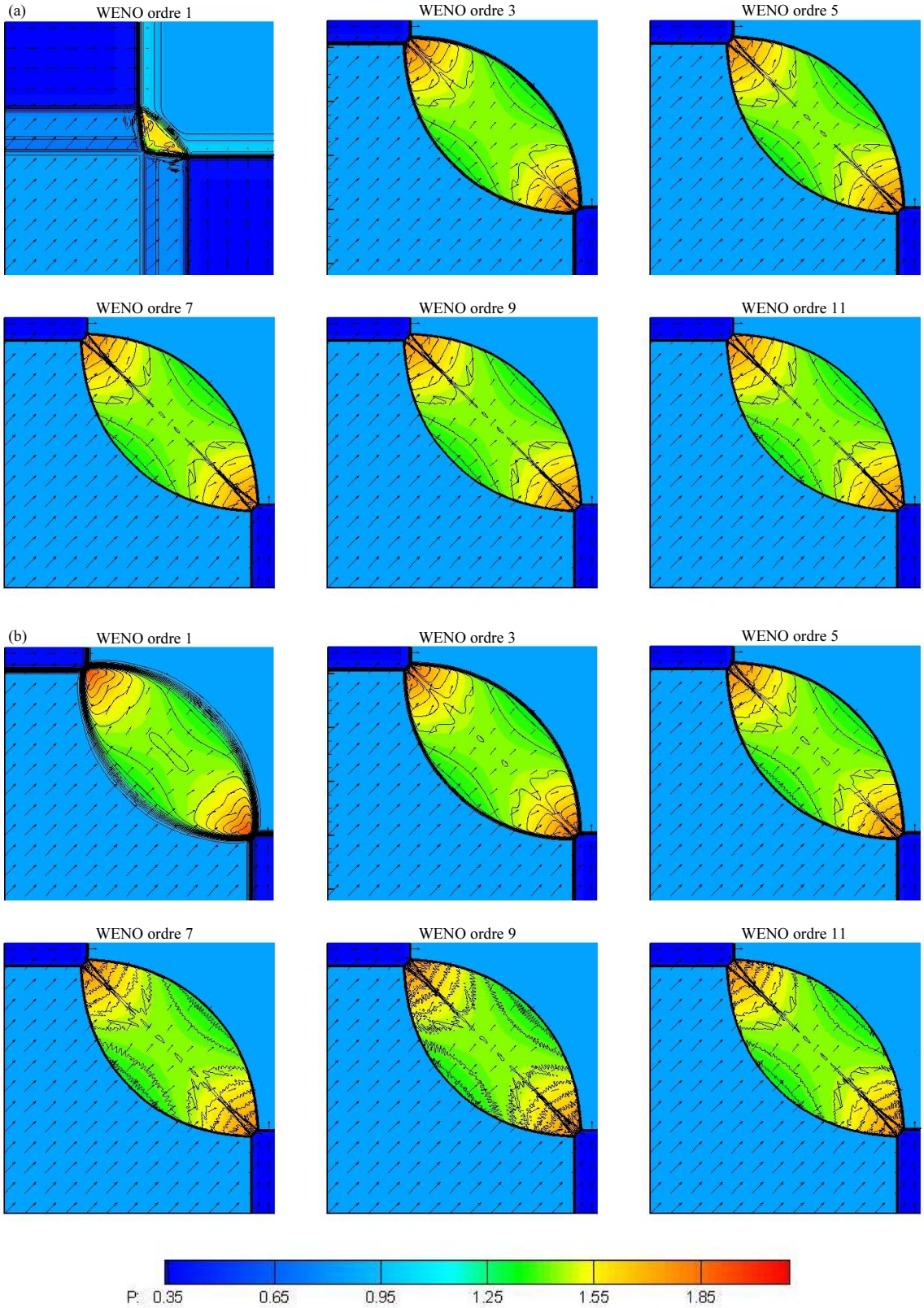


FIG. 3.78: Résultats du test 4 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b).

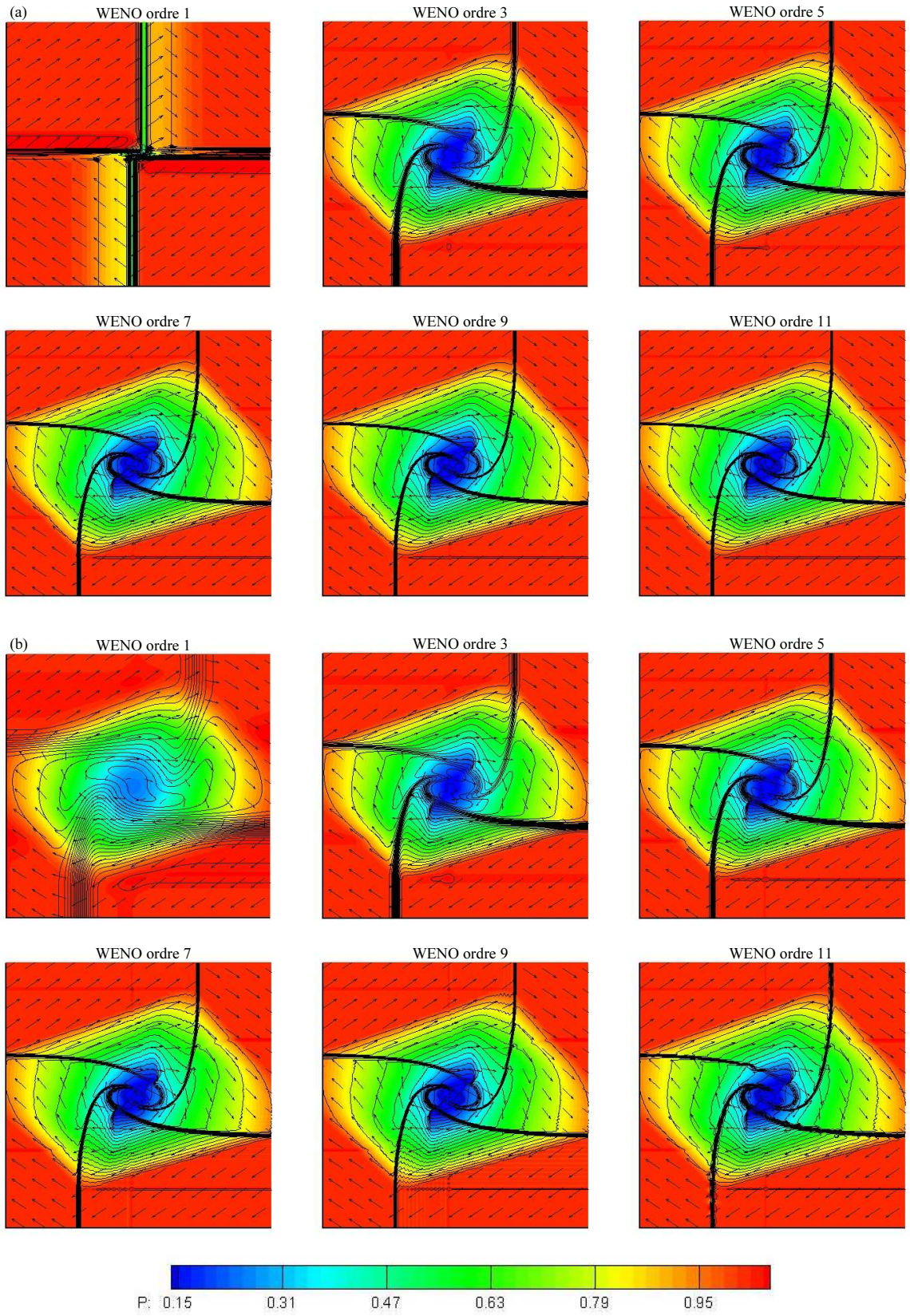


FIG. 3.79: Résultats du test 6 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b).

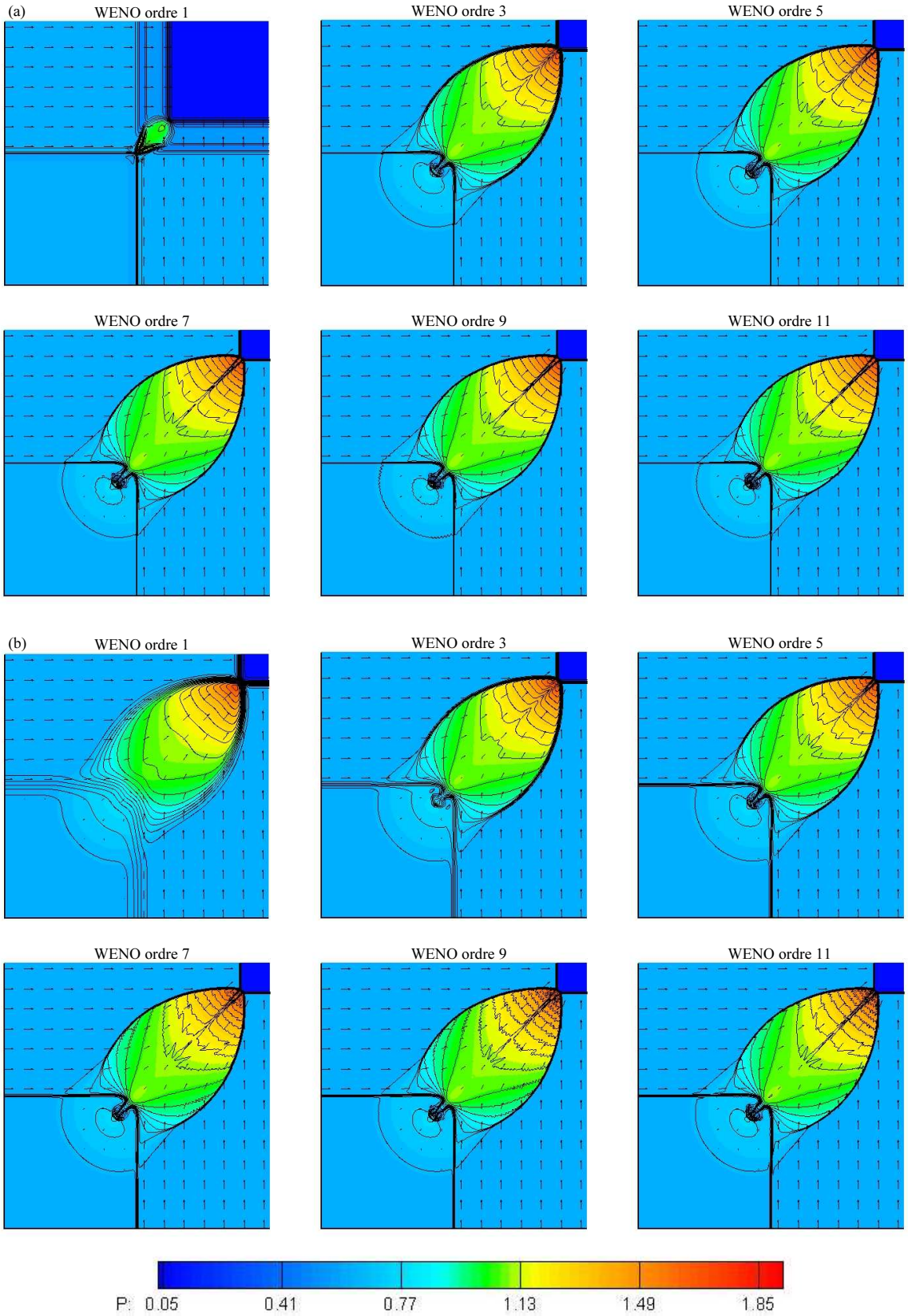


FIG. 3.80: Résultats du test 12 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b).

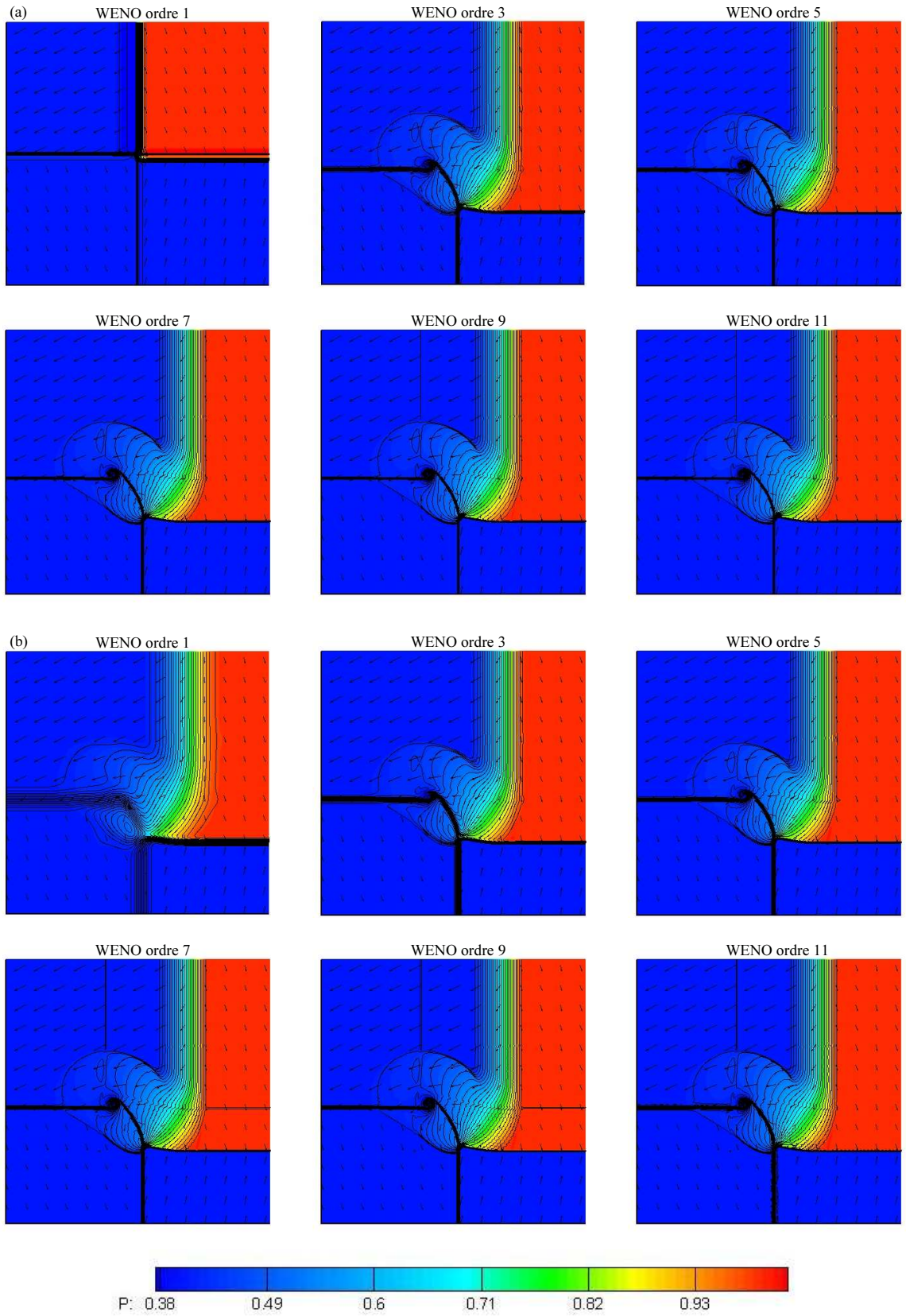


FIG. 3.81: Résultats du test 15 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b).

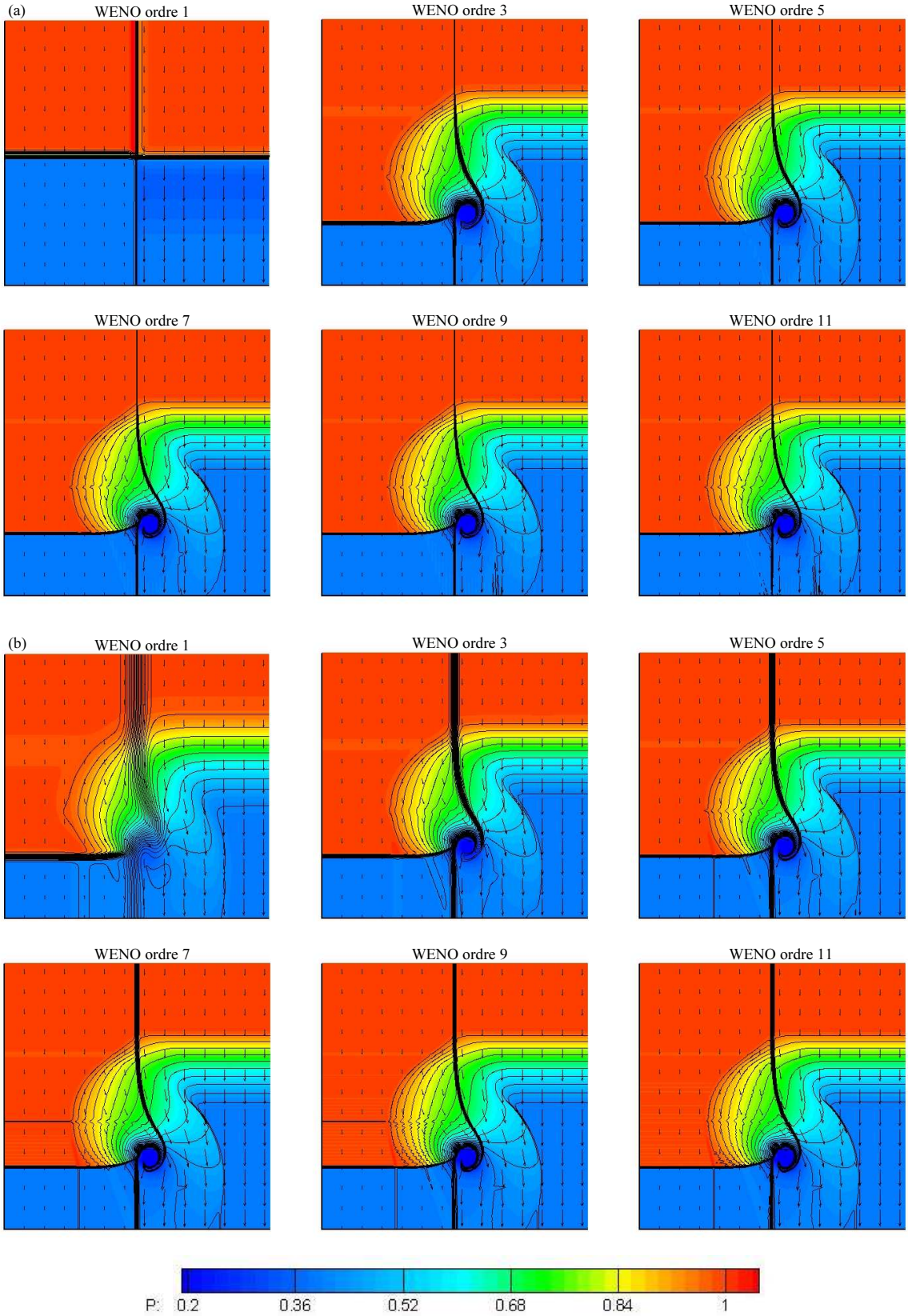


FIG. 3.82: Résultats du test 17 de Liska pour les reconstructions #4 (a) et #1 (b).

3.8 Cas test numériques évolués

Dans cette section, on présente des cas test 2D Euler multi-espèces. Ces test sont dit « évolués » car ils prennent en compte les termes sources comme la gravité pour la simulation des instabilités de Rayleigh-Taylor et les termes sources chimiques pour la simulation de flammes cylindriques.

3.8.1 Instabilités de Rayleigh-Taylor

Les instabilités de Rayleigh-Taylor sont des instabilités gravitationnelles. Elles apparaissent à l'interface de deux fluides de densités différentes dans un champ gravitationnel dirigé du fluide lourd vers le léger. Ces instabilités ont notamment été étudiées par Dimonte et Schneider [36] et par Dimonte *et al.* [37]. À travers ces simulations Euler 2D, notre objectif est de tester les effets de la résolution et de l'ordre du schéma WENO sur une simulation multi-espèce avec prise en compte de terme source dans les équations. Dans un premier temps, nous présentons les résultats de simulations mono-espèces, puis nous testons l'influence du type de reconstruction choisie à travers des simulations multi-espèces.

Simulations mono-espèces

On considère un gaz de rapport de chaleurs spécifiques constant γ=1,4 dans un tube de dimension $L_x = 0,25$ m $\times$ $L_y = 1$ m. Le maillage est uniforme et tel que $N_y = 4 \times N_x$. Initialement, le système est au repos et séparé en deux parties de densité différentes (figure 3.83).
La gravité est dirigée vers le bas et agit du gaz lourd vers le gaz léger ($g_y = -1$) afin de

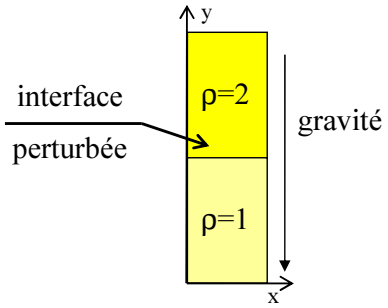


FIG. 3.83: Condition initiale de la simulation des instabilités de Rayleigh-Taylor.

rendre le système instable. Initialement, on impose un équilibre hydrostatique en supposant que la densité est constante de part et d'autre de l'interface. La pression s'exprime alors par $p = p_0 + \rho g_y(y - \frac{L_y}{2})$, où p_0 est la pression à l'interface ($p_0 = 2$ bar). La température est évaluée à partir de la loi des gaz parfaits (1.10). Le système est déstabilisé à l'interface par une perturbation mono-mode imposée sur la vitesse transverse : $U_y = -0,025cos(\frac{2\pi}{L_x}x)$.
Ces simulations Euler 2D ont été réalisées avec les schémas WENO d'ordre 3, 5, 7 et 9 couplés aux reconstructions directe (#1) et caractéristique (#4). Quatre maillages ont été testés : N_x=30, 60, 120 et 240 points. Les conditions aux limites sont de type symétrie. Enfin, l'avancement en temps est réalisé avec le schéma Runge-Kutta TVD d'ordre 3, le pas de temps est variable et tel que le nombre CFL soit égal à 0,6.

Tous les résultats sont présentés à t=2,65 s. Sur les figures 3.84 et 3.85 est tracée la densité par des iso-contours variant de 0,85 à 2,45 par pas de 0,05 kg.m^{-3} pour les différentes résolutions et pour les deux reconstructions.

Ces figures montrent une structure caractéristique de cette instabilité dont la géométrie rappelle celle d'un champignon. Celle-ci s'est formée lors du croisement du gaz lourd avec le gaz léger et est ponctuée de structures plus fines dont l'aspect dépend de la viscosité. On constate également le développement d'instabilités de Kelvin-Helmotz sur les « bras ». Ces simulations Euler ne présentent pas d'échelle de coupure physique et peuvent être vue comme une mesure indirecte de la viscosité numérique générée par le schéma WENO.
On observe ainsi que l'augmentation de l'ordre du schéma ou du nombre de points de maillage favorisent une meilleure résolution de l'enroulement global et l'apparition de structures fines plus nombreuses et de plus petites échelles. On constate par exemple que le schéma WENO d'ordre 3 (K=2) couplé à la reconstruction directe sur le maillage le plus fin donne des résultats proches de ceux issus de la simulation avec le schéma d'ordre 9 (K=5) avec la reconstruction caractéristique sur le maillage le moins raffiné. Cette constatation corrobore les conclusions de l'analyse linéaire effectuée sur les différents schémas WENO (sec. 3.6). Pour un même résultat, le choix du maillage et de l'ordre du schéma peut alors se faire sur les temps de calcul CPU. Or, la montée en ordre coûtant beaucoup moins cher que l'augmentation de la taille du maillage, on préférera des schémas d'ordre élevé associés à des maillages peu raffinés pour obtenir des résultats de qualité comparable. De plus, comme cela avait été mis en évidence avec les cas test élémentaires (§ 3.7), ces figures montrent que la reconstruction #4 donne des résultats présentant des structures plus fines et plus nombreuses (car moins dissipative) que la reconstruction #1.

Simulations multi-espèces

On considère le même problème que dans le cas mono-espèce mais cette fois avec un mélange binaire O_2/N_2 de coefficients thermodynamiques constants et de rapport de chaleurs spécifiques γ=1,4. Les résultats des simulations utilisant les reconstructions #1, #3 et #4 sont présentés sur les figures 3.86 à 3.88 à travers le champ de densité à t=2,65 s.
Les reconstructions #3 et #4 sont en bonne concordance et donnent de meilleurs résultats que la reconstruction #1. De même que pour le cas précédent, on constate que l'augmentation de l'ordre et de la résolution engendrent une diminution de la dissipation numérique engendrée par le schéma WENO.

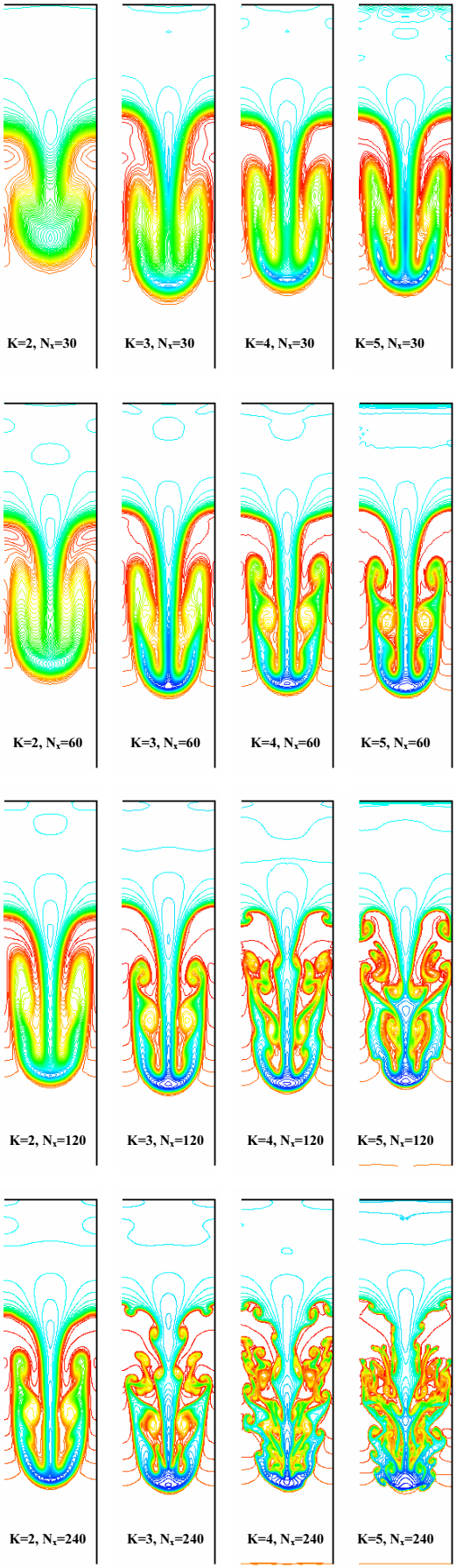


FIG. 3.84: Densité. Reconstruction #1.

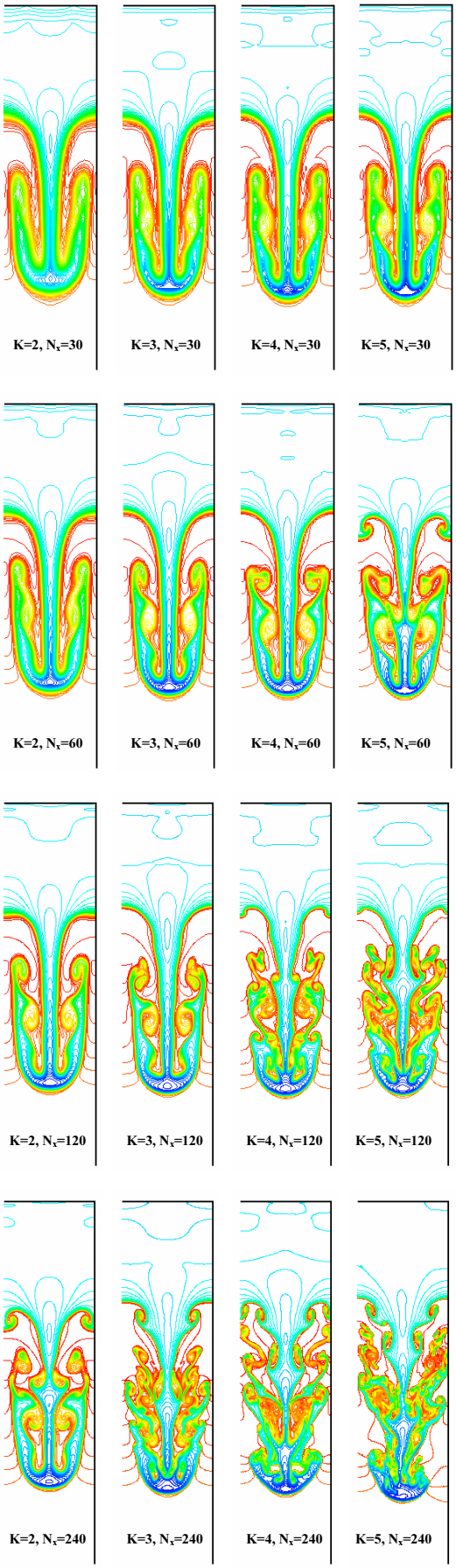


FIG. 3.85: Densité. Reconstruction #4.

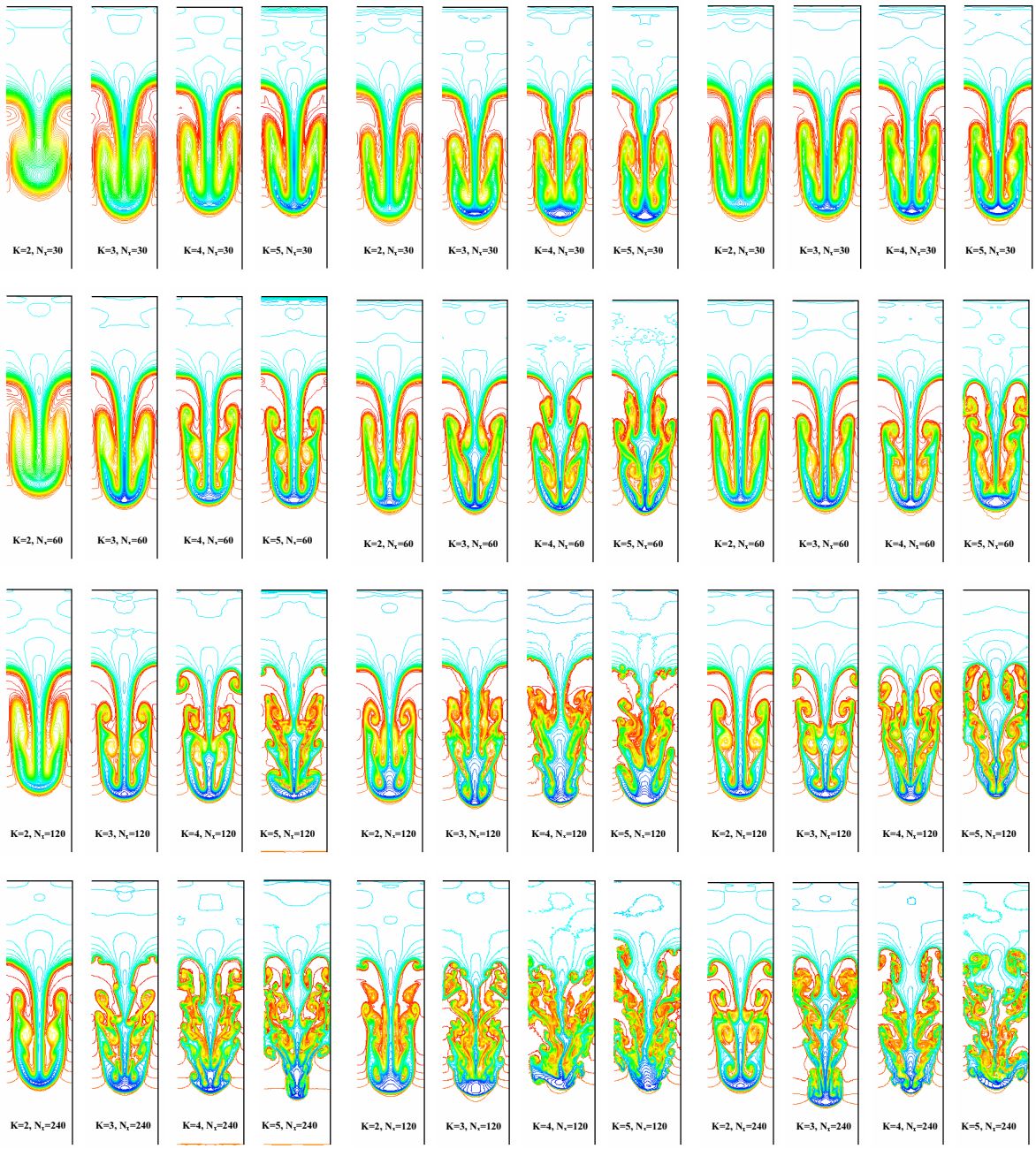


FIG. 3.86: Densité. Reconstruction #1.

FIG. 3.87: Densité. Reconstruction #3.

FIG. 3.88: Densité. Reconstruction #4.

3.8.2 Flammes cylindriques 2D

On considère une simulation bidimensionnelle Euler d'une flamme sphérique prémélangée. Ce cas test multi-espèce est une extension de la simulation de flamme laminaire de prémélange 1D (sec. 2.4.1) à une configuration 2D avec des conditions limites périodiques. La condition initiale est une section circulaire et devrait rester ainsi durant la simulation. Le calcul est réalisé sur un maillage carré uniforme 100×100 dans un domaine mesurant L_x=1 cm×L_y=1 cm. Le pas de temps est évalué pour le nombre CFL ≈ 0,2.

Les résultats sont montrés pour le schéma d'ordre 9 pour les reconstructions #2, #3, #4 et #5. Sur la figure 3.89 sont tracés les iso-contours de température variant de 300 à 2500 K par pas de 100 K.

Les fronts de flamme générés présentant des gradients assez importants, le schéma WENO exhibe un comportement dissipatif pour les résoudre. Ainsi, les approximations #2, #3 produisent des résultats non-physiques. En effet, on constate une diffusion amplifiée dans certaines directions comme le prédit l'analyse linéaire 2D (sec. 3.6). Ces effets sont moindres avec les reconstructions #4 et #5 qui donnent des résultats en bonne concordance et physiquement acceptables. On notera néanmoins que la configuration cylindrique initiale est légèrement mieux préservée quand le flux des espèces est évalué avec la méthode de Larrouturou.

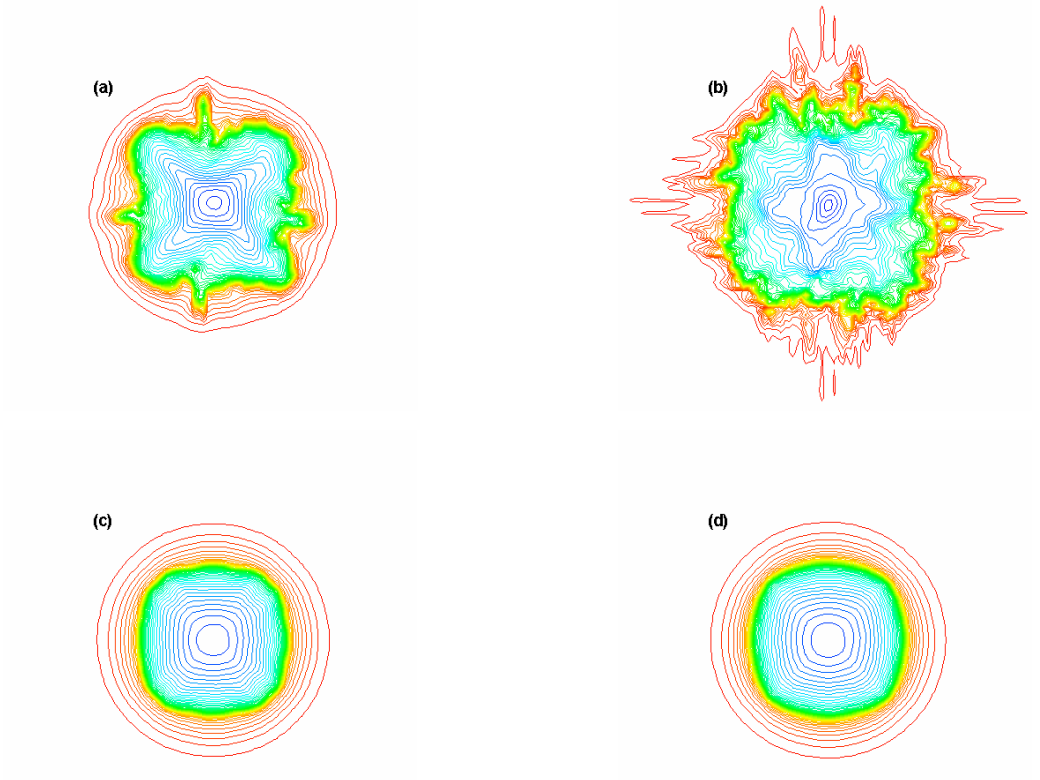


Fig. 3.89: Champ de température à t=0,1 ms pour les reconstructions #2 (a), #3 (b), #4 (c) et #5 (d).

3.8.3 Interaction choc-bulle

On illustre ici l'effet de la décomposition de flux de Lax-Friedrichs globale ou locale à travers la simulation d'une interaction entre un choc mobile et une bulle de dihydrogène. Ces simulations sont Euler et non-réactives. Les conditions initiales de ce test sont tirées de l'article de Sjögreen et Yee [120].
La figure 3.90 représente la schématisation des conditions initiales de cette simulation Euler. Le choc plan dans l'air, situé en y=0,5 cm, se déplace vers le haut et vient percuter une bulle d'H_2 dans un tube à choc de dimension 6,5×20cm. La bulle d'hydrogène, de rayon r_c=1cm, est centrée en (x ;y)=(0 ;2,75) en cm. Pour des raisons de symétrie, on ne simule l'interaction que sur la moitié droite de la bulle. L'interface de la bulle cylindrique avec l'air ambiant est définie par : $Y_{\mathrm{H}_2} = \exp(-\alpha(r/r_c)^{16})$ où r est la distance radiale du point considéré au centre de la bulle et $\alpha = 32,66$. En amont du choc, la bulle de H_2 et l'air qui l'entoure sont à une température de 1000 K et une pression de 1 bar. Les conditions en aval du choc sont déterminées par les relations de Rankine-Hugoniot sachant que le nombre de Mach dans la partie inférieure est égal à 2.
Les conditions aux limites NSCBC sont imposées en $x = 0$ avec une entrée supersonique et en $x = 20$ cm avec une sortie parfaitement non-réflective. Des conditions de symétrie sont imposées sur les deux autres frontières. Le pas de temps est fixé par un nombre CFL égal à 0,5.

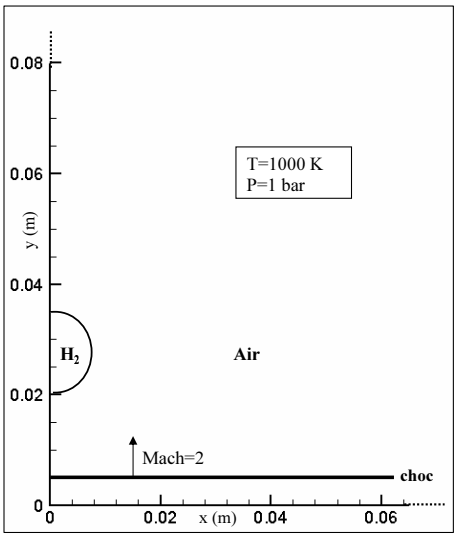


FIG. 3.90: Schéma de l'interaction choc-bulle.

On définit la norme du gradient de densité normalisée par :

$$S = exp\left(-k \times \frac{|\vec{grad}(\rho)| - |\vec{grad}(\rho)|_{min}}{|\vec{grad}(\rho)|_{max} - |\vec{grad}(\rho)|_{min}}\right) \tag{3.12}$$

où k est une constante prise égale à 15.
La figure 3.92 représente le champ de S pour les simulations avec les décompositions de Lax-Friedrichs locale (bas) et globale (haut) à différents instants. Dès t=20 ms, on constate des différences entre les deux simulations. En effet, il apparaît un gradient de densité non-physique au niveau du choc dans le prolongement vertical de la bulle d'hydrogène sur la simulation avec

décomposition globale. Les images des temps suivants nous montrent que ce gradient se propage perpendiculairement au choc sans s'atténuer. On observe le même comportement sur les champs de vitesse, de température et de pression non montrés ici. On peut délimiter deux zones dans cette simulation (fig. 3.91). Pour le calcul global, le paramètre $\alpha = max_u|f'(u)|$ dans la direction verticale est évalué dans la zone (1) par les conditions imposées dans la bulle d'hydrogène alors que dans la zone (2), ce sont les conditions dans l'air qui permettent d'estimer le paramètre α. Les vitesses du son étant différentes dans les deux milieux (H_2/air), on a donc deux paramètres α_1 et α_2 de valeurs complètement différentes. Ceci provoque une discontinuité dans le flux numérique sur y calculé à droite et à gauche de l'interface délimitant les deux zones et ainsi génère des gradients sur les variables ρ, T, P et U_y amplifiés au niveau du choc où l'effet du décentrement est essentiel. Ce phénomène numérique, qui intervient dès qu'il y a présence de deux milieux de nature différente (densité, température, vitesse) est particulièrement mis en exergue par la mobilité du choc. Une simulation avec une choc stationnaire ne mettra pas autant en évidence ce problème, la zone de gradient important étant localisée proche de celui-ci. L'utilisation d'une décomposition de flux locale, en l'occurrence restreinte au stencil local, permet de contrecarrer cette difficulté.

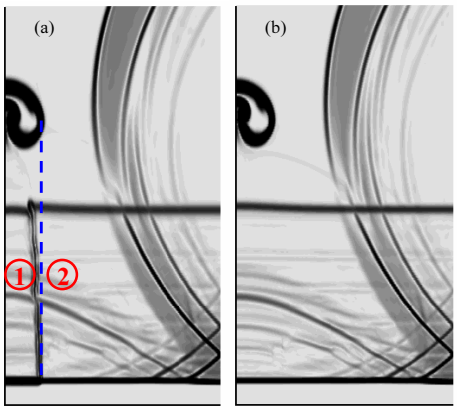


FIG. 3.91: Zoom sur le champ de S à t=150 ms : délimitation de deux zones. (a) : décomposition de flux Lax-Friedrichs globale, (b) : décomposition de flux Lax-Friedrichs locale.

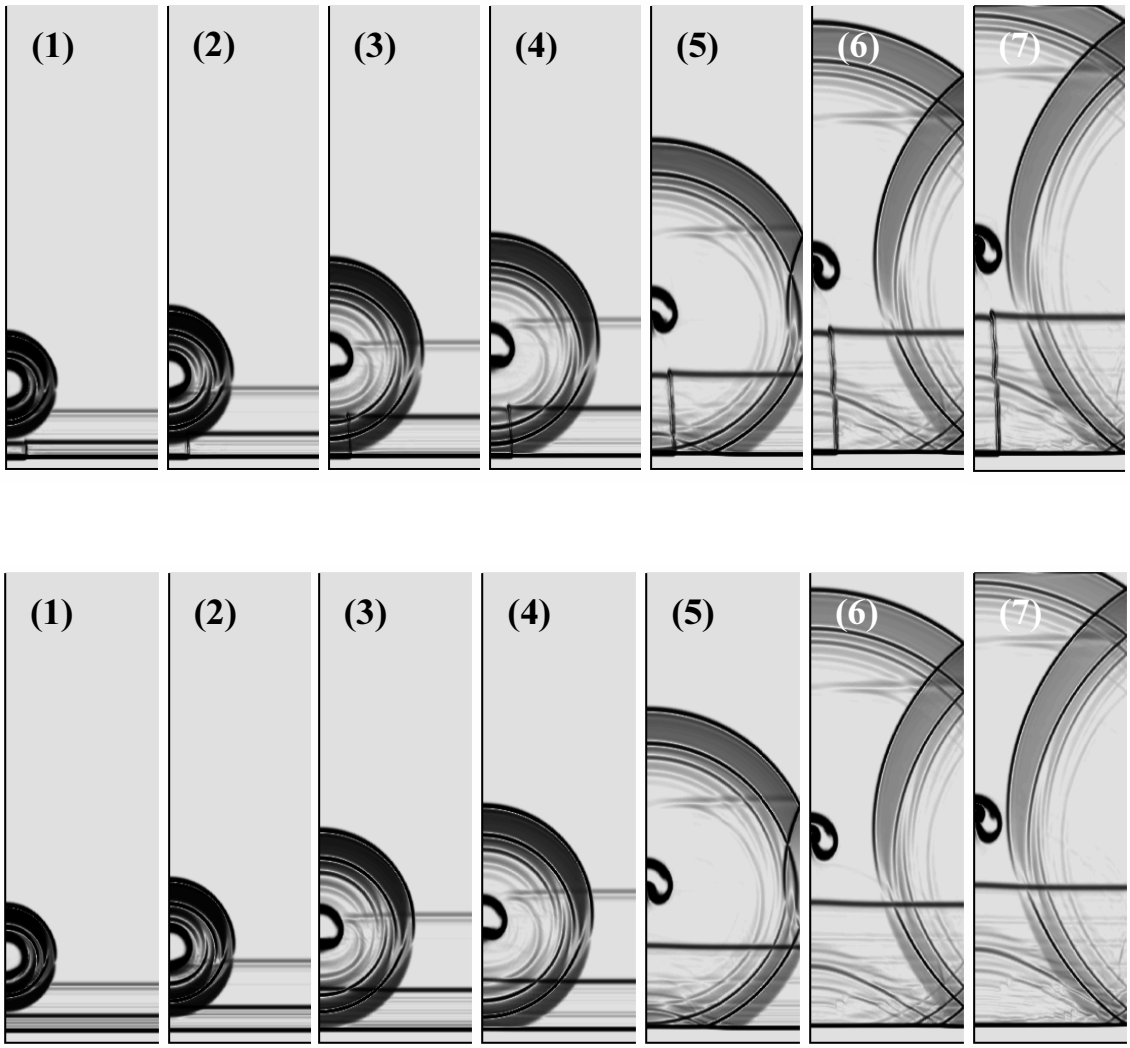


Fig. 3.92: Champ de S à différents instants : t=20 ms (1), t=30 ms (2), t=50 ms (3), t=60 ms (4), t=100 ms (5), t=150 ms (6), t=170 ms (7). En haut : décomposition de flux Lax-Friedrichs globale ; en bas : décomposition de flux Lax-Friedrichs locale.

3.8.4 Synthèse

Le couplage schéma d'ordre 9, reconstruction #5 et décomposition de flux locale est celui qui engendre les meilleurs résultats sur les différents tests présentés mais il présente l'inconvénient d'être cher en temps CPU. Une alternative, moins coûteuse et suffisante pour une première approche, serait d'utiliser un schéma WENO d'ordre 5 avec la reconstruction #4 et une décomposition de flux locale.

Chapitre 4

Comparaison des codes Compact et WENO

On compare ici les résultats produits par les diverses versions du code WENO aux valeurs de références du code Compact sur deux cas test :

- une flamme 1D de prémélange laminaire
- une flamme 2D de diffusion turbulente

Le premier cas permet une analyse immédiate des effets de la compétition entre diffusions numérique et moléculaire. Le second est une expérimentation réaliste de l'approche MILES en écoulement turbulent réactif, confrontée à une DNS.

4.1 Flamme laminaire de prémélange unidimensionnelle

On s'intéresse ici à la capacité du schéma WENO à capturer les fronts de flamme (forts gradients) et à prédire correctement les vitesses de flamme laminaire. Comme le soulignent Poinsot et Veynante [104], le modèle de transport, qui décrit la façon dont les molécules diffusent vers le lieu où elles réagissent, joue un rôle au moins aussi important dans le calcul de la vitesse de flamme que le modèle chimique. L'intérêt de ce cas test est donc d'apprécier l'influence de la dissipation numérique engendrée intrinsèquement par le schéma WENO sur la vitesse de flamme et la structure du front de flamme. À la limite, on supprime le modèle de transport moléculaire (simulation Euler), et on laisse agir seule la diffusion numérique.
On reprend donc avec le code WENO, les calculs de vitesse fondamentale réalisés au §2.4.1, qui ont permis de valider le modèle de transport moléculaire sur l'expérience.

4.1.1 Front de flamme

Effet de la résolution

On fixe d'abord :

- la richesse : cas B, $Y_{\mathrm{H}_2} = 0{,}03$, ϕ=1,054
- l'ordre du schéma : 5
- la reconstruction #4 : caractéristique totale sans la méthode Larrouturou (cas « standard »)

On teste les résolutions N=100, 200, 400, 800 et 1000 (rappel : Compact N=1024).

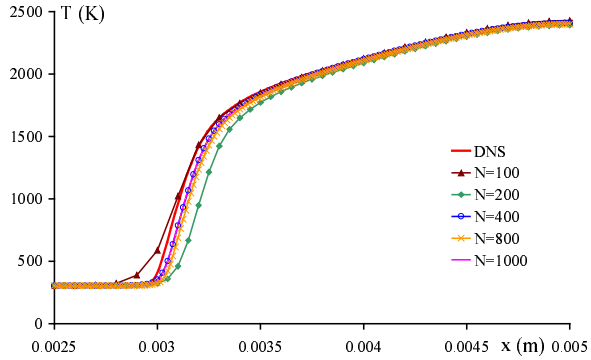


FIG. 4.1: Effet de la résolution : Profils de température à t=0,105 ms. Cas B, schéma WENO d'ordre 5, reconstruction #4.

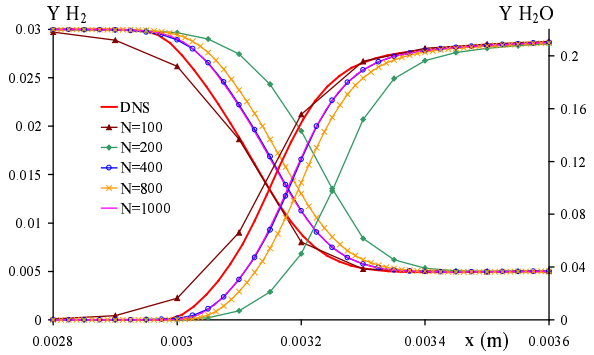


FIG. 4.2: idem fig.4.1 : Profils de Y_{H_2} et Y_{H_2O}.

Les figures 4.1 et 4.2 montrent respectivement les profils de température et de fractions massiques de H_2 et H_2O, à t=0,105 ms. Du fait des résolutions différentes, le gradient de température initial diffuse plus ou moins et influe directement sur le délai d'inflammation, ce qui fait que les fronts de flamme occupent des positions différentes à l'instant choisi. Néanmoins, à part le cas N=100 où la diffusion numérique étale un peu les gradients, les fronts de température, d'Hydrogène et d'eau sont quasi-superposables à ceux du calcul de référence.

Effet de la reconstruction WENO

On fixe maintenant :

- la richesse : cas B, $Y_{H_2} = 0{,}03$, ϕ=1,054
- l'ordre du schéma : 5
- la résolution : N=400

On teste les reconstructions #1 à #5 (§ 3.3).

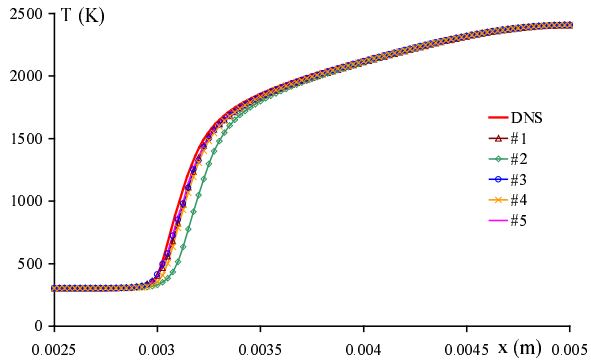


FIG. 4.3: Effet de la reconstruction : Profils de température à t=0,105 ms. Cas B, schéma WENO d'ordre 5, N=400.

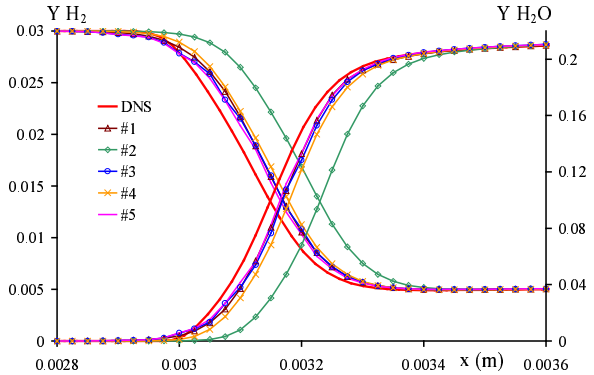


FIG. 4.4: idem fig.4.3 : Profils de Y_{H_2} et Y_{H_2O}.

Les résultats des figures 4.3 et 4.4 montrent que la méthode de Larrouturou associée à une reconstruction directe (#2) est à proscrire sur ce type de calcul. En revanche, elle s'avère très efficace couplée à une reconstruction caractéristique, les méthodes #3 et #5 donnant les résultats les plus proches du cas de référence.

Effet de l'ordre du schéma WENO

On fixe enfin :
- la richesse : cas B, Y_{H_2} = 0,03, ϕ=1,054
- la résolution : N=400
- la reconstruction : #4

On teste les ordres 3 à 11 (rappel : Compact ordre 6).

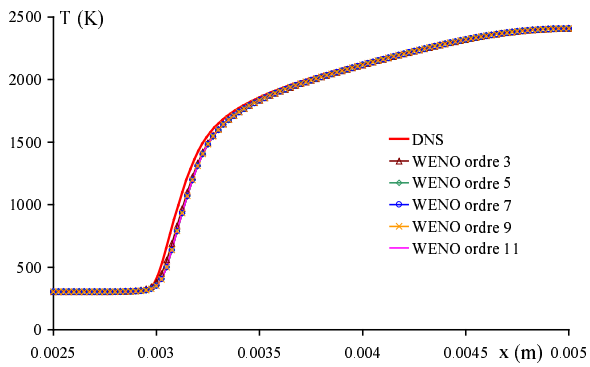


FIG. 4.5: Effet de l'ordre du schéma : Profils de température à t=0,105 ms. Cas B, schéma WENO d'ordre 5, N=400.

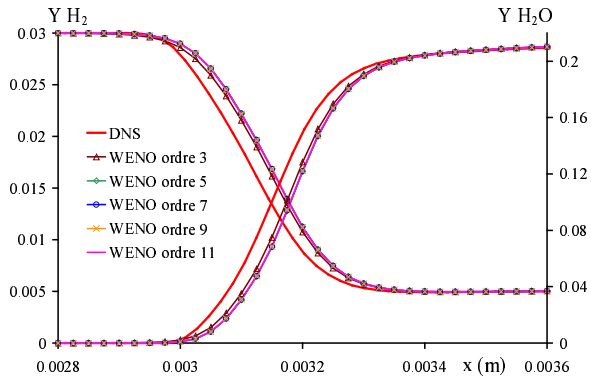


FIG. 4.6: idem fig.4.5 : Profils de Y_{H_2} et Y_{H_2O}.

Au delà de l'ordre 3, le seul cas graphiquement discernable sur les figures 4.5 et 4.6, l'ordre du schéma WENO n'influe pas sur la capture des fronts de flamme car ceux-ci sont suffisamment résolus.

4.1.2 Vitesse de flamme laminaire

On évalue la vitesse de flamme laminaire avec la méthode décrite dans la section 2.4.1. La figure 4.7 représente la vitesse de flamme laminaire S_L^0 en fonction de la richesse obtenue avec les deux codes à différentes résolutions. On constate que le code WENO donne des résultats proches de ceux du code Compact. Dans la plage de richesse [0,9 ;2,5], les vitesses obtenues avec le code WENO n'excèdent pas de plus de 4 % celles obtenues avec le code Compact. Le code WENO surestime de façon plus importante les vitesses de flamme pour les richesses hors de cette plage. De même, il n'a pas été possible de déterminer de vitesse de flamme pour les richesses supérieures à ϕ=3,4 où inférieures à ϕ=0,35 quels que soient la résolution et l'ordre du schéma WENO. Durant le délai d'inflammation (plus important aux basses et hautes richesses), la température au milieu du domaine diminue jusqu'à une valeur insuffisante pour que les réactions chimiques démarrent. En effet, la dissipation numérique inhérente au schéma WENO se cumule avec le transport moléculaire et fournit une dissipation globale plus importante que

pour le schéma Compact. Ce phénomène est également responsable de la légère surestimation des vitesses de flamme par le code WENO.
Pratiquement, le code WENO sera utilisé sur une plage de richesses proches de la stœchiométrie, les résultats obtenus sont donc tout à fait satisfaisants.

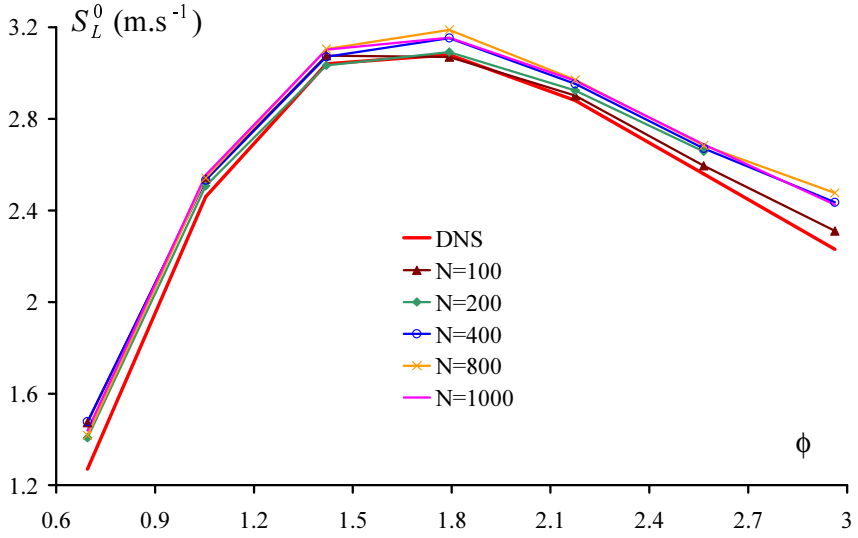


FIG. 4.7: Vitesse de flamme laminaire H_2/air en fonction de la richesse pour différents maillages.

Les valeurs des vitesses de flamme laminaire pour des essais avec une fraction massique initiale Y_{H_2}=0,03 sur un maillage de 400 points sont récapitulées dans le tableau 4.1. À titre comparatif, la DNS donne une valeur de S_L^0 de 2,46 m.s^{-1} pour une simulation sur 1024 points.

#4 - N=400	S_L^0 (m.s^{-1})	ordre 5 - N=400	S_L^0 (m.s^{-1})
ordre 3	2,60	#1	2,47
ordre 5	2,53	#2	2,30
ordre 7	2,53	#3	2,38
ordre 9	2,55	#4	2,53
ordre 11	2,56	#5	2,66

TAB. 4.1: Vitesse de flamme laminaire pour différentes simulations.

Comme précédemment, on peut remarquer que les schémas WENO d'ordre 5 à 11 engendrent des valeurs de vitesse très proches les unes des autres, légèrement supérieures à celle obtenue par la DNS. On observe là encore des disparités selon le type de reconstruction utilisée. Paradoxalement, la reconstruction #2 qui prédit de façon incorrecte les profils de température et fractions massiques Y_{H_2} et Y_{H_2O}, donne une vitesse proche de celle obtenue par DNS. Au vu de ces résultats, on pourrait croire que la reconstruction #1 donne les meilleurs résultats. Ceci est *a priori* une coïncidence en partie due à l'incertitude de mesure de la vitesse de flamme avec notre méthode.

4.1.3 Simulations Euler

On réalise des simulations Euler pour déterminer l'influence relative des dissipations moléculaire et numérique. Ces simulations sont réalisées avec le schéma WENO d'ordre 5 couplé à la reconstruction #4. La figure 4.8 présente la structure du front de flamme obtenue pour des simulations Euler avec différents maillages, pour Y_{H_2}=0,03 initialement.
La diffusion numérique générée dans les simulations avec des maillages lâches, on observe une augmentation de la raideur du front de flamme avec l'augmentation du nombre de points de grille. De plus, on constate des écarts importants entre les différentes simulations laissant présager des différences importantes sur les vitesses de flamme laminaire. Cette assertion est confirmée par la figure 4.9. La vitesse de flamme décroît fortement avec le nombre de points dans le maillage : plus le maillage est fin, mieux les gradients sont résolus et moins le schéma WENO génère de dissipation numérique. La présence du transport moléculaire dans un calcul Navier-Stokes permet d'« adoucir » les gradients et l'influence de la viscosité artificielle devient négligeable devant le transport physique. Par ailleurs, le schéma WENO génère de la dissipation numérique par un processus non-linéaire : la dissipation totale dans la simulation ne correspond pas simplement à la somme de la dissipation numérique et moléculaire. La présence du transport moléculaire *i.e.* d'une échelle de coupure physique est donc essentielle pour obtenir des résultats satisfaisants. Ainsi, pour les simulations Navier-Stokes, on observe des écarts assez faibles variant entre 2 et 4 % entre les vitesses de flamme évaluées par la simulation DNS et par les simulations MILES. Cet écart est quasi-constant pour un nombre de mailles supérieur à 100. En deçà, du fait de la raideur des gradients, le schéma WENO engendre de la dissipation numérique qui provoque une augmentation importante de S_L^0.

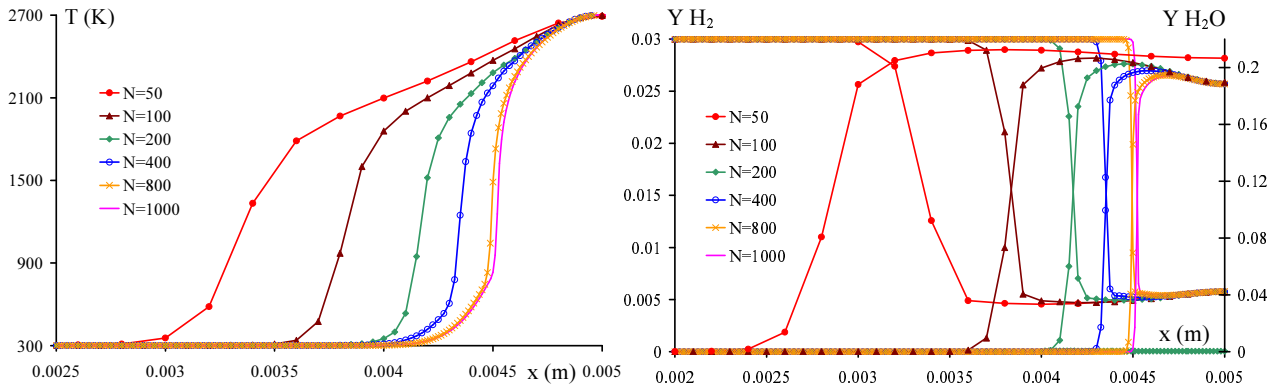


FIG. 4.8: Profils de T, Y_{H_2} et Y_{H_2O} à t=0,105 ms pour des simulations Euler sur différents maillages. Schéma WENO d'ordre 5, reconstruction #4.

En résumé, ces simulations démontrent l'aptitude du schéma WENO à capturer des structures de front de flamme de forts gradients tout en respectant la physique de la combustion à condition de prendre en compte correctement les termes visqueux.

4.2 Flamme bidimensionnelle de diffusion H_2/air

On s'intéresse maintenant à un cas bidimensionnel présentant une physique riche : la flamme de diffusion turbulente H_2/air.

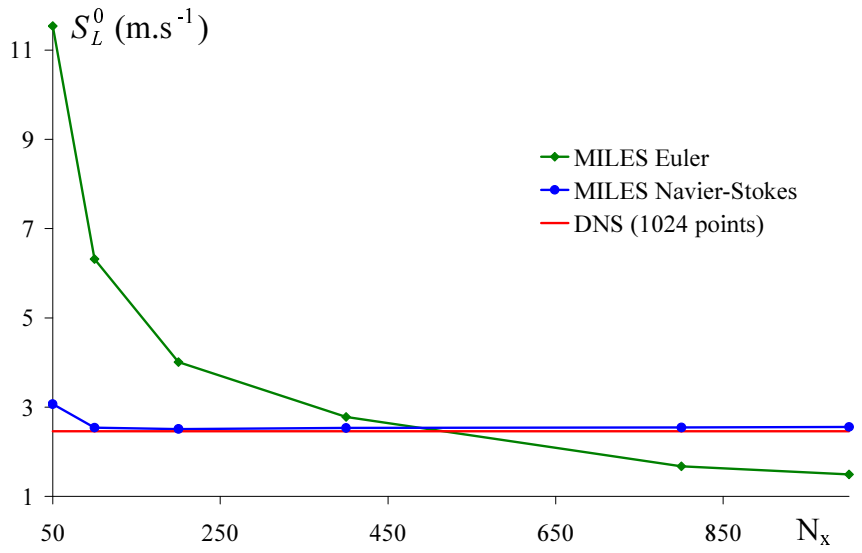


FIG. 4.9: Vitesse de flamme laminaire H_2/air en fonction du maillage pour les simulations MILES Euler et Navier-Stokes. Schéma WENO d'ordre 5, reconstruction #4.

4.2.1 Conditions initiales

Les conditions initiales de cette flamme de diffusion sont les mêmes que celles utilisées pour la simulation du jet réactif turbulent de la section 2.5.1. Seules la taille du domaine et la résolution du calcul diffèrent. Le domaine de calcul mesure 63,5 mm×7,1 mm. La simulation numérique directe a été effectuée sur un maillage de 2042×512 points de grille. Les simulations MILES ont été réalisées sur trois maillages : 1007×256 (maillage 1), 755×192 (maillage 2) et 503×128 (maillage 3). Les points de ces maillages sont équirépartis alors qu'on utilise un maillage en racine pour la DNS afin de resserrer les mailles à l'entrée du jet d'H_2 (cf. § 2.5.1). Enfin, on utilise la reconstruction caractéristique totale (#4) pour toutes les simulations MILES.

Dans cette première étude, on a choisi de travailler à vitesse d'entrée constante pour toutes les simulations plutôt qu'à débit constant. Sur la figure 4.10, on peut voir que les profils de vitesse d'entrée des simulations MILES sont beaucoup moins résolus que celui de la simulation DNS.
On impose une condition d'entrée NSCBC en y=0 et des conditions aux limites parfaitement non réflectives sur les autres frontières. Le pas de temps est constant pour la DNS, égal à 10^{-9} s, et tel que le nombre CFL $\approx$ 0,5 pour les simulations MILES.

4.2.2 Champs 2D moyennés

Les résultats présentés dans cette section sont ceux issus de la DNS et du MILES avec le schéma WENO d'ordre 7 et le maillage 2 (ordre et maillage intermédiaires). Les figures 4.11 à 4.13 présentent les champs de température, fractions massiques de H_2 et H_2O moyens pour les deux simulations. Ces champs moyens sont le résultat de statistiques temporelles.
On constate sur ces figures qu'il y a peu de différence entre les deux simulations. La zone de combustion commence à partir de l'abscisse $\approx$ 5 mm et son développement est similaire dans les deux cas. On observe néanmoins que la production de radical OH est moins importante pour le MILES et que celui-ci diffuse plus dans le jet, atteignant de faibles valeurs sur l'axe. On

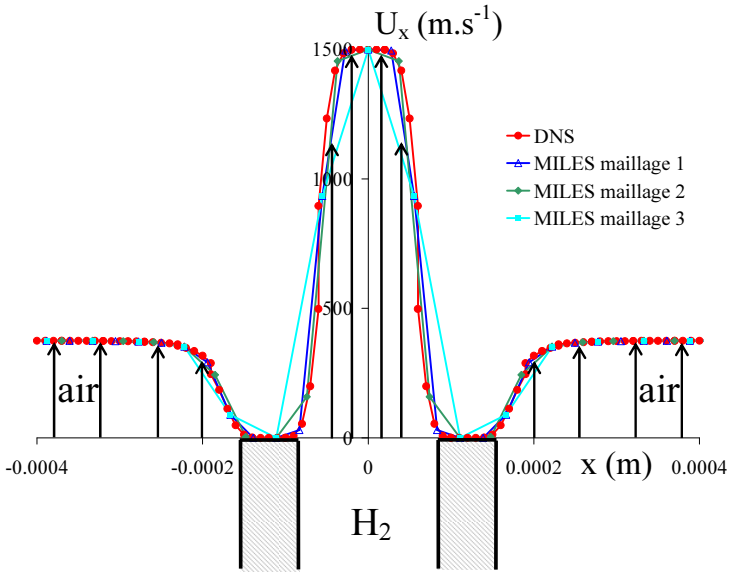


FIG. 4.10: Profil initial de vitesse à l'entrée du jet pour les différentes simulations.

remarque également une diffusion plus importante de l'eau produite au bout de la flamme pour la simulation numérique directe.

4.2.3 Influence du maillage

On s'attache ici à regarder l'influence du maillage sur cette simulation à travers les profils axiaux et radiaux de certaines variables primitives moyennées. Les simulations MILES ont été réalisées avec le schéma WENO d'ordre 7.

Tout d'abord, on remarque que la figure 4.14 confirme que le début de la flamme se situe autour de l'abscisse x=5 mm. La zone de mélange qui précède spatialement la zone de combustion est parfaitement visible sur le profil de O_2. La fraction massique d'eau s'élève ensuite très rapidement sur l'axe puis diminue jusqu'à la sortie du domaine.

Les simulations MILES avec les maillages 2 et 3 prédisent correctement le lieu de la flamme. La simulation avec le maillage 1 (le plus raffiné) conduit à une zone de mélange légèrement plus longue que les autres simulations. Dans la zone de mélange, les taux de production d'eau et de dioxygène sont mieux prédits avec le maillage 1 qu'avec les autres maillages, plus lâches. De même, le profil de température, quasi-constant dans cette zone, est correctement reproduit par le maillage le plus fin, alors que les maillages 2 et 3 le surestiment légèrement. On remarque que la température et la vitesse longitudinale à l'entrée n'est pas tout à fait constante. Des comportements similaires se retrouvent sur la figure 4.15. La simulation avec le maillage 1 et la DNS sont en bonne concordance sur la demi-épaisseur dynamique et la décroissance axiale alors que les calculs avec les maillages 2 puis 3 sous-estiment légèrement ces variables. Dans la zone de combustion, l'influence du maillage est moins perceptible. Dans la zone de mélange, les termes sources chimiques sont faibles et les gradients peu importants. L'apparition d'un front de flamme raide (qui délimite les deux zones du jet) favorise la création de diffusion numérique par les simulations MILES.

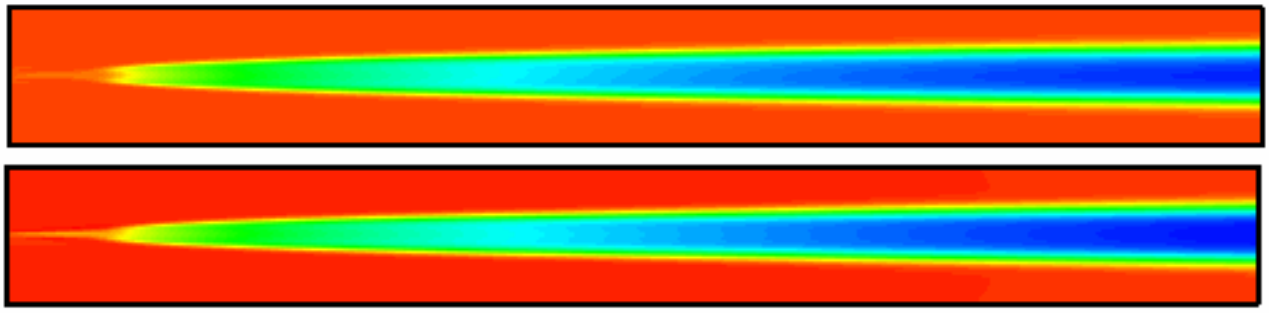


FIG. 4.11: Champ moyen de température (1420 K<T<2670 K). En haut : Compact, en bas : WENO ordre 7 avec maillage 2.

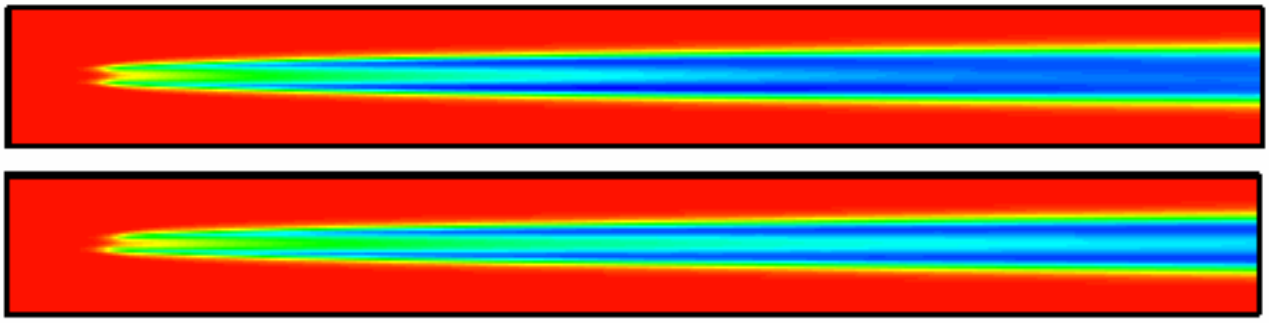


FIG. 4.12: Champ moyen de fraction massique de OH ($0<Y_{\mathrm{OH}}<0{,}0234$). En haut : Compact, en bas : WENO ordre 7 avec maillage 2.

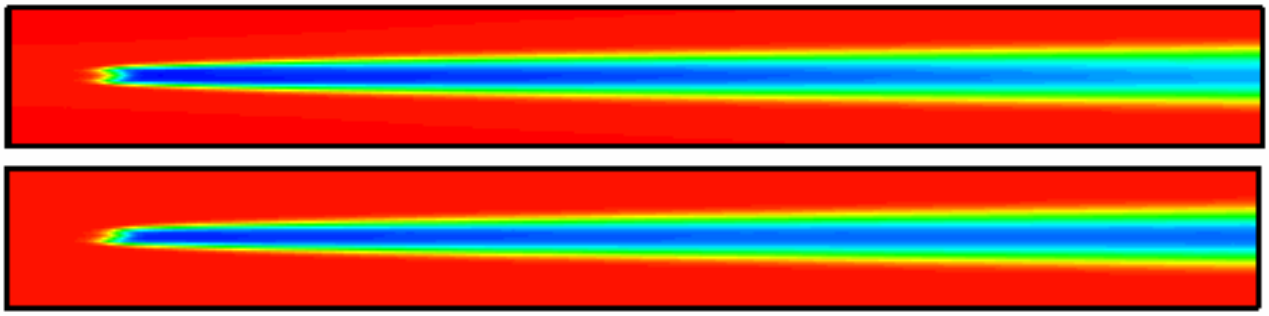


FIG. 4.13: Champ moyen de fraction massique de H_2O ($0<Y_{\mathrm{H_2O}}<0{,}232$). En haut : Compact, en bas : WENO ordre 7 avec maillage 2.

Il y a probablement un léger bogue au niveau de l'entrée du jet. Néanmoins, si l'origine du problème n'a pas pu être déterminée, celui-ci présente une influence marginale et ne change pas la tendance globale des résultats.

Les profils radiaux présentés sur la figure 4.16 sont tracés à l'abscisse $x = L_x/2$ (*i.e.* dans la zone de combustion). Le décalage entre MILES et DNS sur les bords du domaine s'explique par le problème au niveau de la condition d'entrée dans un des deux codes. Mais encore une fois, l'influence sur le profil près de l'axe est mineure.
Ces profils radiaux corroborent les remarques précédentes. Les profils de température et de fraction massique d'H_2O sont très bien reproduits par les 3 simulations MILES. On observe une surestimation de la quantité d'H_2 au milieu du domaine, et cette surévaluation est amplifiée par l'utilisation d'un maillage lâche. On observe le comportement inverse avec la quantité de radical OH.

4.2.4 Influence de l'ordre du schéma WENO

Nous avons effectué des variations d'ordre du schéma WENO (ordre 5, 7, et 9) pour le maillage 2 (maillage intermédiaire). Les figures 4.18 à 4.19 présentent les profils axiaux et radiaux de certaines variables primitives, ainsi que la décroissance axiale et la demi-épaisseur dynamique.
Hormis le profil axial du radical OH, on observe peu de différence entre les trois simulations MILES sur la deuxième zone du jet. En revanche, la montée en ordre améliore nettement les résultats dans la première zone. Les profils radiaux (fig. 4.19) confirment que les simulations avec l'ordre 9 donnent les résultats les plus proches de ceux issus de la DNS.

4.2.5 Conclusion

Ce test a mis en avant la capacité du schéma WENO à simuler une flamme de diffusion subsonique. Quels que soient le maillage et l'ordre du schéma WENO utilisés, l'approche MILES donne des résultats proches de ceux de la DNS. Les différentes zones du jet sont bien appréhendées mais le schéma WENO présente deux comportements distincts suivant la zone du jet :

- zone de mélange : le raffinement du maillage et la montée en ordre sont clairement favorables à une amélioration des résultats ;
- zone de combustion : dans cette zone de mélange où la chimie est prépondérante, les effets de maillage et de montée en ordre sont moins remarquables.

Il semble que les termes sources chimiques influent sur le schéma WENO (front de flamme raide). Il serait intéressant de réaliser une simulation similaire inerte pour étayer cette hypothèse.
Ces résultats sont satisfaisants et encourageants pour la simulation de cas expérimentaux, à fort nombre de Reynolds. Pour cela, il est nécessaire de réaliser ces simulations avec des résolutions moins importantes. Un compromis intéressant entre coût de calcul et précision pourrait être un schéma WENO d'ordre 9 avec le maillage le moins raffiné.

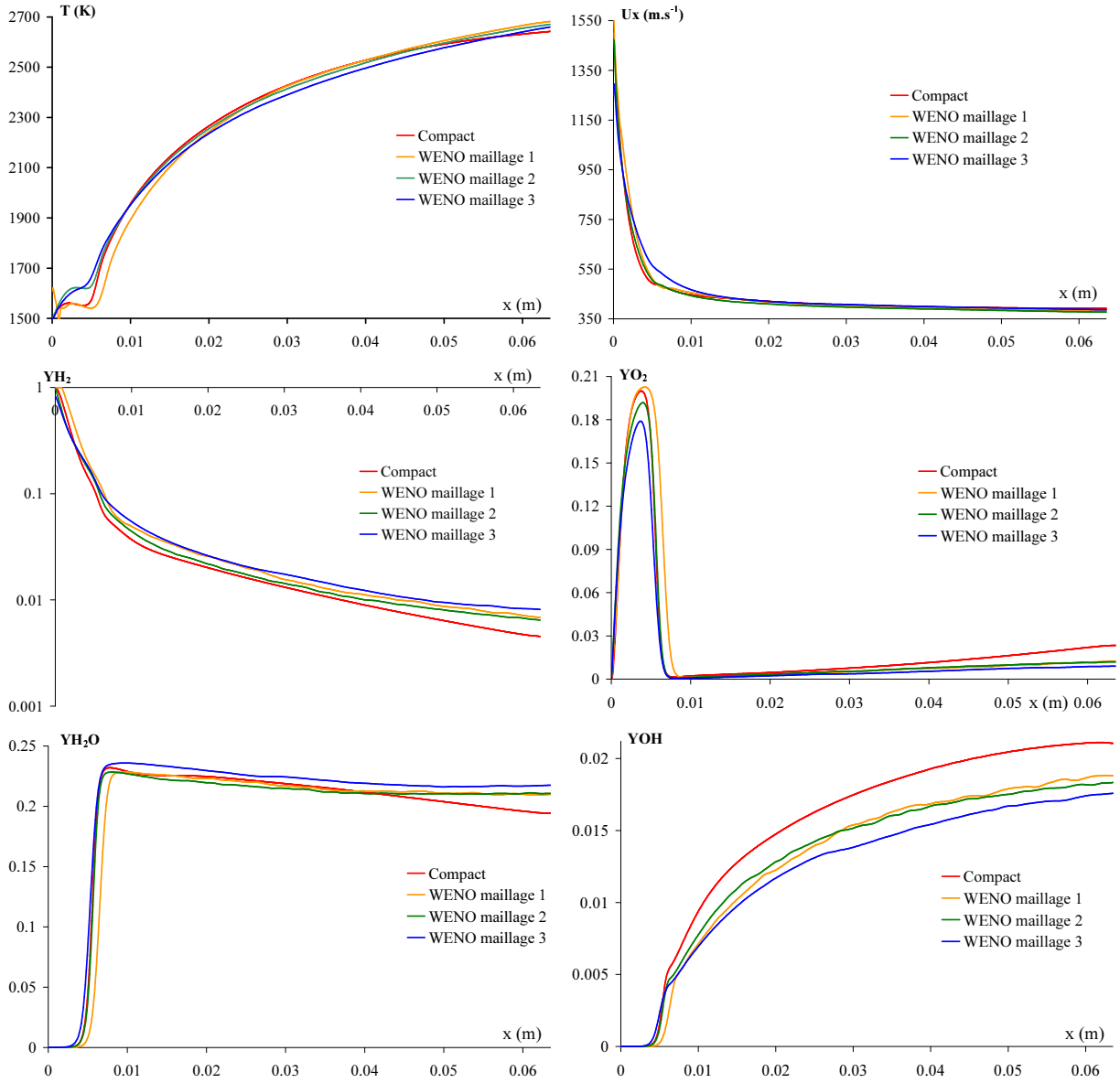


FIG. 4.14: Influence du maillage sur les profils axiaux des variables primitives T, U_x, Y_{H_2}, Y_{O_2}, $Y_{\mathrm{H}_2\mathrm{O}}$ et Y_{OH}.

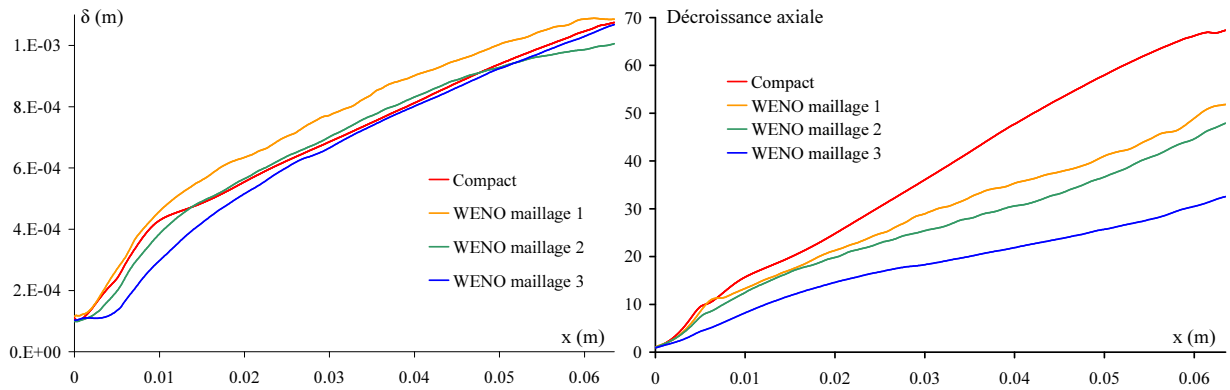


FIG. 4.15: Influence du maillage sur la demi-épaisseur dynamique et la décroissance axiale du jet.

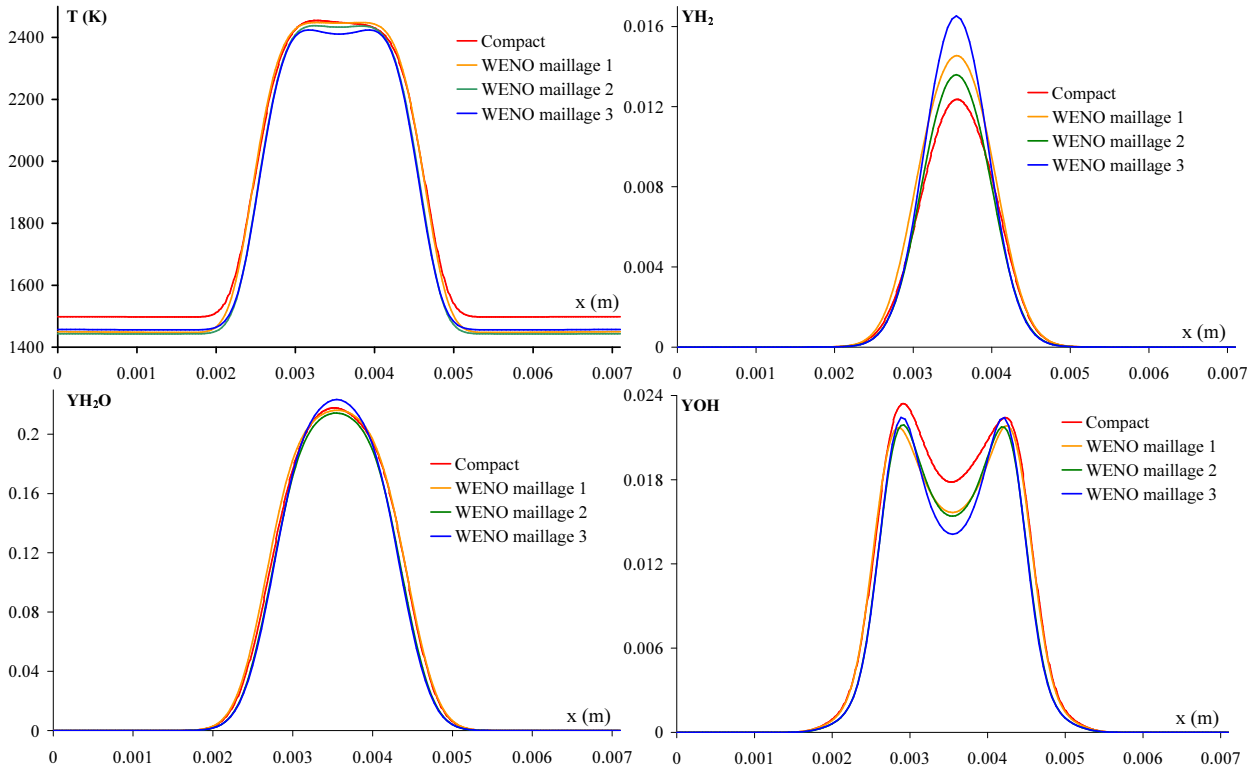


FIG. 4.16: Influence du maillage sur les profils radiaux des variables primitives T, $Y_{\mathrm{H_2}}$, $Y_{\mathrm{H_2O}}$ et Y_{OH}.

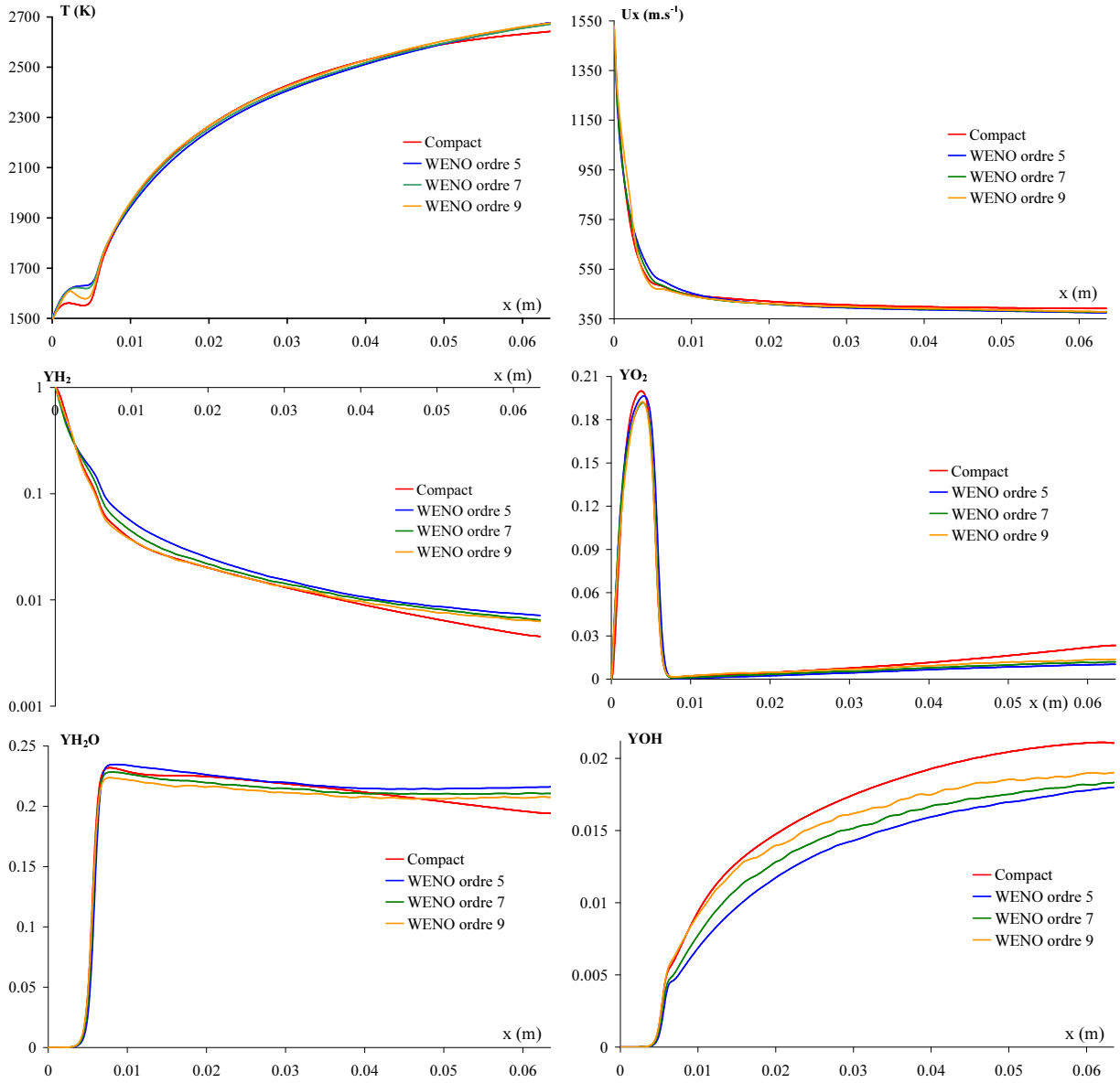


FIG. 4.17: Influence de l'ordre du schéma WENO sur les profils axiaux des variables primitives T, U_x, Y_{H_2}, Y_{O_2}, Y_{H_2O} et Y_{OH}.

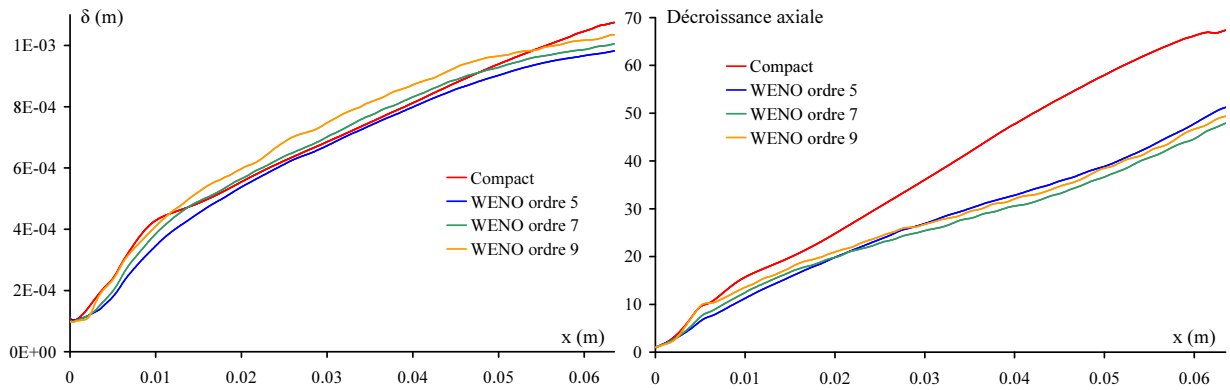


FIG. 4.18: Influence de l'ordre du schéma WENO sur la demi-épaisseur dynamique et la décroissance axiale du jet.

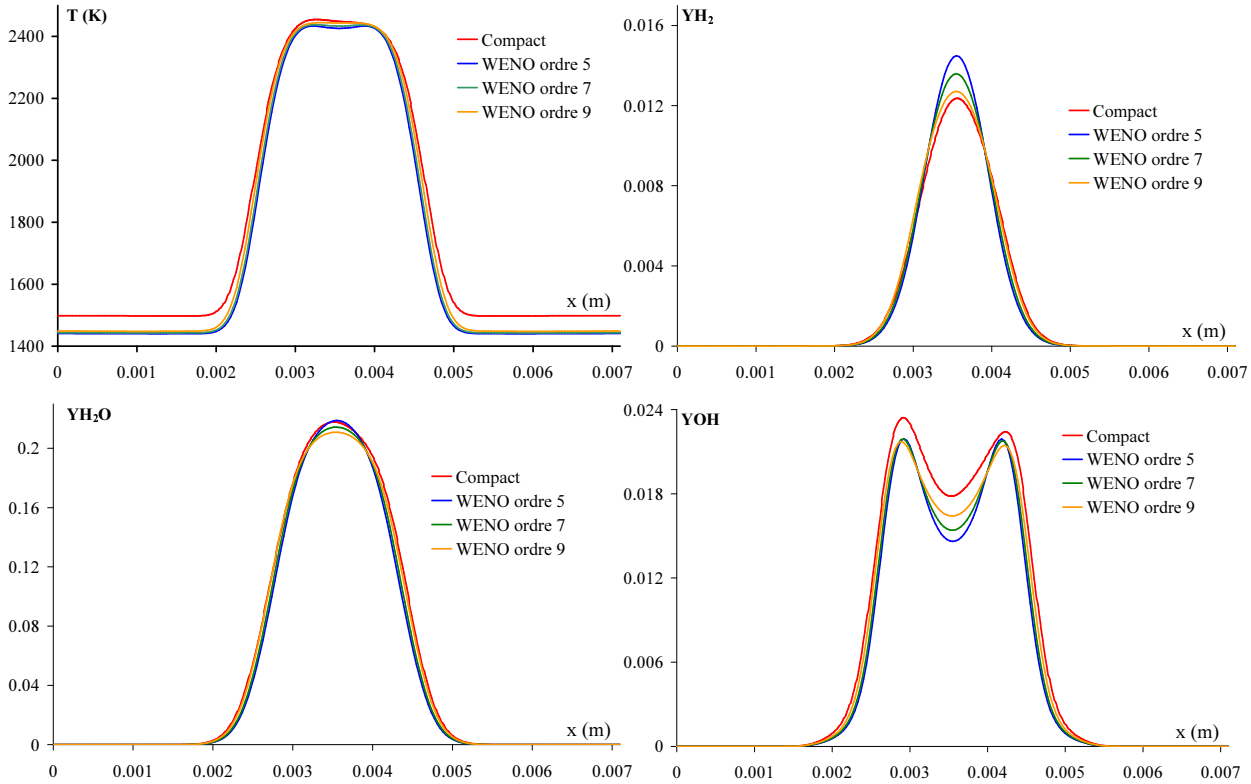


FIG. 4.19: Influence de l'ordre du schéma WENO sur les profils axiaux des variables primitives T, $Y_{\mathrm{H_2}}$ et $Y_{\mathrm{H_2O}}$ et Y_{OH}.

Chapitre 5

Exemples d'applications du code WENO

L'objectif du code WENO est entre autres de simuler des écoulements turbulents supersoniques dans lesquels des chocs peuvent intervenir. On présente ici trois applications 2D s'inscrivant dans ce contexte : propagation d'une détonation H_2/air et interaction d'une onde de choc dans l'air avec une bulle d'H_2. Ces simulations bidimensionnelles ne peuvent être appelé MILES néanmoins, la qualité des résultats obtenus est encourageante pour réaliser des applications 3D.

5.1 Détonation 2D

La combustion d'un mélange gazeux peut se réaliser sous deux régimes différents fonction des énergies d'initiation de combustion et de la nature du mélange : la déflagration et la détonation. Les applications de flammes présentées dans les chapitres précédents étaient des combustions en régime de déflagration. On s'intéresse ici à la simulation d'une détonation 2D par le schéma WENO.
Une combustion en régime de détonation engendre un front de flamme se déplaçant à une vitesse supersonique par rapport au gaz frais. Un réseau d'ondes de choc transverses et longitudinales est alors créé dans le domaine et leurs intersections, lieu de fortes surpressions, délimitent des zones appelées cellules de détonation [33]. Ces cellules, qui ont des formes semblables en cas de détonation stable, permettent de caractériser le système détonant.

5.1.1 Conditions initiales

Ces simulations de détonation Euler ont été réalisées avec le schéma cinétique de l'ONERA (donné en annexe C) couplé à la base thermodynamique de Burcat. Les schémas WENO d'ordre 3, 5, 7 et 9 ont été testés (couplés avec la reconstruction caractéristique totale #4). La taille du domaine est de 20 mm$\times$48 mm et deux maillages : 399$\times$959 (maillage 1) et 199$\times$479 (maillage 2) ont été utilisés. La figure 5.1 présente le champ initial de densité. La forme de la discontinuité sur cette figure est identique pour la température, la composante longitudinale de la vitesse (U_y) et les fractions massiques. Les figures 5.2 et 5.3 donnent les profils initiaux de ces variables pris à l'abscisse x=10 mm. La discontinuité correspondant au choc est parfaitement visible sur ces figures. On remarque également l'importance des valeurs de température nécessaires à l'initiation de la détonation. Les valeurs droites et gauches de la discontinuité correspondent à la solution du modèle de Chapman-Jouguet pour un choc stationnaire 1D. La composante transervale de

la vitesse est initialement nulle.
Les conditions aux limites sont une condition d'entrée en $z = 0$ et des conditions parfaitement non-réflectives sur les autres frontières. Le schéma en temps est d'ordre 3 et le pas de temps est tel que le nombre CFL $\approx 0{,}7$.

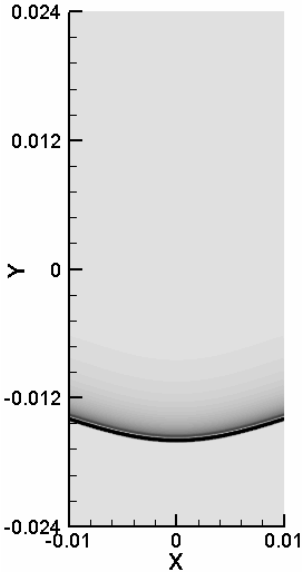


FIG. 5.1: Champ initial de densité.

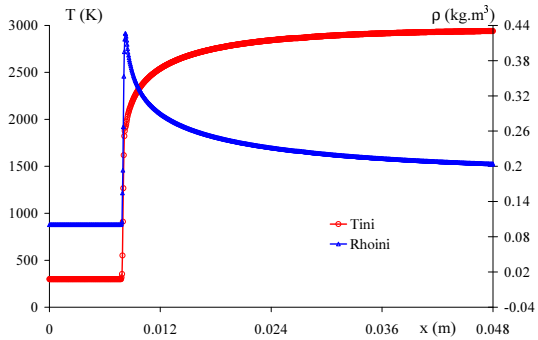


FIG. 5.2: Profils longitudinaux de la densité et de la température à t=0.

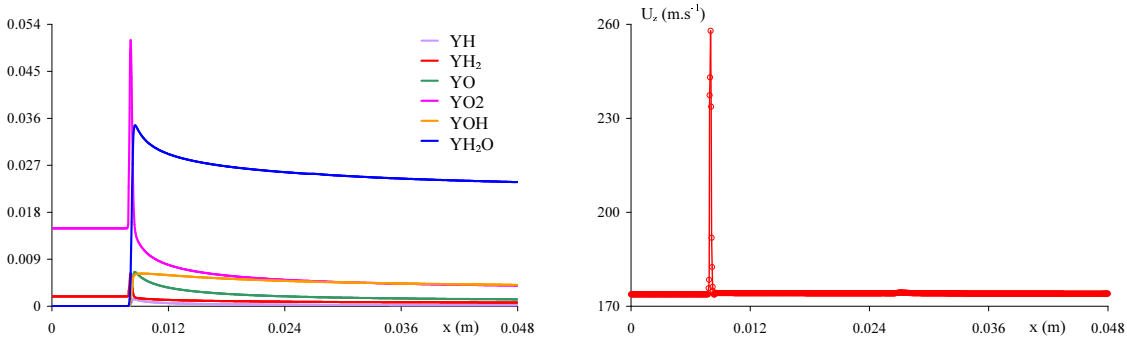


FIG. 5.3: Profils longitudinaux des fractions massiques (à gauche) et de la composante longitudinale de la vitesse (à droite) à t=0.

5.1.2 Résultats

Les figures 5.4 et 5.5 illustrent le champ du gradient de densité (3.12). Ces images, tracées en niveaux de gris, rappellent les clichés réalisés avec la méthode optique Schlieren.

Ces instantanés de S nous permettent d'apprécier le développement temporel des cellules de détonation dans le domaine. À t=0,05 ms, des ondes de choc sont engendrées au niveau de la discontinuité et donnent naissance à des instabilités caractérisées par des structures en champignons. À l'ordre 3, la dissipation numérique semble trop importante pour que ces instabilités puissent se développer (quel que soit le maillage). On observe des structures plus fines et plus nombreuses quand l'ordre du schéma est élevé et la résolution grande. Ce phénomène s'accentue pour les temps suivants. On constate également que la forme de la discontinuité initiale évolue de façon assez différente selon la simulation. Par exemple, la figure 5.4 pour la simulation à l'ordre 9 laisse apparaître une discontinuité contenant 5 parties distinctes à t=0,20 ms, alors que son homologue de la figure 5.5 n'en présente que 3. Le lieu des points d'intersection des ondes de choc s'en trouve alors changé. Il est intéressant de constater que ce cas test Euler est très sensible à la dissipation numérique engendrée par le schéma malgré les vitesses et les énergies mises en jeu. Les formes des structures obtenues sont comparables à celles données de la littérature [33]. Les schémas WENO d'ordre 7 et 9 avec le maillage 1 permettent naturellement d'obtenir les résultats avec les structures les plus fines et les plus abondantes.

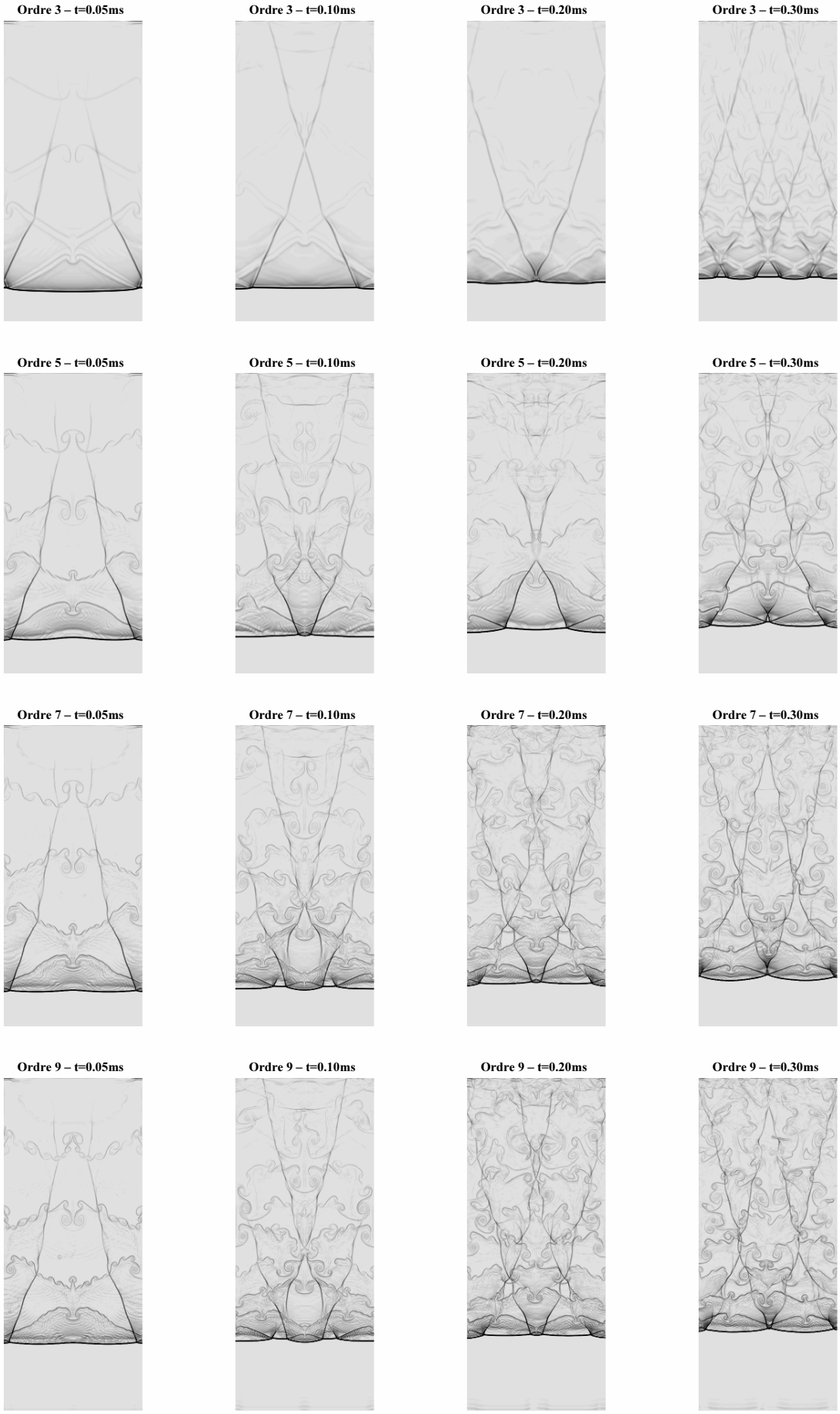


Fig. 5.4: Champ de S à différents instants pour les simulations avec le maillage 1.

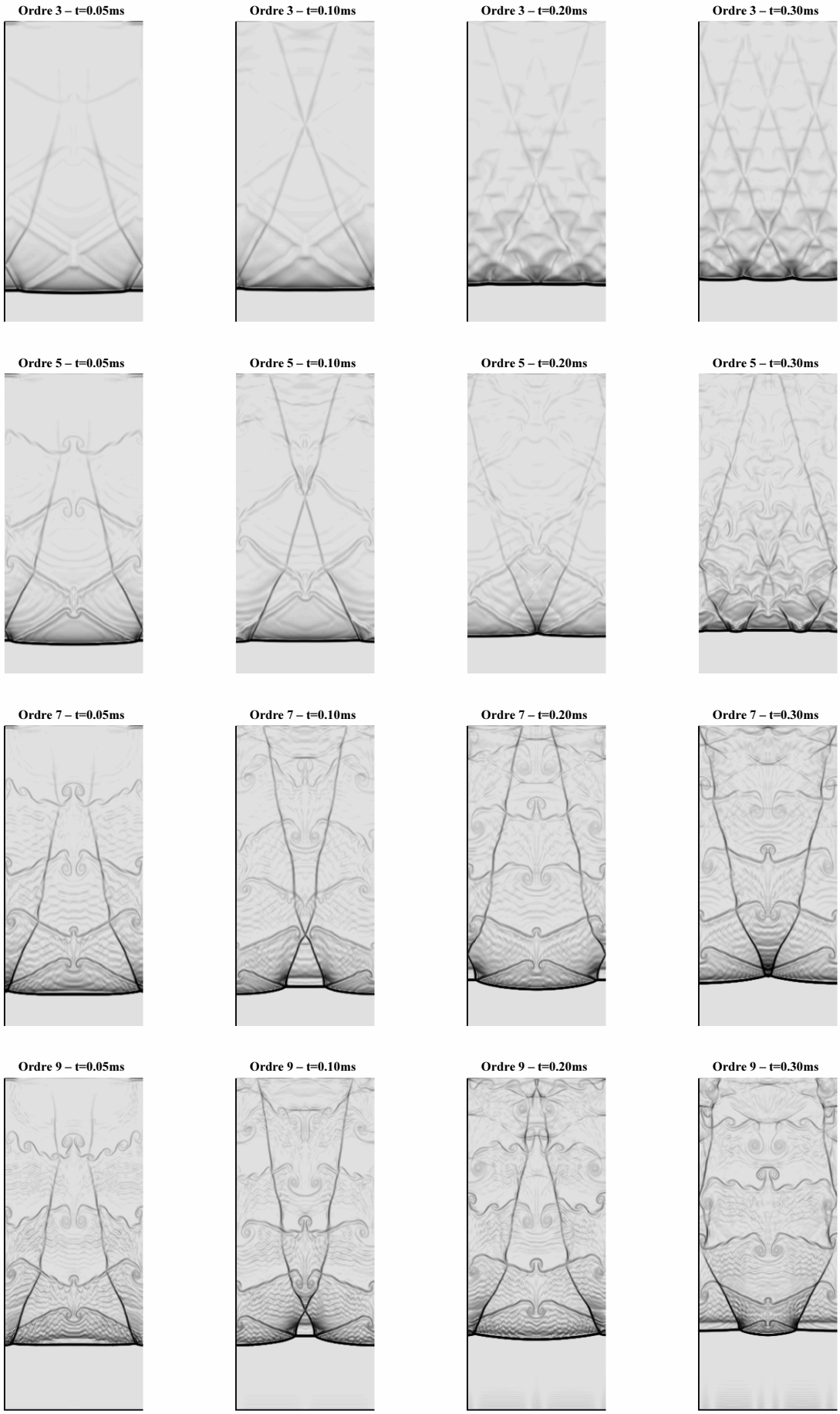


Fig. 5.5: Champ de S à différents instants pour les simulations avec le maillage 2.

5.2 Interaction choc-bulle

Ce dernier exemple d'application concerne la simulation d'écoulement supersonique réactif contenant des ondes de choc : une interaction entre un choc et une bulle d'hydrogène dans l'air. Ce cas test est intéressant car il met en jeu une physique complexe contenant une multitude d'échelles spatiales et temporelles et est représentatif du problème du superstatoréacteur en 2D (fig. 5.6). L'objectif est de reproduire les simulations réalisées par Billet *et al.* [12]. On réalise donc une simulation Navier-Stokes avec les conditions initiales présentées dans cet article.

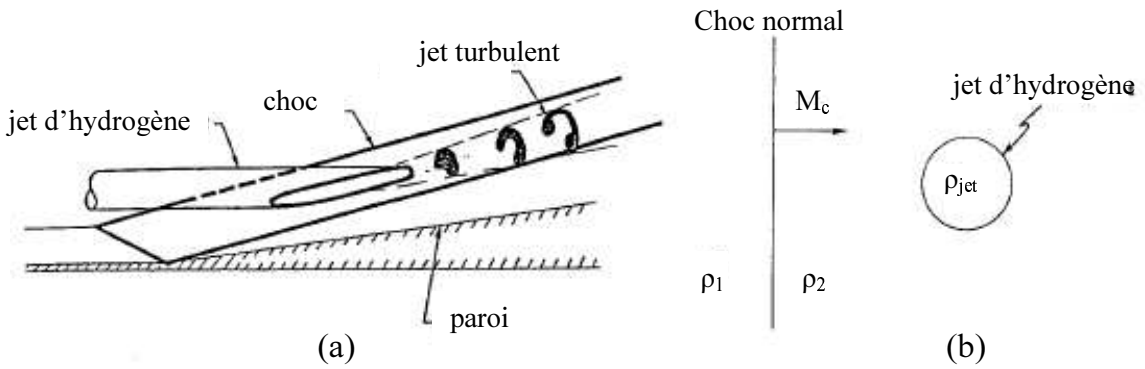


FIG. 5.6: Diagramme schématique du concept d'interaction choc/mélange tridimensionnel (a) et de l'analogue bidimensionnel (b). Image tirée de l'article de Ton *et al.* [126]

Une bulle cylindrique d'hydrogène entourée d'air est convectée par un écoulement supersonique et interagit avec un choc plan initialement située à l'abscisse y=7 mm. Le schéma de la configuration initiale de l'écoulement est donné sur la figure 5.7. Pour des raisons de symétrie, on ne simule que la partie gauche du domaine (délimitée par des pointillées sur la figure 5.7) : [0 :7,5 ; 0 :30] mm. Le maillage comprend 256×511 points de grille équirépartis. Des conditions de symétries sont appliquées sur les frontières $x = 0$ et x=7,5 mm. Des conditions NSCBC d'entrée sont imposées sur la frontière $x = 0$ et parfaitement non-réflective sur la frontière y=30 mm.
Les conditions initiales en amont du choc sont données sur la figure 5.7, les conditions avales sont évaluées grâce aux relations de Rankine-Hugoniot. La bulle d'H_2 a un rayon initial r_c=2,8 mm et son interface est définie par :

$$Y_{\mathrm{H}_2} = \frac{1}{2}\left(1 + tanh\left(\frac{r_c - r}{C}\right)\right)$$

où $r^2 = (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2$, C est une constante égale à 3.10^{-2} (le gradient est étalé sur 2 mailles) et le centre de la bulle est située en (x_0,y_0)=(7,5 ;4) en mm.
Enfin, on utilise le schéma WENO d'ordre 5 associé à la reconstruction #4 en espace, et le schéma Runge-Kutta TVD d'ordre 3 en temps. Le pas de temps est variable et évalué tel que le nombre CFL=0,5.

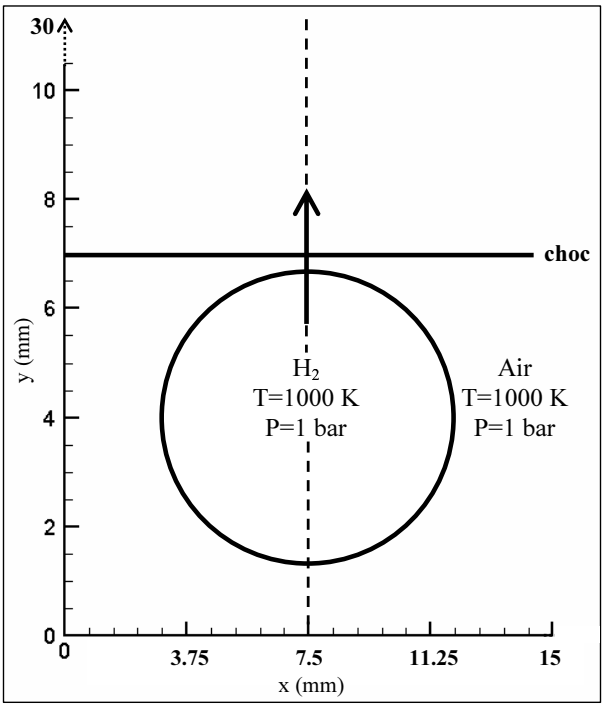


FIG. 5.7: Schéma de l'interaction choc-bulle.

Pression et fraction massique d'H_2

Les figures 5.8 et 5.9 représentent la pression (iso-contours) et la fraction massique de H_2 (couleur) à différents instants. À t=1,5 μs, la bulle a déja heurté le choc horizontal : elle se comprime contre l'air plus chaud et plus dense et produit une onde réfléchie dans la partie supérieure droite du domaine. De l'autre coté de l'onde incidente, une onde transmise reliée tangentiellement à l'onde réfléchie, est générée le long de l'interface de la bulle. Cette onde engendre ensuite une onde réfractée à l'intérieur de la bulle du fait du changement de milieu. Les figures à t=2 et 2,5 μs (fig. 5.8b et 5.8c) mettent en évidence la propagation de ces ondes et l'avancée de la bulle dans le domaine. L'onde réfractée sort de la bulle et génère une deuxième onde transmise dans l'air et une onde réfléchie à l'intérieur de la bulle. On constate également que malgré la compression de la bulle, l'interface de celle-ci reste assez épaisse en raison des processus de diffusion. Entre t=3 et t= 3,5 μs, l'onde réfléchie interne a atteint puis traversé l'interface haute de la bulle et ainsi produit d'autres ondes dont l'évolution est visible sur les figures 5.8e et 5.8f. À t=4 μs, un tourbillon de vorticité négative apparaît à l'interface supérieure de la bulle, autour du point (5,6 ;7,2) en mm. Aux temps suivants, ce tourbillon grossit et finit par contrôler l'écoulement autour de la poche de H_2.
Sur la figure 5.9a, on constate que le tourbillon principal a commencé à détacher la bulle d'H_2 de l'axe de symétrie séparant celle-ci en deux parties. Un tourbillon secondaire apparaît autour du point (6,6 ;6,6) mm et va être absorbé par le tourbillon principal. Au temps t=9 μs, le mouvement de la bulle est complètement contrôlé par le tourbillon central. Il ne reste plus qu'une petite bande de H_2 la reliant à l'axe de symétrie droit, cette bande est une flamme de diffusion en cours d'extinction à t=14 μs (fig. 5.9c). Aux instants suivants, la bulle d'H_2 est entièrement enveloppée dans le tourbillon et finit par disparaître par un processus de combustion. Ces figures

montrent comment la combustion s'installe progressivement dans le domaine.

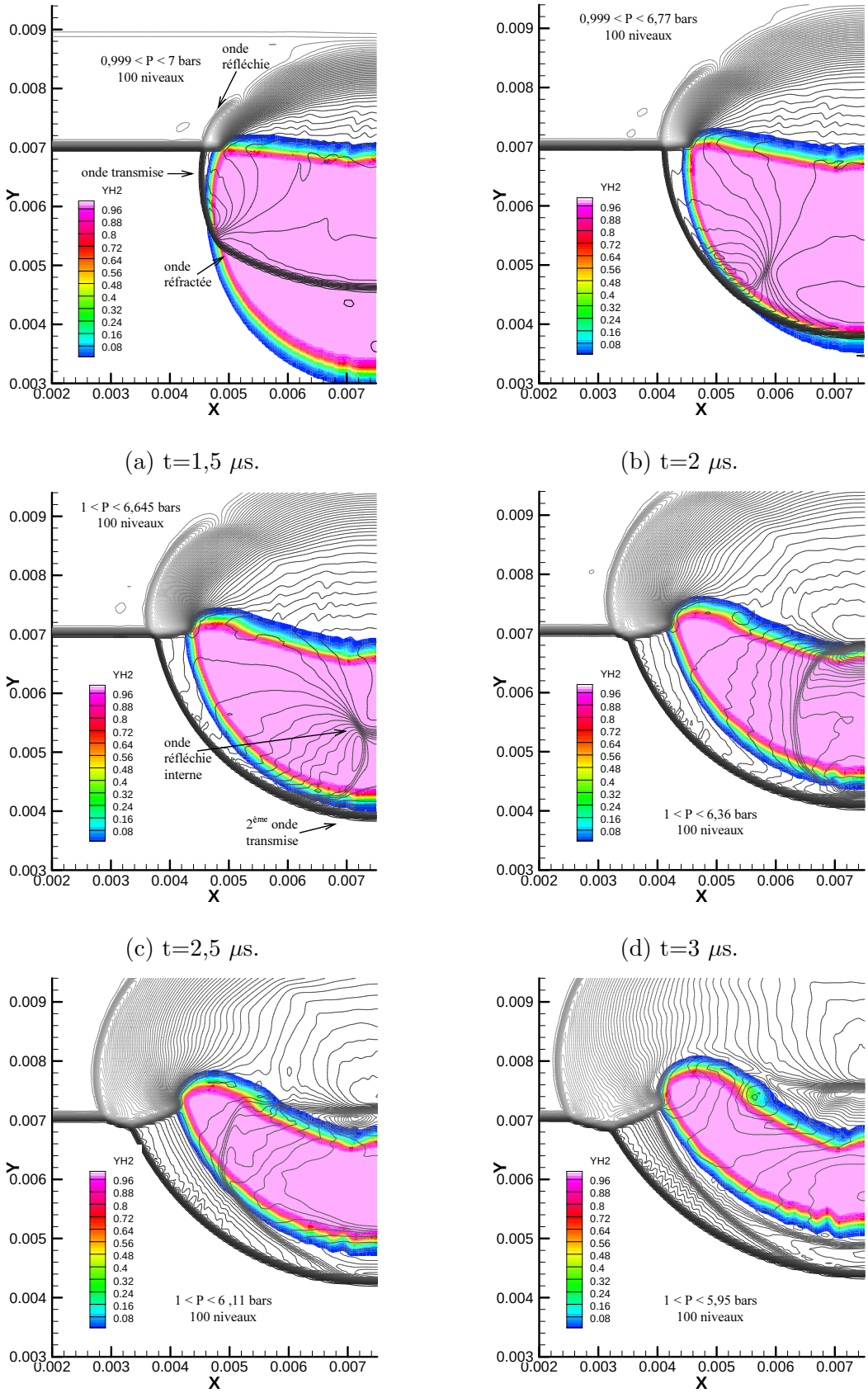
Température et fractions massiques d'autres espèces

La figure 5.10 représente la température à différents instants. Comme on l'a vu précédemment, à t=1,5 μs, la bulle a déja interagi avec le choc. La température est de 1000 K en amont des ondes réfractées et transmises et de 1200 K à l'intérieur de la bulle. Au dessus de celle-ci, la température varie progressivement de 1200 K jusqu'à la température uniforme de 1690 K. Près de l'onde réfléchie, il existe une bande où la température est plus élevée ($\approx$1740 K) du fait de l'importante compression dans cette zone. À t=6 μs, la température a augmenté jusqu'à 1400 K au dessus du choc horizontal et à l'intérieur de la bulle. À partir de cet instant, la combustion commence à jouer un rôle prédominant sur l'évolution de l'écoulement : on observe des flammes de diffusion se former quand le carburant H_2 et le comburant O_2 se rencontrent au niveau de points chauds. Ceci est confirmé sur la figure 5.10d, la température a atteint plus de 2700 K à proximité de la bande de dihydrogène qui reliait la ligne symétrique au reste de la bulle à t=9 μs. Le dihydrogène présent dans cette bande a brûlé et la figure 5.9c montre qu'il n'y a quasiment plus de carburant à cet endroit. Enfin à t=25 μs, les lieux de haute température montrent que la combustion est présente à chaque interface H_2/O_2 suivant un mouvement imposé par le tourbillon central.

Sur les figures 5.11, sont présentées la vorticité et les fractions massiques des produits H_2O, O, HO_2, OH et H à t=14 μs. La figure 5.11a atteste de l'importance du tourbillon central dont le cœur est bien de vorticité négative. De plus, ces figures couplées à celles de Y_{H_2} (fig. 5.9c) et de température (fig. 5.10d) au même instant nous permettent d'identifier trois zones distinctes de combustion. La première correspond au reste de la flamme de diffusion près de la ligne de symétrie droite. Cette flamme est progressivement en train de s'éteindre puisqu'il n'y a quasiment plus de H_2 ni de radical H. En effet, la présence d'H_2O ou de radicaux O, HO_2 et OH en grande quantité ne peut pas suffire à maintenir une flamme. La seconde zone de combustion identifiable est localisée au sein du cœur du tourbillon central. La température y est beaucoup moins élevée que dans la première zone puisqu'elle est inférieure à 1700 K. On observe la présence d'un mélange de H_2 non brûlé, d'air frais et de radicaux comme HO_2 formés dans la première zone et ayant été entraînés par le tourbillon jusque dans son cœur. La dernière zone de combustion est la plus active. Cette zone est située entre l'enveloppe de la bulle de H_2 et l'air qui l'entoure. À t=14 μs, cette flamme de diffusion est bien établie : la température atteint des valeurs supérieures à 2300 K et d'importantes quantités de vapeur d'eau et de radicaux O, HO_2, OH, et H sont produites à cet endroit.

Résumé

Ce cas test très sévère nous a permis de montrer les capacités du schéma WENO à reproduire correctement une physique complexe. Les résultats obtenus ici sont en effet très proches de ceux présentés dans l'article de Billet *et al.*. Ces simulations Navier-Stokes ont également été réalisées sans transport moléculaire (résolution des équations d'Euler, résultats non présentés) et on constate peu de différence entre les résultats. En effet, les vitesses mises en jeu sont suffisamment grandes pour que les temps caractéristiques de la mécanique des fluides prédominent les temps chimiques liés au transport moléculaire.



(a) t=1,5 μs.

(b) t=2 μs.

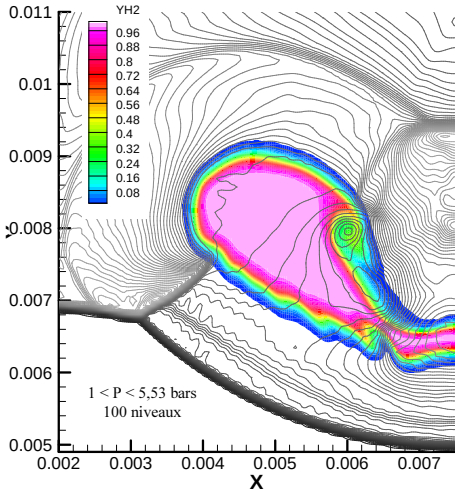
(c) t=2,5 μs.

(d) t=3 μs.

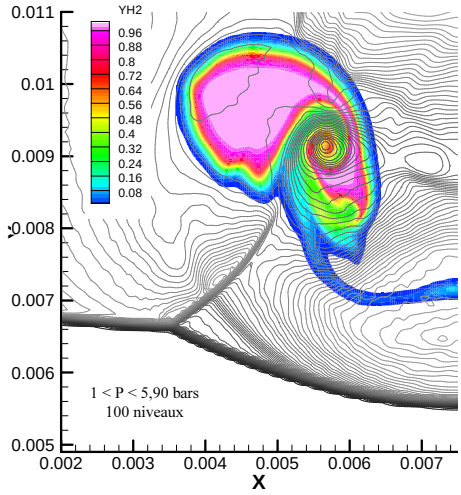
(e) t=3,5 μs.

(f) t=4 μs.

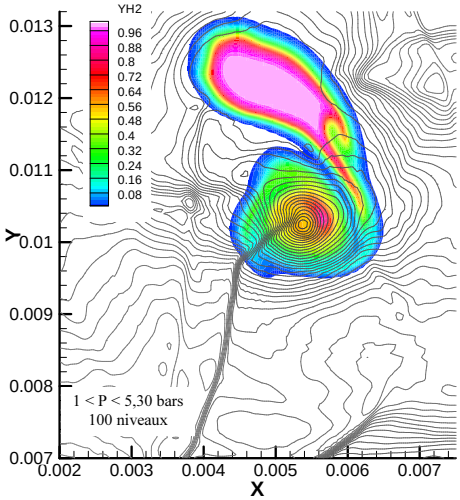
FIG. 5.8: Pression (couleur) et fraction massique de H2 (iso-contours) à différents instants.



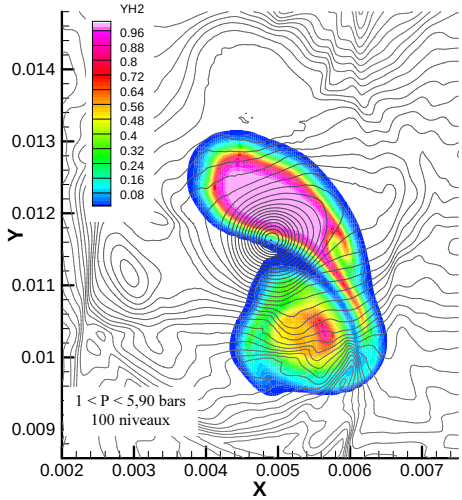
(a) t=6 μs.



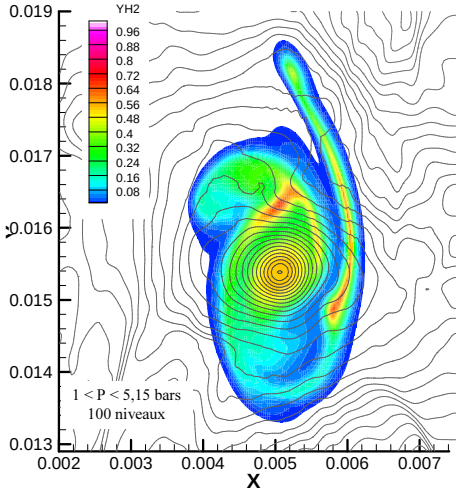
(b) t=9 μs.



(c) t=14 μs.

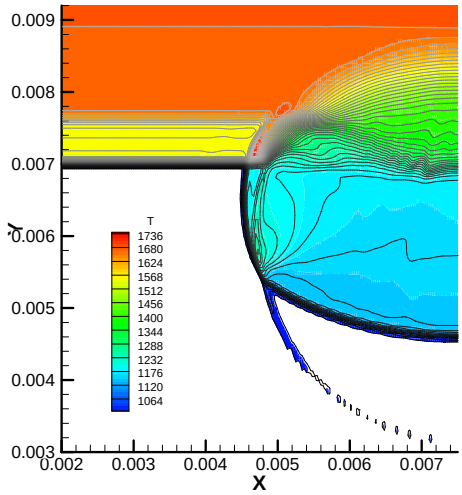


(d) t=17 μs.

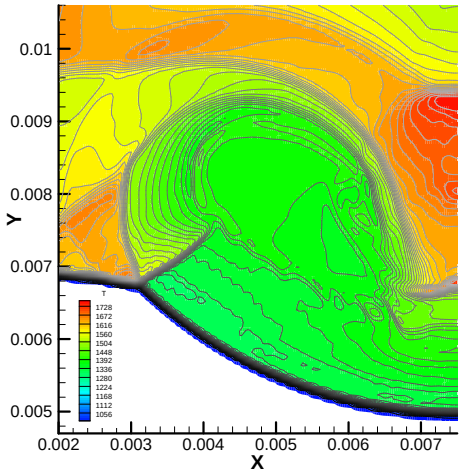


(e) t=25 μs.

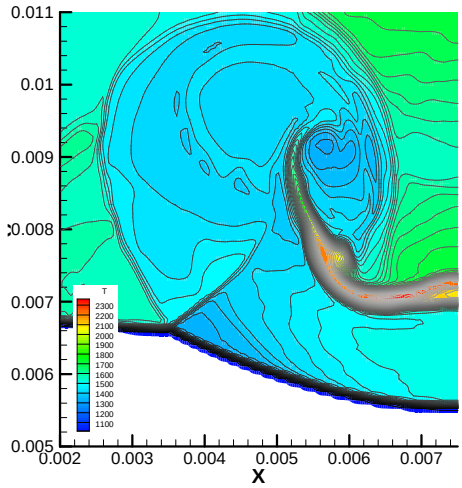
FIG. 5.9: Pression (couleur) et fraction massique de H2 (iso-contours) à différents instants.



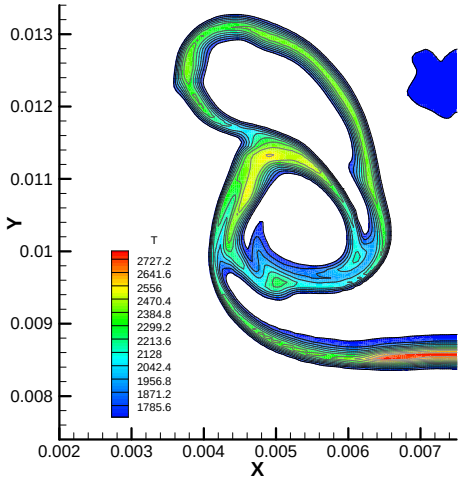
(a) t=1,5 μs.



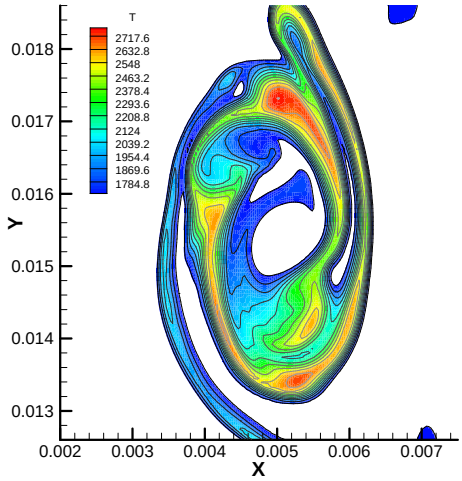
(b) t=6 μs.



(c) t=9 μs.

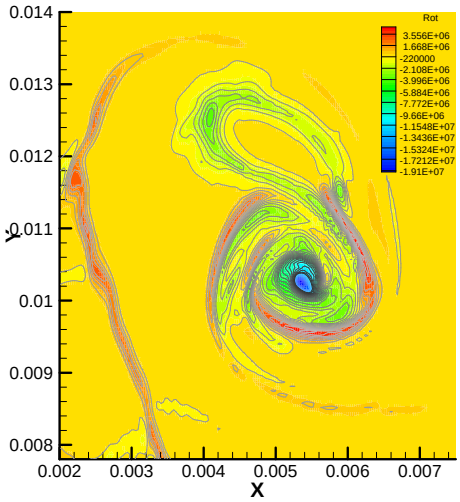


(d) t=14 μs.

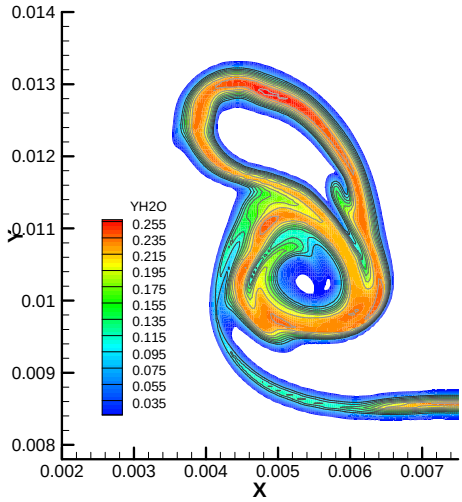


(e) t=25 μs.

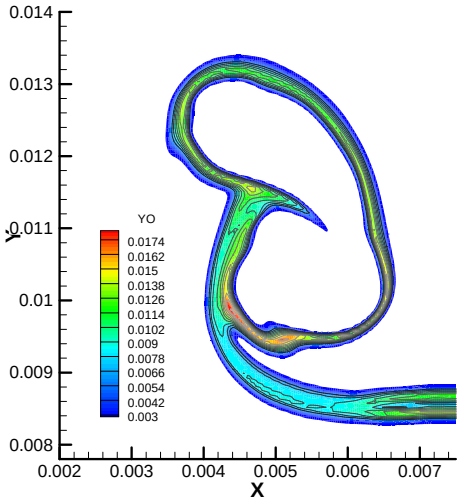
FIG. 5.10: Température (iso-contours) à différents instants.



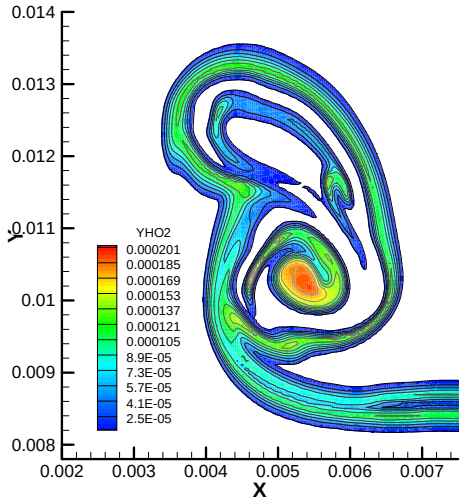
(a) Vorticité à t=14 μs.



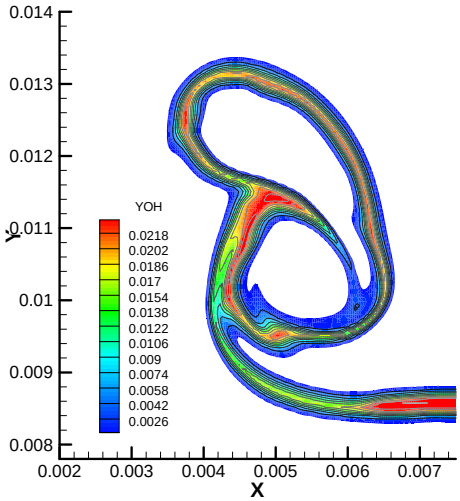
(b) Fraction massique de H_2O à t=14 μs.



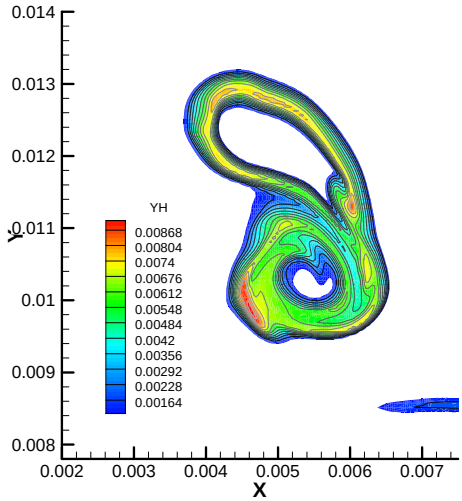
(c) Fraction massique de O à t=14 μs.



(d) Fraction massique de HO_2 à t=14 μs.



(e) Fraction massique de OH à t=14 μs.



(f) Fraction massique de H à t=14 μs.

FIG. 5.11: Vorticité et fractions massiques de H_2O, O, HO_2, OH, H à t=14 μs.

Conclusion générale

Ce travail a permis de doter l'institut ICARE de deux codes d'approches et de portées différentes. D'un côté, le code Compact permet de simuler des écoulements compressibles réactifs dans le but de développer des modèles de turbulence et de combustion. L'effort consenti sur l'optimisation et la parallélisation de ce code ont rendu celui-ci performant et la faisabilité de simulations 3D réactives avec chimie détaillée a ainsi été démontrée. De l'autre coté, nous disposons d'un code WENO dont l'objectif est de simuler des écoulements plus réalistes (nombres de Reynolds élevés,...). Ce code a été développé avec un soin particulier dans l'optique de devenir la plate-forme numérique d'ICARE. Sa structure en bloc de données ou d'exécution le rend facilement modifiable et pratique d'un point de vue de l'utilisateur.

Cette étude est également une contribution à l'analyse des schémas WENO d'ordre 3 à 11. L'extension du code WENO au cas réactif a permis de mettre en avant les problèmes classiques rencontrés lors des calculs multi-espèces, et valider l'utilisation de la méthode de Larrouturou en vue du respect du principe du maximum. Les schémas des différents ordres couplés aux différentes reconstructions possibles ont été testés sur de nombreux cas test numériques élémentaires. Il en ressort que les schémas WENO d'ordre inférieur à 5 ainsi que la reconstruction directe avec ou sans méthode Larroututou sont à proscrire car trop dissipatifs. La montée en ordre (jusqu'à l'ordre 9) est à favoriser par rapport au raffinage du maillage car moins cher en temps CPU. On a également montré que le schéma d'ordre 11 est instable. Il s'est avéré que la méthode de Larrouturou n'améliore que légèrement les résultats sur les simulations homogènes (flammes cylindriques 2D) présentées dans ce mémoire, mais reste néanmoins intéressante car cohérente numériquement. Les schémas WENO donnent ainsi des résultats tout à fait corrects comparés à la DNS même sur des cas test de flammes laminaires prémélangées dans lesquels le transport moléculaire a une place primordiale. Enfin, les simulations présentées dans le chapitre (5.2) ont démontré la faisabilité du schéma WENO à appréhender une physique complexe et sont encourageantes pour réaliser de véritables simulations MILES en 3D.

Sur la base de nos résultats, les perspectives de ce travail pourraient porter sur :
- l'extension du code WENO à une configuration 3D (travail relativement aisé compte tenu de la structure du code) ;
- l'introduction de la procédure WENO MUSTA développée par Toro qui semble réduire la diffusion numérique de manière notable sur ces cas présentés dans [127] ;
- l'application du code à des géométries 3D réelles : de portée industrielle ;
- l'introduction d'un modèle sous-maille explicite en vue d'une comparaison avec ou sans.

Annexes

Annexe A

Bases thermodynamiques

Les bases thermodynamiques données dans les tableaux A.2 et A.3 sont présentées dans le format CHEMKIN (tableau A.1). Ces données sont stokées sous forme de coefficients de polynomiaux pour le calcul de la chaleur massique adimensionnée Cp_α/R, de l'enthalpie H°/RT et de l'entropie S°/RT. Deux polynômes sont nécessaires pour couvrir la plage de température $[T_{min} - T_{max}]$. On rappelle que la chaleur spécifique à pression constante :

$$\frac{Cp_\alpha}{R} = Cp_{0\alpha} + TCp_{1\alpha} + Cp_{2\alpha}T^2 + Cp_{3\alpha}T^3 + Cp_{4\alpha}T^4 \tag{A.1}$$

espèce		T_{min} (K)	T_{max} (K)	M (g.mol^{-1})
$Cp_{0,H}$	$Cp_{1,H}$	$Cp_{2,H}$	$Cp_{3,H}$	$Cp_{4,H}$
$Cp_{5,H}$	$Cp_{6,H}$	$Cp_{0,L}$	$Cp_{1,L}$	$Cp_{2,L}$
$Cp_{3,L}$	$Cp_{4,L}$	$Cp_{5,L}$	$Cp_{6,L}$	

Tab. A.1: Format des bases thermodynamiques.

L'indice L correspond au polynôme couvrant la plage de température [T_{min}-1000 K] et l'indice H correspond au polynôme couvrant la plage de température [1000 K-T_{max}]. Les coefficients Cp_5 et Cp_6 servent à évaluer l'enthalpie ΔH_r^0 et l'entropie ΔS_r^0 du système. Pour chaque espèce, on donne également la plage de température valide et la masse molaire.

H		300	5000	1,00794
0,25000000E+01	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00
0,25473660E+05	-0,44668285E+00	0,25000000E+01	0,00000000E+00	0,00000000E+00
0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,25473660E+05	-0,44668285E+00	
H_2		300	5000	2,01588
0,29328305E+01	0,82659802E−03	-0,14640057E−06	0,15409851E−10	-0,68879615E−15
-0,81305582E+03	-0,10243164E+01	0,23443029E+01	0,79804248E−02	-0,19477917E−04
0,20156967E−07	-0,73760289E−11	-0,91792413E+03	0,68300218E+00	
O		300	5000	15,99940
2,54363697E+00	-2,73162486E−05	-4,19029520E−09	4,95481845E−12	-4,79553694E−16
2,92260120E+04	4,92229457E+00	3,16826710E+00	-3,27931884E−03	6,64306396E−06
-6,12806624E−09	2,11265971E−12	2,91222592E+04	2,05193346E+00	
O_2		300	5000	31,99880
3,66096083E+00	6,56365523E−04	-1,41149485E−07	2,05797658E−11	-1,29913248E−15
-1,21597725E+03	3,41536184E+00	3,78245636E+00	-2,99673415E−03	9,84730200E−06
-9,68129508E−09	3,24372836E−12	-1,06394356E+03	3,65767573E+00	
OH		300	5000	17,00734
2,83864607E+00	1,10725586E−03	-2,93914978E−07	4,20524247E−11	-2,42169092E−15
3,94395852E+03	5,84452662E+00	3,99201543E+00	-2,40131752E−03	4,61793841E−0
-3,88113333E−09	1,36411470E−12	3,61508056E+03	-1,03925458E−01	
H_2O		300	5000	18,01528
0,26770389E+01	0,29731816E−02	-0,77376889E−06	0,94433514E−10	-0,42689991E−14
-0,29885894E+05	0,68825500E+01	0,41986352E+01	-0,20364017E−02	0,65203416E−05
-0,54879269E−08	0,17719680E−11	-0,30293726E+05	-0,84900901E+00	
Ar		200	6000	39,94800
0,25000000E+01	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00
-0,74537500E+03	0,43796749E+01	0,25000000E+01	0,00000000E+00	0,00000000E+00
0,00000000E+00	0,00000000E+00	-0,74537500E+03	0,43796749E+01	

Tab. A.2: Base thermodynamique de Burcat.

H		300	5000	1,00794
0,02500000E+02	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00
0,02547163E+06	-0,04601176E+01	0,02500000E+02	0,00000000E+00	0,00000000E+00
0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,02547163E+06	-0,04601176E+01	
H_2		300	5000	2,01588
0,02991423E+02	0,07000644E−02	-0,05633829E−06	-0,09231578E−10	0,01582752E−13
-0,08350340E+04	-0,01355110E+02	0,03298124E+02	0,08249442E−02	-0,08143015E−05
-0,09475434E−09	0,04134872E−11	-0,01012521E+05	-0,03294094E+02	
O		300	5000	15,99940
0,02542060E+02	-0,02755062E−03	-0,03102803E−07	0,04551067E−10	-0,04368052E−14
0,02923080E+06	0,04920308E+02	0,02946429E+02	-0,01638166E−01	0,02421032E−04
-0,01602843E−07	0,03890696E−11	0,02914764E+06	0,02963995E+02	
O_2		300	5000	31,99880
0,03697578E+02	0,06135197E−02	-0,01258842E−05	0,01775281E−09	-0,01136435E−13
-0,01233930E+05	0,03189166E+02	0,03212936E+02	0,01127486E−01	-0,05756150E−05
0,01313877E−07	-0,08768554E−11	-0,01005249E+05	0,06034738E+02	
OH		300	5000	17,00734
0,02882730E+02	0,01013974E−01	-0,02276877E−05	0,02174684E−09	-0,05126305E−14
0,03886888E+05	0,05595712E+02	0,03637266E+02	0,01850910E−02	-0,01676165E−04
0,02387203E−07	-0,08431442E−11	0,03606782E+05	0,01358860E+02	
HO_2		300	5000	33,00674
0,04072191E+02	0,02131296E−01	-0,05308145E−05	0,06112269E−09	-0,02841165E−13
-0,01579727E+04	0,03476029E+02	0,02979963E+02	0,04996697E−01	-0,03790997E−04
0,02354192E−07	-0,08089024E−11	0,01762274E+04	0,09222724E+02	
H_2O		300	5000	18,01528
0,02672146E+02	0,03056293E−01	-0,08730260E−05	0,01200996E−08	-0,06391618E−13
-0,02989921E+06	0,06862817E+02	0,03386842E+02	0,03474982E−01	-0,06354696E−04
0,06968581E−07	-0,02506588E−10	-0,03020811E+06	0,02590233E+02	
H_2O_2		300	5000	34,01468
0,04573167E+02	0,04336136E−01	-0,01474689E−04	0,02348904E−08	-0,01431654E−12
-0,01800696E+06	0,05011370E+01	0,03388754E+02	0,06569226E−01	-0,01485013E−05
-0,04625806E−07	0,02471515E−10	-0,01766315E+06	0,06785363E+02	
N2		300	5000	28,01348
0,02926640E+02	0,01487977E−01	-0,05684761E−05	0,01009704E−08	-0,06753351E−13
-0,09227977E+04	0,05980528E+02	0,03298677E+02	0,01408240E−01	-0,03963222E−04
0,05641515E−07	-0,02444855E−10	-0,01020900E+05	0,03950372E+02	

Tab. A.3: Base thermodynamique de CHEMKIN.

Annexe B

Coefficients de transport

Les coefficients des régressions en polynôme de degré 2 pour la conductivité thermique et la viscosité, et en puissance pour les coefficients de diffusion binaire sont explicités dans cette annexe.

– Conductivité thermique $\lambda_\alpha = \lambda_{\alpha 0} + \lambda_{\alpha 1} T + \lambda_{\alpha 2} T^2$

α	$\lambda_{\alpha 0}$	$\lambda_{\alpha 1}$	$\lambda_{\alpha 2}$
H_2	8,252657E−02	3,571108E−04	-1,065945E−08
O_2	7,823695E−03	6,765939E−05	-4,206463E−09
H	1,324366E−01	6,079185E−04	-5,378665E−08
O	2,463573E−02	8,861247E−05	-7,426621E−09
OH	2,303120E−02	1,220661E−04	-5,555844E−09
H_2O	-2,298272E−02	1,501943E−04	-2,770068E−09
HO_2	3,733914E−04	9,993615E−05	-6,295015E−09
H_2O_2	-3,053418E−02	1,429909E−04	-1,008719E−08
N_2	8,124867E−03	6,467204E−05	-4,751436E−09

Tab. B.1: Coefficients de la régression polynomiale pour la conductivité thermique.

– Viscosité $\mu_\alpha = \mu_{\alpha 0} + \mu_{\alpha 1} T + \mu_{\alpha 2} T^2$

α	$\mu_{\alpha 0}$	$\mu_{\alpha 1}$	$\mu_{\alpha 2}$
H_2	4,817404E−06	1,558606E−08	-1,263024E−12
O_2	1,005179E−05	3,965070E−08	-3,402360E−12
H	4,281418E−06	1,965283E−08	-1,738818E−12
O	1,264157E−05	4,547059E−08	-3,810896E−12
OH	1,303709E−05	4,687465E−08	-3,927133E−12
H_2O	-1,447952E−06	4,034792E−08	-2,764521E−12
HO_2	1,020888E−05	4,027037E−08	-3,455532E−12
H_2O_2	1,036359E−05	4,088064E−08	-3,507898E−12
N_2	8,959686E−06	3,408293E−08	-2,898343E−12

Tab. B.2: Coefficients de la régression polynomiale pour la viscosité.

– Coefficient de diffusion binaire $D_{\alpha\beta} = \frac{1}{p} D_{\alpha\beta 0} T^{b_{\alpha\beta}}$

α_1	α_2	$\lambda_{\alpha 0}$	$b_{\alpha\beta}$
H_2	H_2	1,169336E−08	1,655943
O_2	H_2	6,491853E−09	1,660466
O_2	O_2	1,567353E−09	1,672389
H	H_2	1,700467E−08	1,662801
H	O_2	9,259134E−09	1,683814
H	H	2,165726E−08	1,685359
O	H_2	8,765136E−09	1,657728
O	O_2	2,533007E−09	1,668124
O	H	1,338447E−08	1,675000
O	O	3,908707E−09	1,664289
OH	H_2	8,738485E−09	1,657728
OH	O_2	2,481736E−09	1,668088
OH	H	1,336130E−08	1,675031
OH	O	3,850414E−09	1,664290
OH	OH	3,791110E−09	1,664289
H_2O	H_2	5,802656E−09	1,697037
H_2O	O_2	1,267896E−09	1,737231
H_2O	H	6,695257E−09	1,750332
H_2O	O	2,362321E−09	1,711888
H_2O	OH	2,325140E−09	1,711866
H_2O	H_2O	3,499347E−10	1,926722
HO_2	H_2	6,486533E−09	1,660470
HO_2	O_2	1,555343E−09	1,672390
HO_2	H	9,254535E−09	1,683836
HO_2	O	2,520463E−09	1,668143
HO_2	OH	2,468914E−09	1,668106
HO_2	H_2O	1,370587E−09	1,726684
HO_2	HO_2	1,543235E−09	1,672389
H_2O_2	H_2	6,481527E−09	1,660473
H_2O_2	O_2	1,543963E−09	1,672392
H_2O_2	H	9,250203E−09	1,683857
H_2O_2	O	2,508613E−09	1,668162
H_2O_2	OH	2,456799E−09	1,668124
H_2O_2	H_2O	1,362605E−09	1,726792
H_2O_2	HO_2	1,531762E−09	1,672390
H_2O_2	H_2O_2	1,520198E−09	1,672389
N_2	H_2	6,277844E−09	1,659863
N_2	O_2	1,579563E−09	1,670803
N_2	H	8,972560E−09	1,681871
N_2	O	2,502788E−09	1,666851
N_2	OH	2,454388E−09	1,666818
N_2	H_2O	1,294409E−09	1,731984
N_2	HO_2	1,568285E−09	1,670807
N_2	H_2O_2	1,557605E−09	1,670813
N_2	N_2	1,591546E−09	1,669076

Tab. B.3: Coefficients de la régression en puissance pour la diffusion binaire.

Annexe C

Schémas cinétiques

Les schémas cinétiques de Mass et Warnatz, de Dagaut et de l'ONERA sont explicités dans les tableaux C.3, C.2 et C.4. Le troisième corps est noté M. On rappelle que la constante de vitesse de la réaction élémentaire r s'exprime *via* la loi d'Arrhenius généralisée :

$$K_r = A_r T^{b_r} \exp\left(-\frac{E_r}{\mathcal{R}T}\right)$$

où A_r est le facteur pré-exponentiel et E_r l'énergie d'activation.
Les efficacités des espèces intervenant dans chacun des schémas cinétiques sont récapitulées dans le tableau suivant pour les trois schémas cinétiques :

	H	H_2	H_2O	H_2O_2	HO_2	O	OH	O_2	N_2	Ar
Maas et Warnatz	0,0	1,0	6,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,35	0,5	
Dagaut	0,0	2,5	16,25	0,0	0,0	0,0	0,0	1,00	1,0	
ONERA	1,0	2,5	12			1,0	1,0	1,00		1,0

Tab. C.1: Efficacité des espèces intervenant dans les schémas cinétiques.

i	Réaction	A_r (cm.mol.s)	b_r	E_r (kJ.mol^{-1})
1	$H_2 + O_2 \longrightarrow OH + OH$	1,70E+13	0,0	199,9122
2	$OH + OH \longrightarrow H_2 + O_2$	4,03E+10	0,3168	121,0074
3	$H + O_2 \longrightarrow OH + O$	1,99E+14	0,0	70,3043
4	$O + OH \longrightarrow H + O_2$	8,93E+11	0,3383	-0,9778
5	$H_2 + OH \longrightarrow H_2O + H$	1,02E+08	1,6	13,8008
6	$H + H_2O \longrightarrow H_2 + OH$	7,96E+08	1,528	77,3248
7	$H_2 + O \longrightarrow OH + H$	5,12E+04	2,67	26,3016
8	$OH + H \longrightarrow H_2 + O$	2,70E+04	2,649	18,6212
9	$OH + OH \longrightarrow H_2O + O$	1,51E+09	1,14	0,4142
10	$H_2O + O \longrightarrow OH + OH$	2,22E+10	1,089	71,6144
11	$H + OH + M \longrightarrow H_2O + M$	2,21E+22	-2,0	0,0
12	$H_2O + M \longrightarrow H + OH + M$	8,94E+22	-1,835	496,7304
13	$H + H + M \longrightarrow H_2 + M$	9,79E+16	-0,6	0,0
14	$H_2 + M \longrightarrow H + H + M$	5,09E+16	-0,3624	433,2265

Tab. C.2: Schéma cinétique H_2/air de l'ONERA.

i	Réaction	A_r (cm.mol.s)	b_r	E_r (kJ.mol^{-1})
1	$H_2 + O_2 \longrightarrow OH + OH$	1,70E+13	0,0	199,9832
2	$OH + OH \longrightarrow H_2 + O_2$	2,66E+10	0,3673	120,5769
3	$H_2 + OH \longrightarrow H_2O + H$	2,16E+08	1,51	14,3563
4	$H_2O + H \longrightarrow H_2 + OH$	1,10E+10	1,2185	80,8722
5	$O + H_2 \longrightarrow OH + H$	3,87E+04	2,7	26,2012
6	$OH + H \longrightarrow O + H_2$	2,89E+04	2,6368	18,9854
7	$H + O_2 \longrightarrow OH + O$	1,90E+14	0,0	70,3666
8	$OH + O \longrightarrow H + O_2$	3,99E+11	0,4305	-1,8249
9	$H_2O + O \longrightarrow OH + OH$	1,50E+10	1,14	72,2417
10	$OH + OH \longrightarrow H_2O + O$	2,19E+08	1,3684	-1,49
11	$H + HO_2 \longrightarrow H_2 + O_2$	6,62E+13	0,0	8,9151
12	$H_2 + O_2 \longrightarrow H + HO_2$	4,24E+12	0,4771	234,162
13	$H + HO_2 \longrightarrow OH + OH$	4,95E+13	0,0	0,5985
14	$OH + OH \longrightarrow H + HO_2$	4,97E+09	0,8443	146,438
15	$HO_2 + OH \longrightarrow H_2O + O_2$	2,89E+13	0,0	-2,0802
16	$H_2O + O_2 \longrightarrow HO_2 + OH$	9,44E+13	0,1855	289,683
17	$HO_2 + O \longrightarrow OH + O_2$	1,81E+13	0,0	-1,6742
18	$OH + O_2 \longrightarrow HO_2 + O$	8,64E+11	0,4139	216,357
19	$OH + OH \longrightarrow H_2O_2$	1,33E+16	-1,462	0,2553
20	$H_2O_2 \longrightarrow OH + OH$	2,65E+23	-2,9817	222,133
21	$H_2O_2 + H \longrightarrow HO_2 + H_2$	1,70E+12	0,0	15,6956
22	$HO_2 + H_2 \longrightarrow H_2O_2 + H$	1,01E+09	0,8256	83,3961
23	$H_2O_2 + OH \longrightarrow HO_2 + H_2O$	5,80E+14	0,0	40,0008
24	$HO_2 + H_2O \longrightarrow H_2O_2 + OH$	1,76E+13	0,534	174,217
25	$HO_2 + HO_2 \longrightarrow H_2O_2 + O_2$	4,08E+02	3,321	8,2831
26	$H_2O_2 + O_2 \longrightarrow HO_2 + HO_2$	4,38E+04	2,9725	165,83
27	$H + H + M \longrightarrow H_2 + M$	7,31E+17	-1,0	0,0
28	$H_2 + M \longrightarrow H + H + M$	8,72E+17	-0,8498	435,413
29	$H + OH + M \longrightarrow H_2O + M$	8,62E+21	-2,0	0,0
30	$H_2O + M \longrightarrow H + OH + M$	5,24E+23	-2,1414	501,929
31	$O + H + M \longrightarrow OH + M$	6,20E+16	-0,6	0,0
32	$OH + M \longrightarrow O + H + M$	5,51E+16	-0,513	428,198
33	$H + O_2 + M \longrightarrow HO_2 + M$	8,00E+17	-0,8	0,0
34	$HO_2 + M \longrightarrow H + O_2 + M$	1,49E+19	-1,1269	210,171

Tab. C.3: Schéma cinétique H_2/air de Dagaut.

i	Réaction	A_r (cm.mol.s)	b_r	E_r (kJ.mol^{-1})
1	$O_2 + H \longrightarrow OH + O$	2,00E+14	0,0	70,3
2	$OH + O \longrightarrow O_2 + H$	1,80E+13	0,0	0,0
3	$H_2 + O \longrightarrow OH + H$	1,50E+07	2,0	31,6
4	$OH + H \longrightarrow H_2 + O$	2,24E+04	2,67	18,4
5	$H_2 + OH \longrightarrow H_2O + H$	1,00E+08	1,6	13,8
6	$H_2O + H \longrightarrow H_2 + OH$	4,45E+08	1,6	77,13
7	$OH + OH \longrightarrow H_2O + O$	1,50E+09	1,14	0,42
8	$H_2O + O \longrightarrow OH + OH$	1,51E+10	1,14	71,64
9	$HO_2 + H \longrightarrow OH + OH$	1,50E+14	0,0	4,2
10	$OH + OH \longrightarrow HO_2 + H$	1,33E+13	0,0	168,3
11	$HO_2 + H \longrightarrow H_2 + O_2$	2,50E+13	0,0	2,9
12	$H_2 + O_2 \longrightarrow HO_2 + H$	6,84E+13	0,0	243,1
13	$HO_2 + H \longrightarrow H_2O + O$	3,00E+13	0,0	7,2
14	$H_2O + O \longrightarrow HO_2 + H$	2,67E+13	0,0	242,52
15	$HO_2 + O \longrightarrow OH + O_2$	1,80E+13	0,0	-1,7
16	$OH + O_2 \longrightarrow HO_2 + O$	2,18E+13	0,0	230,61
17	$HO_2 + OH \longrightarrow H_2O + O_2$	6,00E+13	0,0	0,0
18	$H_2O + O_2 \longrightarrow HO_2 + OH$	7,31E+14	0,0	303,53
19	$HO_2 + HO_2 \longrightarrow H_2O_2 + O_2$	2,50E+11	0,0	-5,2
20	$H_2O_2 + H \longrightarrow H_2 + HO_2$	1,70E+12	0,0	15,7
21	$H_2 + HO_2 \longrightarrow H_2O_2 + H$	1,15E+12	0,0	80,88
22	$H_2O_2 + H \longrightarrow H_2O + OH$	1,00E+13	0,0	15
23	$H_2O + OH \longrightarrow H_2O_2 + H$	2,67E+12	0,0	307,51
24	$H_2O_2 + O \longrightarrow OH + HO_2$	2,80E+13	0,0	26,8
25	$OH + HO_2 \longrightarrow H_2O_2 + O$	8,40E+12	0,0	84,09
26	$H_2O_2 + OH \longrightarrow H_2O + HO_2$	5,40E+12	0,0	4,2
27	$H_2O + HO_2 \longrightarrow H_2O_2 + OH$	1,63E+13	0,0	132,71
28	$H + H + M \longrightarrow H_2 + M$	9,70E+16	-0,6	0,0
29	$H_2 + M \longrightarrow H + H + M$	8,80E+14	0,0	402,08
30	$H + OH + M \longrightarrow H_2O + M$	2,20E+22	-2,0	0,0
31	$H_2O + M \longrightarrow H + OH + M$	3,80E+23	-2,0	499,41
32	$O + O + M \longrightarrow O_2 + M$	2,90E+17	-1,0	0,0
33	$O_2 + M \longrightarrow O + O + M$	6,81E+18	-1,0	496,41
34	$H + O_2 + M \longrightarrow HO_2 + M$	2,30E+18	-0,8	0,0
35	$HO_2 + M \longrightarrow H + O_2 + M$	3,26E+18	-0,8	195,88
36	$OH + OH + M \longrightarrow H_2O_2 + M$	3,25E+22	-2,0	0,0
37	$H_2O_2 + M \longrightarrow OH + OH + M$	2,10E+24	-2,0	206,8

TAB. C.4: Schéma cinétique H_2/air de Maas et Warnatz.

Annexe D

Matrices de passage

On exprime dans cette annexe, les différentes matrices de passage considérées dans cette étude. On note $N_{esp} = N$ dans la suite.

D.1 Matrices de passage des variables primitives aux variables conservatives

On considère le vecteur des variables conservatives suivant :

$$\vec{\tilde{U}} = [\rho,\, \rho u,\, \rho v,\, \rho w,\, \rho e_t,\, \rho Y_1,\, \ldots,\, \rho Y_{N-1}]^T$$

et le vecteur des variables primitives associé :

$$\vec{U} = [\rho,\, u,\, v,\, w,\, T,\, Y_1,\, \ldots,\, Y_{N-1}]^T$$

$\mathbf{P}$ et $\mathbf{P}^{-1}$ sont les matrices de passage des variables conservatives aux variables primitives et inversement. Elles sont données ci-dessous.

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ u & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ v & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ w & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ P_{5,1} & \rho u & \rho v & \rho w & \rho C v & P_{5,6} & P_{5,7} & \cdots & \cdots & P_{5,N+4} \\ Y_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ Y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ Y_{N-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \rho \end{pmatrix}$$

avec

- $P_{5,1} = h - rT + 1/2 u_i u_i$
- $P_{5,5+\alpha} = \rho[h_\alpha - h_N - (r_\alpha - r_N)T]$ avec α=1,...,N-1

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -u/\rho & 1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -v/\rho & 0 & 1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -w/\rho & 0 & 0 & 1/\rho & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ P_{5,1}^{-1} & \frac{-u}{\rho Cv} & \frac{-v}{\rho Cv} & \frac{-w}{\rho Cv} & \frac{1}{\rho Cv} & P_{5,6}^{-1} & P_{5,7}^{-1} & \cdots & \cdots & P_{5,N+4}^{-1} \\ -Y_1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\rho & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -Y_2/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\rho & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ -Y_{N-1}/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/\rho \end{pmatrix}$$

avec

- $P_{5,1}^{-1} = \frac{1}{\rho Cv}[r_N T - h_N + 1/2 u_i u_i]$
- $P_{5,5+\alpha}^{-1} = \frac{1}{\rho Cv}[(r_\alpha - r_N)T - (h_\alpha - h_N -)]$ avec α=1,...,N-1

D.2 Matrices de passage des variables primitives aux variables caractéristiques

L'identification du système (2.34) avec les équations multi-espèces compressibles permet d'exprimer la matrice **A**. En considérant la direction x, la matrice **A** associée aux vecteurs définis dans la section précédente s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \frac{RT}{\rho M} & u & 0 & 0 & \frac{R}{M} & A_{2,6} & A_{2,7} & \cdots & A_{2,N+4} \\ 0 & 0 & u & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 & \cdots & \cdots & & \vdots \\ 0 & \frac{RT}{C_v M} & 0 & 0 & u & 0 & \cdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 & u & 0 & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & 0 & u & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}$$

avec $A_{2,5+i} = R(1/M_\alpha - 1/M)$ i=1,...,N$_{esp} - 1$.

La matrice **A** est diagonalisée grâce aux matrices de vecteurs propres droites **S** et gauches

$\mathbf{S}^{-1}$ (définie en § 2.2.3) selon la relation $\mathbf{A} = \mathbf{S}\Lambda\mathbf{S}^{-1}$. La matrice diagonale Λ s'écrit :

$$\begin{pmatrix} u-c & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & u & 0 & & & & & \vdots \\ \vdots & 0 & u & 0 & & & & \vdots \\ \vdots & & 0 & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & 0 & u & 0 & \vdots \\ \vdots & & & & & 0 & u & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & u+c \end{pmatrix}$$

Il reste à calculer les matrices de vecteurs propres droites et gauches de $\mathbf{A}$. Leur expression est donnée ci-dessous :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{\rho Cp}{c^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \frac{\rho Cp}{c^2} \\ -\frac{Cp}{c} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \frac{Cp}{c} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-r}{(r_1-r_N)T} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{-r}{(r_1-r_{esp})\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-r}{(r_2-r_N)T} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{-r}{(r_2-r_N)T} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}^{-1} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{T}{\rho} & -\frac{c}{2Cp} & 0 & 0 & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right) & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{r_1-r_N}{\overline{r}}T & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{r_2-r_N}{\overline{r}}T & \cdots & \cdots & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{r_{N-1}-r_N}{\overline{r}}T \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -\left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)\frac{T}{\rho} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\gamma} & -\left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)\frac{r_1-r_N}{\overline{r}}T & \frac{r_2-r_N}{\gamma\overline{r}}T & \cdots & \cdots & \frac{r_{N-1}-r_N}{\gamma\overline{r}}T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{r_2-r_N}{\overline{r}}T & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{r_{N-1}-r_N}{\overline{r}}T \\ \frac{\gamma-1}{\gamma} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\rho}{\gamma T} & -\frac{\rho}{\gamma}\frac{r_1-r_N}{\overline{r}} & -\frac{\rho}{\gamma}\frac{r_2-r_N}{\overline{r}} & \cdots & \cdots & -\frac{\rho}{\gamma}\frac{r_{N-1}-r_N}{\overline{r}} \\ \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{T}{\rho} & \frac{c}{2Cp} & 0 & 0 & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right) & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{r_1-r_N}{\overline{r}}T & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{r_2-r_N}{\overline{r}}T & \cdots & \cdots & \left(\frac{\gamma-1}{2\gamma}\right)\frac{r_{N-1}-r_N}{\overline{r}}T \end{pmatrix}$$

D.3 Matrices de passage des variables conservatives aux variables caractéristiques

On donne ici les matrices de passage (2) (définies § 3.2.2) pour passer des variables conservatives aux variables caractéristiques $\mathbf{R}$ et $\mathbf{R}^{-1}$. Ceux-ci peuvent être évalués directement en diagonalisant la matrice jacobienne $\widetilde{\mathbf{A}}$ ou par les relations $\mathbf{R} = \mathbf{PS}$ et $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{P}^{-1}$.

$$
\mathbf{R} = \begin{pmatrix}
\frac{\rho C_p}{c^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & \frac{\rho C_p}{c^2} \\
\frac{\rho C_p}{c^2}(u-c) & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & u & \frac{\rho C_p}{c^2}(u+c) \\
\frac{\rho C_p}{c^2}v & \rho & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & v & \frac{\rho C_p}{c^2}v \\
\frac{\rho C_p}{c^2}w & 0 & \rho & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & w & \frac{\rho C_p}{c^2}w \\
\frac{\rho C_p}{c^2}(h+K-uc) & \rho v & \rho w & R_{5,4} & R_{5,5} & \dots & \dots & R_{5,N+3} & h - r\frac{h_1-h_N}{r_1-r_N} + K & \frac{\rho C_p}{c^2}(h+K+uc) \\
\frac{\rho C_p}{c^2}Y_1 & 0 & 0 & -\frac{\rho r}{(r_1-r_N)T} & 0 & \dots & \dots & 0 & Y_1 - \frac{r}{r_1-r_N} & \frac{\rho C_p}{c^2}Y_1 \\
\frac{\rho C_p}{c^2}Y_2 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\rho r}{(r_2-r_N)T} & \dots & \dots & 0 & Y_2 & \frac{\rho C_p}{c^2}Y_2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 & \vdots & \vdots \\
\frac{\rho C_p}{c^2}Y_{N-1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & -\frac{\rho r}{(r_{N-1}-r_N)T} & Y_{N-1} & \frac{\rho C_p}{c^2}Y_{N-1}
\end{pmatrix}
$$

et

$$
\mathbf{R}^{-1} = \begin{pmatrix}
R^{-1}_{1,1} & -\frac{c+(\gamma-1)u}{2\rho C_p} & -\frac{v(\gamma-1)}{2\rho C_p} & -\frac{w(\gamma-1)}{2\rho C_p} & \frac{\gamma-1}{2\rho C_p} & R^{-1}_{1,6} & R^{-1}_{1,7} & \dots & \dots & R^{-1}_{1,N+4} \\
-\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
-\frac{w}{\rho} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
R^{-1}_{4,1} & -\frac{u}{\rho C_p} & -\frac{v}{\rho C_p} & -\frac{w}{\rho C_p} & \frac{1}{\rho C_p} & -\frac{h_1-h_N}{\rho C_p} & \frac{(r_2-r_N)T}{\rho r} - \frac{h_2-h_N}{\rho C_p} & \dots & \dots & \frac{(r_{N-1}-r_N)T}{\rho r} - \frac{h_{N-1}-h_N}{\rho C_p} \\
\frac{(r_2-r_N)T}{\rho r}Y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{r_2-r_N}{\rho r}T & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\
\frac{(r_{N-1}-r_N)T}{\rho r}Y_{N-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\frac{(r_{N-1}-r_N)T}{\rho r} \\
\frac{r-r_N}{r} - \frac{-h_N+K}{C_pT} & \frac{u}{C_pT} & \frac{v}{C_pT} & \frac{w}{C_pT} & -\frac{1}{C_pT} & -\frac{r_1-r_N}{r} + \frac{h_1-h_N}{C_pT} & \dots & \dots & \dots & -\frac{r_{N-1}-r_N}{r} + \frac{h_{N-1}-h_N}{C_pT} \\
R^{-1}_{N+4,1} & \frac{c-(\gamma-1)u}{2\rho C_p} & -\frac{v(\gamma-1)}{2\rho C_p} & -\frac{w(\gamma-1)}{2\rho C_p} & \frac{\gamma-1}{2\rho C_p} & R^{-1}_{N+4,6} & R^{-1}_{N+4,7} & \dots & \dots & R^{-1}_{N+4,N+4}
\end{pmatrix}
$$

avec

- $K = 1/2 u_i u_i$
- $R_{5,\alpha+3} = \rho C_p - \frac{\rho r(h_\alpha - h_N)}{T(r_\alpha - r_N)}$
- $R^{-1}_{1,1} = \frac{\gamma r_N T + (\gamma-1)(-h_N+K)+uc}{2\rho C_p}$
- $R^{-1}_{4,1} = \frac{1}{\rho C_p}\left[\frac{T\gamma}{\gamma-1}\sum_{\alpha=2}^{N}(r_N - r_\alpha)Y_\alpha - h_N + K\right]$
- $R^{-1}_{1,\alpha+5} = \frac{\gamma T(r_\alpha - r_N) - (\gamma-1)(h_\alpha - h_N)}{2\rho C_p}$ avec $\alpha = 1, \ldots, N-1$
- $R^{-1}_{N+4,1} = \frac{\gamma r_N T + (\gamma-1)(-h_N+K)-uc}{2\rho C_p}$
- $R^{-1}_{N+4,\alpha+5} = R^{-1}_{1,\alpha+5}$ avec $\alpha = 1, \ldots, N-1$

Bibliographie

[1] Abgrall, R., Karni, S. *Computations of compressible multifluids.* J. Comp. Phys. **169**, pp 594-623, 2001.

[2] Abgrall, R. *How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi conservative approach.* J. Comp. Phys. **125**, pp 150-160, 1996.

[3] Adam, Y. *Highly accurate compact implicit methods and boundary conditions.* J. Comp. Phys. **24**, pp 10-22, 1977.

[4] Adams, N.A., Shariff, K. *A high-resolution hybrid Compact-ENO scheme for shock-turbulence interaction problems.* J. Comp. Phys. **127**, pp 27-51, 1996.

[5] Adams, N.A. *Direct numerical simulation of the turbulent boundary layer along a compression ramp at M=3 and Re=1685.* J. Fluid Mech. **420**, pp 47-83, 2000.

[6] Ashurst, W., Kerstein, A., Kerr, R., et Gibson, C. *Alignment of vorticity and scalar gradient with strain rate in simulated Navier-Stokes turbulence.* Phys. Fluids **30**, pp 2343-2353, 1987.

[7] Batchelor, G. *Computation of the energy spectrum in homogeneous two-dimensional turbulence.* Phys. Fluids. Suppl., II **12**, pp 233-239, 1969.

[8] Baum, M., Poinsot, T., Haworth, D.C., et Darabiha, N. *Direct numerical simulation of H2/O2/N2 flames with complex chemistry in twodimensional turbulent flows.* J. Fluid Mech., **281**, pp 1-32, 1994.

[9] Baum, M., Poinsot, T.J., Thevenin, D. *Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows.* J. Comp. Phys., **116**, pp 247-261, 1994.

[10] Bilger, R.W. *Turbulent jet diffusion flames.* Energy Combus. Sci., **1**, pp 87-109, 1976.

[11] Bilger, R.W. *The structure of turbulent nonpremixed diffusion flames.* Energy Combus. Sci., **1**, pp 87-109, 1976.

[12] Billet, G., Giovangigli, V., de Gassowski, G. *Impact of Volume viscosity on a Shock/Hydrogen Bubble Interaction* Comb. Theory Mod., (Soumis pour publication), Rapport Interne CMAP 611, 2007.

[13] Boris, J.P., Grinstein, F.F., Oran, E.S., Kolbe, R.J. *New insights into Large Eddy Simulation.* Fluid Dynamics Research, **10**, pp 199-227, 1992.

[14] Boris, J.P., Book, D.L. *Flux Corrected Transport I, SHASTA, a fluid transport algorithm that works.* J. Comp. Phys., **11**, pp 38-69, 1973.

[15] Burcat, A. *Ideal gas thermochemical database with updates from active thermochemical tables.* Disponible sur : http ://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html, 2005.

[16] Burke, S.P., Shumann, T.E.W. *Diffusion flames.* Industrial and Engineering Chemistry, **20**, pp 998-1005, 1928.

[17] Canuto, C., Hussaini, M.Y., Quarteroni, A., et Zang, T.A. *Spectral methods in fluid dynamics.* Springer-Verlag, 1988.

[18] Carpenter, M.H., Gotlieb D., Arbabanel S. *The stability of numerical boundary treatments for compact high-order finite-difference schemes.* J. Comp. Phys. **108**, pp 272-295, 1993.

[19] Carpenter, M.H., Gotlieb D., Arbabanel S. *Stable and accurate boundary treatments for compact, high-order finite-difference schemes.* Applied Numerical mathematics **12**, pp 55-87, 1993.

[20] Chapman, S., Cowling, T.G. *The Mathematical Theory of non-uniform Gases.* The Cambridge University Press, 1952.

[21] Chen, J.Y. et Im, H.G. *Stretch effects on the burning velocity of turbulent premixed hydrogen-air flames.* Proc. Comb. Inst. **28**, pp 211-218, 2000.

[22] Chergui, J., Lavallée, P.-F. *Cours OpenMP.* Cours de formation de l'IDRIS, 2006.

[23] Chergui, J., Dupays, I., Girou, D., Requena, S., Wautelet, P. *Cours MPI-1.* Cours de formation de l'IDRIS, 2006.

[24] Cockburn, B., Shu, C.W. *Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations.* SIAM Journal on Numerical Analysis **31**, pp 607-627, 1994.

[25] Collela, P., Woodward, P.R. *The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations.* J. Comp. Phys. **54**, pp 174-201, 1984.

[26] Costa, B., Don, W.S. *High order hybrid central-WENO finite difference scheme for conservation laws.* Journal of Computational and Applied Mathematics **204**, pp 209-218, 2007.

[27] Costa, B., Don, W.S., *Multi-domain hybrid spectral-WENOnext term methods for hyperbolic conservation laws.* J. Comp. Phys., In Press, 2006.

[28] Dagaut, P. *On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel.* Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, pp 2079-2094, 2002.

[29] Davidenko, D.M., Gökalp, I., Dufour, E., Magre, P. *Systematic numerical study of the supersonic combustion in an experimental combustion chamber.* AIAA Paper 2006-7913, 14th AIAA/AHI Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, 2006.

[30] Davidenko, D.M. *Contribution au développement des outils de simulation numérique de la combustion supersonique.* Thèse de Doctorat de l'Université d'Orléans, 2005.

[31] Davidenko, D.M., Gökalp, I., Kudryavtsev, A.N. *Numerical modeling of the rotating detonation in an annular combustion chamber fed with hydrogen-oxygen mixture.* Proceedings of the European Combustion Meeting, ECM2007, Chania, Greece, 2007.

[32] de Charentenay, J. *Simulation numérique d'écoulements réactifs à faibles nombres de Mach.* Thèse, École Centrale Paris, Laboratoire d'Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (E.M2.C), 2001.

[33] Deiterding, R. *Parallel adaptive simulation of multi-dimensional detonation structures.* PhD thesis, Techn. Univ. Cottbus, 2003.

[34] Delannoy, C. *Programmer en Fortran 90.* Eyrolles, 1993.

[35] Deng, X., Maekawa H. *Compact high-order accurate nonlinear schemes.* J. Comp. Phys. **130**, pp 77-91, 1997.

[36] Dimonte, G., Schneider, M. *Density ratio dependence of Rayleigh-Taylor mixing for sustained and impulsive acceleration histories.* Physics of Fluids **12**, pp 304-321, 2000.

[37] Dimonte, G. et *al. A comparative study of the turbulent Rayleigh-Taylor (RT) instability using high-resolution 3D numerical simulations : The Alpha-Group collaboration.* Physics of Fluids **16**, pp 1668-1692, 2004.

[38] Ern, A. , Giovangigli, V. *Multicomponent Transport Algorithms.* Lecture Notes in Physics, New series monographs m24, 1994.

[39] Ern, A. , Giovangigli, V. *Fast and accurate multicomponent transport property evaluation.* J. Comp. Phys. **120**, pp 105-116, 1995.

[40] Ern, A. , Giovangigli, V. *Impact of Detailed Multicomponent Transport on Planar and Counterflow Hydrogen/Air and Methane Air Flames.* Combust. Sci. and Tech. **149**, pp 157-181, 1999.

[41] Ern, A. , Giovangigli, V. *Thermal conduction and thermal diffusion in dilute polyatomic gas mixtures.* Physica A **214**, pp 526-546, 1995.

[42] Falempin, F., Serre, L. *LEA flight test program - Status in 2005.* European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS), Moscow, Russia, 4-7 july 2005.

[43] Fedioun, I., Lardjane, N., Gökalp, I. *Revisiting numerical errors in direct and large-eddy simulations of turbulence : physical and spectral spaces analysis.* Journal of Computational Physics, **174**, pp 1-36, 2001.

[44] Fedkiw, R.P. *A survey of chemically reacting, compressible flows.* PhD thesis, UCLA, 1997.

[45] Fedkiw, R.P., Liu, X.-D., Osher, S. *A general technique for eliminating spurious Oscillations in conservative schemes for multiphase and multispecies Euler equations.* UCLA CAM Report 97-27, 1997.

[46] Fureby, C., Grinstein, F.F. *Monotonically Integrated Large Eddy Simulation of free shear flows.* AIAA Journal, **37**, pp 544-556, 1999.

[47] Gaitonde, D.V., Visbal, M.R. *Further development of a Navier-Stokes solution procedure based on hiher-order formulas.* AIAA Paper 99-0557, 37th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 1999.

[48] Gamet, L., Ducros, F., Nicoud, F., Poinsot, T. *Compact finite difference schemes on non-uniform meshes. Application to direct numerical simulations of compressible flows.* Int. J. Numer. Meth. Fluids **29**, pp 159-191, 1999.

[49] Garnier, E. *Simulation des grandes échelles en régime transonique.* Thèse de l'Université Paris XI Orsay, 2000.

[50] Génin, F., Chernyavsky, B., Menon, S. *Large Eddy Simulation of Scramjet Combustion Using a Subgrid Mixing/Combustion Model.* AIAA 2003-6950, 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Norfolk, VA, 15-19 december 2003.

[51] Ghosal, S., Moin, P. *The basic equations for the Large Eddy Simulation of turbulent flows in complex geometry.* Journal of Computational Physics, **118**, pp 24-37, 1995.

[52] Gottlieb, D., Orszag, S.A. *Numerical Analysis of Spectral Methods.* SIAM, Philadelphia, PA, 1977.

[53] Grasseau, G., Lavallée, P.-F., Voury, P. *Cours de vectorisation.* Cours de formation de l'IDRIS, 2000.

[54] Greenberg, J.M., LeRoux, A.-Y. *A well-balanced scheme for numerical processing of source terms in hyperbolic equations.* SIAM J. Numer. Anal. **33**, pp 1-16, 1996.

[55] Grinstein, F.F., Fureby, C. *Recent Progress on MILES for High-Re Flows.* Journal of Fluids Engineering **124**, pp 848-861, 2002.

[56] Grinstein, F.F., Fureby, C. *From canonical to complex flows : Recent progress on Monotonically Integrated LES.* Computing in Science and Engineering **6**, pp 37-49, 2004.

[57] Grinstein, F.F., Guirguis, R.H. *Effective viscosity in the simulation of spatially evoving shear flows with monotonic FCT models.* J. Comp. Phys. **101**, pp 165-175, 1992.

[58] Gustafsson, B., Kreiss, H.O., Sundström, A. *Stability theory of difference approximations for mixed initial boundary value problems II.* Math. Comput. **26**, pp 649-686, 1972.

[59] Habbal, A., Dervieux, A., Guillard, H., Larrouturou, B. *Explicit calculation of reactive flows with an upwind finite-element hydrodynamical code.* Rapport INRIA 690, 1987.

[60] Haras, Z., Ta'asan, S. *Higher-order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique.* J. Comp. Phys. **114**, pp 265-279, 1994.

[61] Harstad, K.G., Bellan, J. *Mixing rules for multicomponent mixture mass diffusion coefficients and thermal diffusion factors* Journal of Chemical Physics, **120** No 12, pp 5664-5673, 2004.

[62] Harten A., Engquist, B., Osher, S., Chakravarthy, S. *Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes, III.* J. Comp. Phys. **71**, pp 231-303, 1987.

[63] Hawkes, E.R., Sankaran, R., Sutherland, J.C., Chen, J.H. *Direct numerical simulation of turbulent combustion : fundamental insights towards predictive models.* J. Phys. : Conf. Ser. **16**, pp 65-79, 2005.

[64] Haworth, D.C., Blint, R.J., Cuenot, B., Poinsot, T. *Numerical simulation of turbulent propane-air combustion with nonhomogeneous reactants.* Combust. Flame **121**, pp 395-417, 2000.

[65] Hilbert, R., Thévenin, D. *Autoignition of turbulent non-premixed flames investigated using direct numerical simulations.* Combust. Flame **128**, pp 22-37, 2002.

[66] Hilbert, R., Tap, F., El-Rabii, H., Thévenin, D. *Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations.* Progress in Energy and Combustion Science **30**, pp 61-117, 2004.

[67] Hill, D.J., Pullin, D.I. *Hybrid tuned center-difference-WENO method for large eddy simulations in the presence of strong shocks.* J. Comp. Phys. **194**, pp 435-450, 2004.

[68] Hirsch, R.S. *Higher-order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique.* J. Comp. Phys. **19**, pp 90-109, 1975.

[69] Hirschfelder, J.O., Curtis, C.F., Bird, R.B. *Molecular Theory of Gases and Liquids.* Wiley, New York, 1954.

[70] Jenny, P., Müller, B., Thomann, H. *Correction of conservative Euler solvers for gas mixtures.* J. Comp. Phys. **132**, pp 91-107, 1997.

[71] Jiang, G.-S., Shu, C.-W. *Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes.* J. Comp. Phys. **126**, pp 202-228, 1996.

[72] Johnsen, E., Colonius, T. *Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems.* J. Comp. Phys. **219**, pp 715-732, 2006.

[73] Julien, J.-R. *Accélération de la convergence vers une solution stationnaire des calculs en aérothermique.* Thèse de l'Université Blaise Pascal, 1997.

[74] Karni, S. *Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm.* J. Comp. Phys. **112**, pp 31-43, 1994.

[75] Kee, R.J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M.E., Miller, J.A., Moffat, H.K. *A fortran computer code package for the evaluation of gas-phase, multicomponent transport properties.* Report SAND86-8246B, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 1986, reprinted 1992.

[76] Kee, R.J. *et al. A fortran computer code package for the evaluation of gas-phase, multicomponent transport properties. CHEMKIN Collection*, release 3.5, Reaction Design Inc., San Diego CA, 1999.

[77] Kee, R.J., Rupley, F.M., Miller, J.A. *The Chemkin Thermodynamic Data Base.* Report SAND87-8215B, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 1990.

[78] Kim, D., Kwon, J.H. *A high-order accurate hybrid scheme using a central flux scheme and a WENO scheme for compressible flowfield analysis.* J. Comp. Phys. **210**, pp 554-583, 2005.

[79] Kopal, Z. *Numerical analysis.* Wiley, New York, 1961.

[80] Kucharik, M. *Personnal communication.* 2001.

[81] Kurganov, A., Tadmor, E. *Solution of two-dimensional riemann problems for gas dynamics without riemann problem solvers.* CAM 00-34, UCLA, Los Angeles, 2000.

[82] Lardjane, N. *Étude théorique et numérique des écoulements cisaillés libres à masse volumique fortement variable.* Thèse de Doctorat de l'Université d'Orléans, 2002.

[83] Larrouturou, B. *How to preserve the mass fractions positivity when computing compressible multi-component flows.* J. Comp. Phys. **95**, pp 59-84, 1991.

[84] Latini, M., Schilling, O., Don, W.S. *Effects of WENO flux reconstruction order and spatial resolution on reshocked two-dimensional Richtmyer-Meshkov instability.* J. Comp. Phys. **221**, pp 805-839, 2007.

[85] Lax, P.D., Liu, X.-D. *Solution of two dimensional Riemann problem of gas dynamics by positive schemes.* SIAM J. on Scientific Comp. **19**, pp 319-340, 1998.

[86] Lele, S.K. *Compact finite difference schemes with spectral like resolution.* J. Comp. Phys. **103**, pp 16-42, 1992.

[87] Lesieur, M. *Turbulence in Fluids.* Kluwer., 1990.

[88] Leveque, R.J. *Wave propagation algorithms for multi-dimensional hyperbolic systems.* J. Comp. Phys. **131**, pp 327-353, 1997.

[89] Liska, R., Wendroff, B. *Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations.* SIAM Journal on Scientific Computing **25**, pp 995-1017, 2003.

[90] Liu, X.D., Osher, S., Chan, T. *Weighted essentially nonoscillatory schemes.* J. Comp. Phys. **115**, pp 200-212, 1994.

[91] Maas, U., Warnatz, J. *Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures.* Combustion and flame **74**, pp 53-69 , 1988.

[92] Mahesh, P., Moin, K., Lele, S.K. *The interaction of a shock wave with a turbulent shear flow.* Report TF-69, Department of mechanical engineering, Université de Stanford, 1997.

[93] Margolin, L.G., Rider W.J., Grinstein, F.F. *Modeling turbulent flow with implicit LES.* Journal of Turbulence, **7**, pp 15-41, 2006.

[94] Marinov, N., Westbrook, C.K., Pitz, W.J. *Transport Phenomena in Combustion.* Volume 1 (S. H. Chan, edited), Talyor and Francis, Washington DC, 1996.

[95] Marquina, A., Mulet, P. *A flux-split algorithm applied to conservative models for multicomponent compressible flows.* J. Comp. Phys. **185**, pp 120-138, 2003.

[96] Mathur, S., Tondon, P.K., Saxena, S.C. *Thermal conductivity of binary, ternary, and quaternary mixtures of rare gases.* Mol. Phys., **12**, pp 569-579, 1927.

[97] Métais, O., Lesieur, M. *Spectral large-eddy simulation of istropic and stably stratified turbulence* J. Fluid Mech., **239**, pp 157-194., 1992.

[98] Moin, P., Mahesh, K. *Direct numerical simulation : a tool in turbulence reseach.* Annu. Rev. Fluid Mech. **30**, pp 539-578, 1998.

[99] Monchick, L., Mason, E. A. *Transport Properties of Polar Gases.* Journal of Chemical Physics **35**, pp 1676-1697, 1961.

[100] Noh, W.F. *Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux.* J. Comp. Phys. **72**, pp 78-120, 1987.

[101] Overholt, M.R., Pope, S.B. *Direct numerical simulation of a statistically stationary, turbulent reacting flow.* Combust. Theory Modelling **3**, pp 371-408, 1999.

[102] Park, N., Yoo, J.Y., Choi, H. *Discretization errors in large eddy simulation : on the suitability of centered and upwind-biased compact difference schemes.* J. Comp. Phys. **198**, pp 580-616, 2004.

[103] Pirozzoli, S. *Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction.* J. Comp. Phys. **178**, pp 81-117, 2002.

[104] Poinsot, T., Veynante, D. *Theoretical and numerical combustion.* Second edition, Edwards Pub., 2005.

[105] Poinsot, T., Veynante, D., et Candel, S. *Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams.* J. Fluid Mech., **228**, pp 561-606, 1991.

[106] Poinsot, T.J., Lele, S.K. *Boundary conditions for Direct Simulations of compressible Viscous Flows.* J. Comp. Phys., **101**, pp 104-129, 1992.

[107] Press, W.H., Teukolsky, S.A., & Al., *Numerical recipes in fortran.* 2nd edition, Cambridge University Press, 1992.

[108] Rai, M.M., Moin, P. *Direct simulations of turbulent flow using finite difference scheme.* J. Comp. Phys. **96**, pp 15-53, 1991.

[109] Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E. *The Properties of Gases & Liquids.* Mc Graw Hill, 1988.

[110] Ren, Y.X., Liu, M., Zhang, H.X. *A characteristic-wise hybrid compact-WENO scheme for solving hyperbolic conservation laws.* J. Comp. Phys. **192**, pp 365-386, 2003.

[111] Roe, P.L. *Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes.* J. Comp. Phys. **43**, pp 357-372, 1981.

[112] Schulz-Rinne, C.W., Collins, J.P., Glaz, H.M. *Numerical solution of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics.* SIAM J. Sci. Comput. **14**, pp 1394-1414, 1993.

[113] Sengupta, T.K., Ganeriwal, S.De *Higher-order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique.* J. Comp. Phys. **192**, pp 677-694, 2003.

[114] Serre, L., Falempin F. *PROMETHEE : The French military hypersonic propulsion program.* AIAA 2003-6950, 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Norfolk, VA, 15-19 december 2003.

[115] Shen, Y., Yang, G. *Hybrid finite compact-WENO schemes for shock calculation.* Numerical Methods in fluids. **55**, pp 531-560, 2006.

[116] Shen, Y., Yang, G., Gao, Z. *High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws.* J. Comp. Phys. **216**, pp 114-137, 2006.

[117] Shu, C.W. *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws.* NASA/CR-97-206253, ICASE Report No. 97-65, 1997.

[118] Shu, C.W., Osher, S. *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes.* J. Comp. Phys. **77**, pp 439-471, 1988.

[119] Shu, C.W., Osher, S. *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes II.* J. Comp. Phys. **83**, pp 32-78, 1989.

[120] Sjögreen, B., Yee, H.C. *Low dissipative high-order numerical simulations of supersonic reactive flows.* Int. J. Numer. Meth. Fluids **43**, pp 1221-1238, 2003.

[121] Sod, G.A. *A survey of several finite differente schemesfor hyperbolic conservation laws.* J. Comp. Phys. **27**, pp 1-31, 1978.

[122] Stoukov, A. *Étude numérique de la couche de mélange réactive supersonique.* Thèse de Doctorat de l'Université de Rouen, 1996.

[123] Tanahashi, M., Fujimura, M., et Miyauchi, T. *Coherent fine scale eddies in turbulent premixed flames.* Proc. Combust. Inst. **28**, pp 529-535, 2000.

[124] Thompson, K.W. *Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems.* J. Comp. Phys. **68**, pp 1-24, 1987.

[125] Thompson, K.W. *Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems II.* J. Comp. Phys. **89**, pp 439-461, 1990.

[126] Ton, V.T., Karagozian, A.R., Marble, F.E., Osher, S.J., Engquist, B.E. *Numerical simulations of high-speed chemically reacting flow.* Theoret. Comput. Fluid Dynamics **6**, pp 161-179, 1994.

[127] Toro, E.F., Titarev, V.A. *MUSTA fluxes for systems of conservation laws.* J. Comp. Phys. **216**, pp 403-429, 2006.

[128] Toro, E.F. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics.* Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1997.

[129] Trouvé, A., Poinsot, T. *The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion.* J. Fluid Mech., **278**, pp 1-31, 1994.

[130] Tu, G.-H., Yuan, X.-J. *A characteristic-based shock-capturing scheme for hyperbolic problems.* J. Comp. Phys., In Press, 2007.

[131] Vervisch, L., Poinsot, T. *Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flames.* Annu. Rev. Fluid Mech. **30**, pp 655-691, 1998.

[132] Visbal M.R., Gaitonde, D.V. *High-order accurate methods for unsteady vortical flows on curvilinear meshes.* AIAA Paper 98-0131, 36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 1998.

[133] Warnatz, J. *Rate coefficient in the C/H/O system.* Combustion chemistry. Gardiner. W.C.,Jr., New-York, Springer-Verlag edition, 1984.

[134] Warnatz, J. *Numerical Methods in Flame Propagation.* edited by N. Peters and J. Warnatz Friedr. Vieweg and Sohn, Wiesbaden, 1982.

[135] Woodward, P., Colella, P. *The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks.* J. Comp. Phys. **54**, pp 115-173, 1984.

[136] Yang, H. *An artificial compression method for ENO schemes : The slope modification method.* J. Comp. Phys. **89**, pp 125-160, 1990.

[137] Yee, H.C. *Explicit and implicit multidimensional compact high-resolution shock-capturing methods : Formulation.* J. Comp. Phys. **131**, pp 216-232, 1997.

[138] Zhong, X. *High-Order Finite-Difference Schemes for Numerical Simulation of Hypersonic Boundary-Layer Transition.* J. Comp. Phys. **144**, pp 662-709, 1998.

Résumé

Comparaison de schémas numériques pour la simulation d'écoulements turbulents réactifs

Ce travail de thèse porte sur le développement et la comparaison d'outils numériques pour la simulation d'écoulements compressibles réactifs turbulents. Les objectifs de cette étude sont doubles : il s'agit d'une part de tester l'approche de la Simulation des Grandes Échelles Implicite (MILES) et d'autre part de doter le laboratoire d'une plate-forme de simulation numérique performante, évolutive, robuste et précise. Pour cela, deux programmes d'approches et de portées différentes ont été élaborés.
Le premier code, basé sur des schémas aux différences finies compactes centrées d'ordre 6, très précis et non dissipatifs, permet la simulation numérique directe (DNS) d'écoulements 3D turbulents sans chocs, en géométrie cartésienne. Ce code n'introduit pas de dissipation numérique et sert de référence pour tester l'approche MILES.
Le second code s'appuie sur l'utilisation de méthodes récentes à capture de chocs : les schémas WENO. La formulation aux différences finies des schémas WENO d'ordre 3 à 11 est implémentée dans un code bidimensionnel. Le pouvoir de résolution des schémas WENO des différents ordres est évalué par analyse linéaire. Les problèmes spécifiques au cas multi-espèces sont mis en évidence et la positivité des fractions massiques est respectée grâce à la méthode de Larrouturou. Les différentes reconstructions ainsi que l'ordre du schéma sont évalués sur une série de cas test.
Les deux codes font l'objet d'une comparaison sur la simulation d'une flamme 1D laminaire de prémélange et d'un jet 2D turbulent réactif H_2/air. Enfin, les potentialités du schéma WENO sont démontrées sur une onde de détonation puis sur une interaction réactive onde de choc/bulle d'hydrogène.

Mots-clés : écoulements réactifs multiespèce, DNS, MILES, WENO, méthode de Larrouturou

Abstract

Comparison of numerical schemes for the simulation of turbulent reactive flows

This work concerns the development and comparison of numerical tools for the simulation of turbulent reactive compressible flows. The objectives of this study are mainly to test the approach of Monotonically Integrated Large Eddy Simulation (MILES) and to equip the laboratory with an effective, scalable, robust, and accurate numerical simulation platform. For that, two computational codes of different approaches and ranges have been created.
The first code, based on 6th order compact centered finite difference schemes, very accurate and non-dissipative, allows the direct numerical simulation (DNS) of 3D turbulent smooth flows (without shocks) in cartesian geometry. This code has no built-in numerical dissipation and is used as a reference to test the MILES approach.
The second code is based on the use of recent shock capturing methods: the WENO schemes. The finite difference formulation of WENO schemes of order 3 to 11 is implemented in a two-dimensional code. The resolving efficiency of WENO schemes of various orders is evaluated by the modified wave number linear analysis. Some specific problems associated to multi-species flows are highlighted: the mass fraction positivity is preserved thanks to Larrouturou's method. Various reconstructions are evaluated on a series of test cases for the different orders of the scheme.
Both codes are first compared for the simulation of a 1D laminar premixed flame, and then for the case of a 2D turbulent reactive H_2/air jet. Finally, the performance of WENO schemes is illustrated for two difficult cases: the detonation cells and the shock wave/hydrogen bubble reactive interaction.

Keywords: multicomponent reactive flows, DNS, MILES, WENO, Larrouturou's method