

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DE PROVENCE
Centre de Mathématiques et d'Informatique

pour obtenir le titre de

Docteur en Mathématiques Appliquées

par

Xavier Coré

Méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux
pour le calcul d'écoulements réactifs à faible nombre de Mach

Soutenue le 1 février 2002 devant le jury composé de :

M.	P. Angot	Maître de Conférences HDR Université de la Méditerranée Aix-Marseille II	Directeur de thèse
M.	F. Benkhaldoun	Professeur Université Paris XIII	Rapporteur
M.	R. Borghi	Professeur ESM2 - Université de la Méditerranée Aix-Marseille II	Président
M.	R. Gonzalez	Ingénieur Institut de Protection et de Sûreté Nucléaire	Examineur
M.	H. Guillard	Directeur de recherche INRIA Sophia-Antipolis	Rapporteur
Mme	R. Herbin	Professeur Université de Provence Aix-Marseille I	Examineur
M.	J.-C. Latché	Ingénieur Institut de Protection et de Sûreté Nucléaire	Examineur

Table des matières

1	Modélisation des écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse et à faible nombre de Mach avec une chimie simple et infiniment rapide	7
I	Phénoménologie	8
II	Thermodynamique	10
II.1	Equation d'état d'un mélange de N_s gaz parfaits	10
II.2	Energie interne et enthalpie d'un mélange de gaz parfaits	11
II.3	Thermochimie	12
III	Modélisation des écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse	13
III.1	Equations de bilan de la masse des espèces \mathcal{M}_s , $s \in \{1; N_s - 1\}$	13
III.2	Equation de bilan de la masse du mélange	14
III.3	Equation de bilan de la quantité de mouvement du mélange	15
III.4	Equation de bilan de l'énergie totale du mélange	15
III.5	Lois d'état	16
III.6	Autre formulation de l'équation de bilan de l'énergie totale du mélange	16
III.7	Conditions initiales et conditions aux limites	17
IV	Forme adimensionnée	17
V	Cas du faible nombre de Mach	19
V.1	Système d'équations de bilan	19
V.2	La pression thermodynamique P_0	20
VI	Cas d'une chimie simple et infiniment rapide	21
VII	Résumé	23
VII.1	Equations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante	23
VII.2	Equations de conservation des écoulements à faible nombre de Mach non réactif	23
VII.3	Equations de conservation des écoulements à faible nombre de Mach réactif avec chimie simple et infiniment rapide	24
VII.4	Conditions initiales et conditions aux limites	26
2	Discrétisation numérique	27
I	Discrétisation temporelle d'une équation de conservation d'un scalaire	28
I.1	Application à l'équation de bilan de température dans le cas non réactif	28
I.2	Application à l'équation de bilan de fraction de mélange dans le cas réactif	29
II	Discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes : méthodes de projection	29
II.1	Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante	30
II.2	Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes pour des écoulements à faible nombre de Mach	32
III	Discrétisation temporelle des modèles à faible nombre de Mach non réactif et réactif	33
III.1	Modèle à faible nombre de Mach non réactif	33
III.2	Modèle à faible nombre de Mach réactif	35
IV	Discrétisation spatiale : méthode des volumes finis	37

IV.1	Intégration discrète	37
IV.2	Estimation des flux diffusifs	39
IV.3	Estimation des flux convectifs	42
IV.4	Résolution des systèmes linéaires	46
3	Méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux	49
I	Méthode FIC pour deux niveaux de grilles	50
I.1	Notations pour deux niveaux de grilles	50
I.2	Opérateurs de grilles	52
I.3	Algorithme FIC pour deux niveaux de grilles	57
II	Méthode FIC multi-niveaux	60
II.1	Notations multi-niveaux	60
II.2	Algorithme FIC multi-niveaux	60
4	Résultats numériques	63
I	Validation de la méthode de raffinement local multi-niveaux pour des exemples académiques	64
I.1	Problème elliptique avec singularité à l'origine	64
I.2	Problème de Burgers	70
II	Validation de la méthode de raffinement local multi-niveaux pour des problèmes à faible nombre de Mach	78
II.1	Problème hydrodynamique instationnaire à masse volumique variable	78
II.2	Problème de la convection naturelle à faible nombre de Mach	86
II.3	Problème d'une flamme de diffusion laminaire	103
A	Etablissement des équations de bilan pour les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse à faible nombre de Mach avec une chimie simple et infiniment rapide	121
I	Fonctions β_s pour les équations de bilan de la masse des espèces	121
II	Fonction β_T pour l'équation de bilan d'énergie	122
III	La fraction de mélange Z	124
B	Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante ou variable	129
I	Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante	129
II	Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique variable	130
C	Solutions analytiques pour le problème de la flamme de diffusion laminaire	133
I	Hypothèses	133
II	Position du problème	134
III	Solutions analytiques pour les flammes sur-ventilées	134
IV	Solutions analytiques pour les flammes sous-ventilées	136
V	Surface et longueur de flamme	138
V.1	Flamme sur-ventilée	138
V.2	Flamme sous-ventilée	139

Introduction

Cette étude concerne la résolution numérique du système d'équations de bilan (masse, quantité de mouvement, énergie) issu de la modélisation des écoulements réactifs à faible nombre de Mach.

La difficulté majeure liée à l'approximation de ce système d'équations aux dérivées partielles concerne son caractère multi-échelles. Ce système est raide en temps : le temps caractéristique de propagation d'une onde acoustique est bien plus petit que le temps de propagation d'une particule matérielle. De plus, ce système est raide en espace : les dimensions du domaine sont très grandes en comparaison de l'épaisseur de la flamme.

Depuis le début des années 80, Majda et Sethian [41] ont proposé un système d'équations aux dérivées partielles où les ondes acoustiques sont filtrées. Ce système est formé des équations de bilan de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et des espèces chimiques. D'un point de vue mathématique, la partie hydrodynamique du système est très similaire aux équations de Navier-Stokes régissant les écoulements incompressibles : la masse volumique du fluide est indépendante de la pression dynamique et le champ de vitesse satisfait une contrainte divergente, similaire à la condition de divergence nulle usuelle, bien que plus complexe.

En conséquence, pour résoudre ce problème, il semble naturel de choisir une méthode numérique provenant de la classe de solveurs des écoulements incompressibles. De fait, de nombreuses méthodes numériques présentées dans la littérature dérivent de la méthode de projection initialement proposée par Chorin [16] ; une revue bibliographique peut être trouvée dans [33]. La plupart des schémas numériques proposés utilisent, pour l'étape de projection, une expression explicite de la divergence du champ de vitesse, obtenue en combinant l'équation de bilan de masse avec les équations de bilan d'énergie et des espèces chimiques et l'équation d'état du fluide. Nous avons suivi dans notre étude une démarche différente : nous utilisons pour l'étape de projection la forme originale de l'équation de bilan de masse, *i.e.* $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$. Cette approche conduit à un problème assez général, définir une méthode de projection pour les écoulements à masse volumique variable, les variations temporelles et spatiales de la masse volumique étant potentiellement le résultat d'une large gamme de phénomènes physiques.

En ce qui concerne la discrétisation spatiale, nous avons utilisé une méthode de volumes finis sur maillage décalé de type MAC, e.g. [27]. Un schéma de décentrement d'ordre élevé QUICK [28], associé à un limiteur de pente ULTRA [40], est utilisé pour le calcul des flux convectifs, tandis que les flux diffusifs sont centrés en espace, e.g. [44]. Nous avons développé une méthode de raffinement local multi-niveaux, basée sur la Correction de Flux à l'Interface (FIC) introduite par Angot *et al.* [2, 31]. Cette technique de raffinement implique deux (ou plus) niveaux de discrétisation, un maillage grossier recouvrant l'ensemble du domaine de calcul et un ou plusieurs maillages fins recouvrant les sous-domaines, et repose sur des opérateurs de grilles liant les différents niveaux de raffinement : un opérateur de prolongement qui permet d'imposer les conditions aux limites sur les grilles raffinées (fines) à l'aide d'une technique d'interpolation de la solution calculée sur un domaine plus grossier ; un opérateur de correction en flux pour corriger les flux de la solution grossière et ainsi améliorer la précision en dehors des zones de raffinement et enfin un opérateur de restriction pour améliorer la précision de la solution grossière à l'aide des solutions fines dans les zones de raffinement. Tous ces opérateurs de grilles ont été spécialement développés dans nos applications afin qu'ils respectent l'équation de bilan de masse.

Cette étude est organisée comme suit : tout d'abord, nous présentons le système d'équations aux dérivées partielles représentant les écoulements réactifs à faible nombre de Mach ; puis la discrétisation en temps et en espace est décrite ; le troisième chapitre est consacré à la méthodologie FIC développée pour résoudre notre problème ; finalement, nous testons notre méthode numérique sur trois problèmes-test : un écoulement forcé avec masse volumique variable donnée, où seules les inconnues hydrodynamiques sont estimées, un problème de convection naturelle avec des variations

de température au-delà de la limite de validité de l'approximation de Boussinesq et une flamme de diffusion laminaire.

Chapitre 1

Modélisation des écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse et à faible nombre de Mach avec une chimie simple et infiniment rapide

Dans ce chapitre, nous établissons les équations de bilan pour les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse et à faible nombre de Mach.

Nous présentons d'abord, au paragraphe I, la phénoménologie des processus de combustion étudiés. Les propriétés thermodynamiques sont données au paragraphe II, de même que la cinétique chimique. Le paragraphe III est dédié aux équations de bilan pour les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse. Ces équations sont mises sous forme adimensionnée au paragraphe IV. Puis nous présentons un système d'équations de bilans dédié au faible nombre de Mach au paragraphe V. Enfin, en supposant que la chimie est simple et infiniment rapide, nous obtenons un modèle final qui concerne les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse à faible nombre de Mach avec chimie simple et infiniment rapide. Ce modèle est présenté au paragraphe VI, son établissement est détaillé en Annexe A.

I Phénoménologie

Trois aspects. La combustion est un phénomène très complexe possédant plusieurs aspects intervenant de manière couplée. Tout d'abord, l'*aspect chimique* : un ensemble des réactions chimiques ont lieu simultanément pendant le processus de combustion. Puis, les *transferts de chaleur* interviennent par l'élévation de la température du milieu par conduction, rayonnement ou diffusion. Enfin, les *transferts de masse* par convection ou par diffusion. Par la suite, nous décrirons brièvement le mécanisme de combustion en phase gazeuse. En général, le mécanisme de combustion correspond à l'oxydation d'un combustible par l'oxygène. La réaction exothermique porte à incandescence une partie des gaz qu'on appelle alors flamme ou déflagration. C'est dans cette zone que s'effectuent les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie suivant les lois de la physique.

Flammes de prémélange et de diffusion. Les flammes sont classées en deux grandes catégories, les flammes de prémélange et les flammes de diffusion. Dans les *flammes de prémélange*, le combustible et le comburant gazeux sont mélangés avant de réagir. La surface de flamme sépare l'espace en deux régions : d'un côté entre le mélange gazeux de combustible et de comburant à une température suffisamment basse pour empêcher que la réaction ne se produise ; de l'autre s'échappent les gaz brûlés à la température de combustion. La surface de la flamme prend alors la forme d'un cône, dont on peut mesurer la vitesse de propagation par la mesure de son angle. Dans les *flammes de diffusion*, le combustible et le comburant sont initialement séparés. La zone de réaction où se dégage l'énergie est une surface lumineuse qui sépare l'espace en deux régions : à l'intérieur se trouvent les réserves de combustible, à l'extérieur celles de comburant. L'acheminement des deux espèces réactives, comme l'évacuation des produits de combustion libérés, s'effectue par un mécanisme de diffusion moléculaire. Quant à la chaleur dégagée, elle est évacuée par diffusion thermique. Dans certains cas, la convection libre due à la poussée d'Archimède s'ajoute à la diffusion et donne aux flammes leur forme allongée vers le haut. Il faut noter que la combustion peut aussi avoir lieu par la combinaison des deux processus.

Hypothèses générales. Nous ne nous intéressons dans ce qui suit qu'aux *flammes de diffusion laminaires*. Par ailleurs, nous avons restreint notre étude aux combustibles en phase gazeuse, qu'on notera espèces, négligeant ainsi les phénomènes de changement d'état tels que la liquéfaction et la vaporisation. Nous supposons que chaque espèce est un continuum auquel nous pouvons appliquer les équations de la mécanique des fluides. Ces espèces vérifient donc les équations de bilans de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Nous obtenons alors un système d'équations de bilans qui décrit tout écoulement réactif laminaire en phase gazeuse.

Hypothèses sur la chimie. Dans la réalité, la description complète d'un écoulement réactif nécessite de prendre en compte un très grand nombre d'espèces et de réactions chimiques. Pour éviter les difficultés liées à ces aspects de cinétique chimique complexe, nous faisons l'hypothèse d'une *chimie simple*. On présente souvent cette hypothèse en supposant que le mélange est constitué de deux espèces réactives et qu'une seule réaction chimique exothermique du type simple



a lieu dans le mélange, avec l'espèce comburant \mathcal{M}_{O_x} en très large excès par rapport à l'espèce combustible \mathcal{M}_F , \mathcal{M}_P sont les produits brûlés. Nous supposons aussi que la chimie est *infiniment rapide*. Avec cette hypothèse, le temps de réaction chimique est infiniment plus rapide que le temps moyen des mécanismes convectifs. En particulier, les espèces combustible et comburant ne peuvent

coexister dans la même particule fluide sans provoquer immédiatement la réaction de combustion. Ce sont donc les processus de convection et de diffusion qui contrôlent la flamme.

Hypothèse de faible nombre de Mach. Enfin, nous nous limiterons aux flammes de diffusion en régime subsonique. Nous nous pencherons en particulier sur les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse à faible nombre de Mach. Il s'agit des flammes pour lesquelles la vitesse de déplacement des particules matérielles est largement inférieure à la vitesse référentielle du son. Les difficultés liées à l'approximation de ce système d'équations aux dérivées partielles proviennent de son caractère *multi-échelles* : ce système décrit en effet des phénomènes caractérisés par des échelles de temps et d'espace d'ordre de grandeur très différents.

La première difficulté concerne les échelles temporelles. C'est le problème des vitesses des ondes acoustiques. La présence d'échelles temporelles très différentes est appelée *raideur*. A faible nombre de Mach, le système est raide. En effet, supposons que la vitesse caractéristique du fluide $\|\vec{v}\|$ soit très petite devant la vitesse référentielle du son c , *i.e.* le nombre de Mach $M = \|\vec{v}\|/c$ est faible. Si L représente la longueur caractéristique du domaine et t est un temps caractéristique pour le fluide avec $\|\vec{v}\| \sim L/t$, alors $t \sim L/\|\vec{v}\| = L/(Mc) \gg L/c$. En d'autres termes, le temps pris par une onde acoustique pour traverser la distance L doit être petit en comparaison du temps durant lequel le fluide subit des modifications. En particulier, les ondes acoustiques de haute fréquence (ou de grande longueur d'onde) sont exclues par la condition $\|\vec{v}\| \sim L/t$ puisque les longueurs d'onde des ondes acoustiques sont de l'ordre de $ct \sim (\|\vec{v}\| t)/M = L/M \gg L$. Dans ce cas, le mélange devient hydrodynamiquement incompressible et les effets thermodynamiques conduisent à une compression uniforme du système.

Numériquement, la condition de stabilité de type CFL des schémas explicites est très restrictive sur le pas de temps. En effet, cette condition de stabilité pour un modèle compressible s'écrit $CFL = (\|\vec{v} + c\| \Delta t) / \Delta x \leq 1$, où $(\vec{v} + c)$ est la vitesse d'une des ondes acoustiques. Elle implique que le pas de temps numérique vérifie $\Delta t \leq \Delta x / (\|\vec{v} + c\|)$. Durant ce pas de temps, l'onde acoustique traverse au plus une maille de calcul, tandis qu'une particule matérielle parcourt une distance de l'ordre de $\Delta x / \|c\|$!

D'un autre côté les schémas convectifs implicites souffrent eux aussi de problèmes de convergence. Effectivement, le conditionnement de la matrice jacobienne associée aux flux convectifs est $\kappa = \max\{1 + 1/M; (M + 1)/(M - 1)\}$ pour les équations d'Euler en 1-D. Il tend alors vers l'infini autant pour le régime subsonique ($M \rightarrow 0$) que transonique ($M = 1$), rendant le système algébrique associé difficile à résoudre : voir Saad [47] pour les résultats de convergence des méthodes itératives usuelles.

Une première stratégie pour obtenir un bon conditionnement de cette matrice jacobienne est le préconditionnement. L'idée des méthodes de préconditionnement est de changer la nature instationnaire du système en éliminant les disparités des ondes acoustiques. En fait, il s'agit de rééchelonner les échelles temporelles pour que les vitesses du fluide et des ondes acoustiques soient du même ordre. Basée sur une analogie avec les méthodes de gradient conjugué, de telles méthodes sont nommées méthodes de préconditionnement. Ces techniques constituent un problème de recherche actuel [14, 50, 51, 53, 55]. Elles sont principalement utilisées pour représenter les écoulements dont les régimes varient du régime incompressible au régime supersonique et n'entrent donc pas dans le cadre de notre étude.

La seconde stratégie consiste à utiliser un système d'équations aux dérivées partielles qui sont bien posées pour le régime subsonique. Il s'agit du modèle à faible nombre de Mach que nous utilisons, et qui est présenté au paragraphe V. Le modèle à faible nombre de Mach, ou approximation isobare, est une alternative au modèle à masse volumique constante, qui découple la propagation de la flamme de l'écoulement du fluide et qui convient en particulier à l'étude des flammes plissées (voir à ce sujet Benkhaldoun et Larrourou [5]).

La seconde difficulté des écoulements à faible nombre de Mach réactifs concerne les échelles spatiales. Il s'agit du problème d'échelle dynamique. La raideur spatiale est liée aux caractéristiques physiques des flammes. Par exemple, l'épaisseur de la flamme, la zone de réaction et le pas de discrétisation en espace sont très petits par rapport aux dimensions du domaine.

Numériquement, il faut donc pouvoir construire un maillage permettant de représenter finement les phénomènes de combustion dans les régions où ils se produisent.

Une première stratégie consiste à construire des maillages non uniformes, où un grand nombre de mailles sont localisées dans les régions où les phénomènes apparaissent. Toutefois, l'utilisation de maillages non uniformes conduit à une perte de précision dans l'ordre de l'erreur de troncature, basée le plus souvent sur des approximations aux différences finies. L'uniformité des maillages

permet alors de conserver la précision, toutefois elle est pénalisante dans la pratique (dans le cas d'une flamme par exemple).

Une seconde stratégie consiste à raffiner un maillage uniforme dans les régions où une grande précision en espace est demandée (par exemple les fronts de flammes ou les couches limites). C'est l'objectif des méthodes de raffinement local adaptatif multi-niveaux que nous présentons au chapitre 3. Ces méthodes reposent sur une architecture multigrille emboîtée : on engendre à partir d'une grille globale de base occupant tout le domaine physique, une ou plusieurs grilles locales de zoom emboîtées. Toutes les grilles sont structurées et uniformes, et interagissent entre elles par l'intermédiaire d'opérateurs de projection (interpolation). Les tailles des domaines de calcul décrits par chacune des grilles, ainsi que le pas de discrétisation correspondant, varient de façon décroissante. Par conséquent, chaque grille peut posséder un nombre de nœuds peu élevé, ce qui conduit à des systèmes algébriques de taille raisonnable. Il est également possible d'utiliser plusieurs types de discrétisation suivant le niveau de grille et la précision requise.

II Thermodynamique

Dans ce paragraphe, nous présentons les relations fondamentales de la thermodynamique. Nous définissons l'équation d'état pour un mélange de gaz parfaits, son énergie interne, son enthalpie et ses chaleurs spécifiques aux paragraphes II.1 et II.2. Enfin, nous caractérisons la thermochimie à travers la loi d'action de masse au paragraphe II.3 sous l'hypothèse d'une chimie simple.

II.1 Equation d'état d'un mélange de N_s gaz parfaits

Considérons un mélange de N_s gaz parfaits. Chaque gaz \mathcal{M}_s (ou espèce) est repéré par l'indice s et est caractérisé par sa masse molaire W_s . Le mélange se trouve dans un volume V sous la pression P et à la température T . Désignons par m_s la masse du gaz \mathcal{M}_s contenue dans le volume V . La masse totale contenue dans V est :

$$m = \sum_{s=1}^{N_s} m_s \quad (\text{II.1})$$

Nous définissons la masse volumique ρ_s du gaz \mathcal{M}_s par :

$$\rho_s = \frac{m_s}{V}$$

La masse volumique du mélange ρ se déduit facilement de l'expression (II.1) :

$$\rho = \frac{m}{V} = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s$$

Dans l'analyse des écoulements réactifs, il est courant d'utiliser la variable fraction massique Y_s de l'espèce \mathcal{M}_s :

$$Y_s = \frac{\rho_s}{\rho}$$

avec la relation suivante :

$$\sum_{s=1}^{N_s} Y_s = 1$$

La pression partielle P_s de l'espèce \mathcal{M}_s est la pression qu'aurait cette espèce si elle occupait seule le volume V . Elle est donnée pour un gaz parfait par :

$$P_s = \rho_s r_s T$$

où $r_s = \frac{\mathcal{R}_u}{W_s}$ avec \mathcal{R}_u la constante universelle des gaz parfaits.

La loi de Dalton indique que la pression du mélange de N_s gaz parfaits est donnée par la somme de toutes les pressions partielles des gaz qui composent le mélange :

$$P = \sum_{s=1}^{N_s} P_s$$

Dans ces conditions, nous obtenons :

$$P = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s r_s T = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{m_s}{V} r_s T$$

Ou encore :

$$P = \frac{m}{V} \sum_{s=1}^{N_s} \frac{m_s}{m} r_s T = \rho T \sum_{s=1}^{N_s} Y_s r_s$$

Nous pouvons alors écrire une équation d'état pour le mélange sous la forme :

$$P = \rho \mathcal{R} T$$

où la constante \mathcal{R} du mélange est ainsi donnée par :

$$\mathcal{R} = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s r_s = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s \frac{\mathcal{R}_{u1}}{W_s}$$

La masse molaire du mélange est définie par :

$$W = \frac{1}{\sum_{s=1}^{N_s} \frac{Y_s}{W_s}}$$

Un mélange de N_s gaz parfaits \mathcal{M}_s obéit donc à un loi d'état de type gaz parfait.

II.2 Energie interne et enthalpie d'un mélange de gaz parfaits

L'énergie interne e du mélange de gaz parfaits est la somme des énergies internes e_s de chacun des gaz \mathcal{M}_s . Par unité de masse, l'énergie interne e du mélange de gaz parfaits est :

$$e = \sum_{s=1}^{N_s} e_s Y_s = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s \left[e_{0,s} + \int_{T^0}^T c_{v,s} d\tau \right]$$

soit :

$$e = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s e_{0,s} + \int_{T^0}^T \left[\sum_{s=1}^{N_s} Y_s c_{v,s} \right] d\tau$$

Nous pouvons donc définir la chaleur massique à volume constant du mélange c_v par :

$$c_v = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s c_{v,s}$$

Nous écrivons alors l'énergie interne du mélange e sous la forme :

$$e = e_0 + \int_{T^0}^T c_v d\tau$$

avec $e_0 = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s e_{0,s}$.

De la même manière, l'enthalpie du mélange s'écrit comme :

$$h = \sum_{s=1}^{N_s} h_s Y_s = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s \left[h_{f,s}^0 + \int_{T^0}^T c_{p,s} d\tau \right]$$

avec $h_{f,s}^0$ l'enthalpie de formation de l'espèce \mathcal{M}_s à la température de référence T^0 (l'*enthalpie de formation* $h_{f,s}^0$ d'une substance \mathcal{M}_s est définie comme la quantité de chaleur nécessaire à la

formation d'une mole de cette substance à partir de ses éléments dans leur état standard respectif) et la chaleur massique à pression constante du mélange c_p est donnée par :

$$c_p = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s c_{p,s}$$

Il est souvent commode d'exprimer les chaleurs massiques à pression et volume constants en fonction de la constante du mélange \mathcal{R} et de leur rapport γ sous la forme :

$$c_p = c_v + \mathcal{R} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v}$$

Nous en tirons les deux relations suivantes :

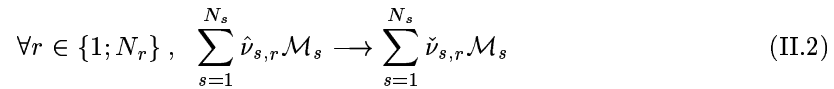
$$c_p = \frac{\gamma \mathcal{R}}{\gamma - 1}$$

$$c_v = \frac{\mathcal{R}}{\gamma - 1}$$

II.3 Thermochimie

Dans ce paragraphe, nous caractérisons, dans le cadre de l'hypothèse de chimie simple, les taux de production/destruction massique des espèces par la réaction chimique et la chaleur de réaction.

Dans les écoulements réactifs se produisent de nombreuses réactions chimiques élémentaires qui peuvent être écrites sous forme d'équations chimiques :



avec $\hat{\nu}_{s,r}$ et $\check{\nu}_{s,r}$ les coefficients stœchiométriques de l'espèce \mathcal{M}_s pour la réaction r .

Nous nous limiterons cependant à une description de ces processus de réaction chimique sous la forme d'une unique réaction de bilan ($N_r = 1$). C'est l'hypothèse suivante :

Hypothèse II.1 Chimie simple

Nous considérons que les réactions chimiques sont simples, dans le sens où le combustible (\mathcal{M}_F) et l'oxydant (\mathcal{M}_{Ox}) réagissent dans une unique réaction irréversible pour donner des produits brûlés (\mathcal{M}_P). Seules deux espèces réactives ($\mathcal{M}_F, \mathcal{M}_{Ox}$) sont donc présentes. Nous supposons de plus qu'un gaz inerte, noté \mathcal{M}_I , est présent. Nous écrivons :



où $\hat{\nu}_s$ (respectivement $\check{\nu}_s$) est le coefficient stœchiométrique molaire relatif à une espèce \mathcal{M}_s détruite (respectivement produite) dans la réaction.

En conséquence, le nombre d'espèces N_s est :

$$N_s = 4 \longleftrightarrow (\mathcal{M}_F, \mathcal{M}_{Ox}, \mathcal{M}_P, \mathcal{M}_I)$$

Nous avons aussi $\check{\nu}_F = \check{\nu}_{Ox} = \hat{\nu}_P = 0$.

Avec cette hypothèse, nous écrivons le taux d'avancement de la réaction comme :

$$\dot{\omega} = -\frac{1}{\hat{\nu}_F} \frac{dn_F}{dt} = -\frac{1}{\hat{\nu}_{Ox}} \frac{dn_{Ox}}{dt} = \frac{1}{\check{\nu}_P} \frac{dn_P}{dt}$$

Le taux de production massique de l'espèce \mathcal{M}_s est :

$$\dot{\rho}_s = (\check{\nu}_s - \hat{\nu}_s) W_s \dot{\omega},$$

soit pour les espèces combustible \mathcal{M}_F , comburant \mathcal{M}_{Ox} et produits \mathcal{M}_P :

$$\dot{\rho}_F = -\hat{\nu}_F W_F \dot{\omega}, \quad \dot{\rho}_{Ox} = -\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox} \dot{\omega}, \quad \dot{\rho}_P = \check{\nu}_P W_P \dot{\omega}. \quad (\text{II.4})$$

La chaleur de réaction $-\Delta H_r^0$ à l'état standard et à la température T^0 est :

$$-\Delta H_r^0 = \check{\nu}_P W_P h_{f,P}^0 - \hat{\nu}_F W_F h_{f,F}^0 - \hat{\nu}_{Ox} W_{Ox} h_{f,Ox}^0 \quad (\text{II.5})$$

La chaleur de réaction Q^0 à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé s'écrit :

$$Q^0 = h_{f,F}^0 + \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F} h_{f,Ox}^0 - \frac{\check{\nu}_P W_P}{\hat{\nu}_F W_F} h_{f,P}^0 \quad (\text{II.6})$$

III Modélisation des écoulements réactifs laminares en phase gazeuse

Dans ce paragraphe, nous présentons les équations de bilan pour les écoulements réactifs laminares en phase gazeuse, qui expriment la conservation de la masse des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie du mélange gazeux. Nous explicitons les flux de transport pour ces différentes équations de bilan sous certaines hypothèses. Ce paragraphe s'appuie sur les références [6, 11, 12, 35, 58].

L'étude des phénomènes de combustion laminaire en phase gazeuse fait intervenir un nombre N_s d'espèces gazeuses réactives. Chaque espèce \mathcal{M}_s , $s \in \{1; N_s\}$, est supposée être un continuum auquel nous pouvons appliquer les équations de la mécanique des fluides. Nous possédons alors en chaque point $\vec{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ avec d la dimension de l'espace, à chaque instant t , N_s masses volumiques $\rho_s(\vec{x}, t)$, N_s vitesses $\vec{v}_s(\vec{x}, t)$, N_s pressions partielles $P_s(\vec{x}, t)$ et nous supposons que ces variables sont des fonctions régulières des coordonnées d'espace et de temps. Nous définissons la masse volumique ρ du mélange comme :

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s(\vec{x}, t),$$

la vitesse moyenne du mélange par :

$$\rho \vec{v} = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s(\vec{x}, t) \vec{v}_s(\vec{x}, t)$$

et la pression totale, par la loi de Dalton :

$$P(\vec{x}, t) = \sum_{s=1}^{N_s} P_s(\vec{x}, t).$$

Nous supposons de plus que l'équilibre thermique local est réalisé entre les différentes espèces, *i.e.* $T_s(\vec{x}, t) = T(\vec{x}, t)$ pour tout indice s .

Les équations régissant un écoulement réactif sont les équations de Navier-Stokes, de conservation de l'énergie totale et de conservation de la masse des espèces gazeuses. Elles traduisent des équations de *bilans* des grandeurs physiques (masse des espèces \mathcal{M}_s , $s \in \{1; N_s - 1\}$ au paragraphe III.1, de masse du mélange au paragraphe III.2, de quantité de mouvement du mélange au paragraphe III.3 et d'énergie totale du mélange au paragraphe III.4), formant un système d'équations aux dérivées partielles. Les lois d'état sont données au paragraphe III.5. Enfin, le paragraphe III.6 donne la formulation de l'équation de bilan de l'énergie du mélange avec la température du mélange.

III.1 Equations de bilan de la masse des espèces \mathcal{M}_s , $s \in \{1; N_s - 1\}$

Les équations de bilan de la masse des espèces \mathcal{M}_s , $s \in \{1; N_s - 1\}$ s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \vec{v}) = -\nabla \cdot \vec{q}_s + \dot{\rho}_s \quad (\text{III.7})$$

où ρ_s sont les masses volumiques des espèces, \vec{v} est la vitesse moyenne du mélange, $\vec{q}_s = \rho_s \vec{V}_s$ le flux diffusif de l'espèce \mathcal{M}_s avec \vec{V}_s la vitesse de diffusion de l'espèce \mathcal{M}_s ($\vec{V}_s = \vec{v}_s - \vec{v}$) et $\dot{\rho}_s$ les termes de production/destruction par la réaction chimique.

Les masses volumiques des espèces ρ_s sont aussi définies par :

$$\rho_s = \rho Y_s$$

avec la relation :

$$\sum_{s=1}^{N_s} Y_s = 1 ,$$

La fraction massique Y_s de l'espèce \mathcal{M}_s représente localement la masse de l'espèce \mathcal{M}_s par rapport à la masse totale du mélange. Les équations de bilan associées constituent une alternative pour décrire la conservation des espèces et sont :

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_s \vec{v}) = -\nabla \cdot \vec{q}_s + \dot{\rho}_s \quad (\text{III.8})$$

(H1) Expression des flux diffusifs massifs des espèces

$$\vec{q}_s = \vec{q}_\rho + \vec{q}_S + \vec{q}_{\text{BD}}$$

Le flux diffusif massique \vec{q}_s de l'espèce \mathcal{M}_s s'exprime de manière générale comme la somme :

– du flux diffusif massique \vec{q}_ρ , lié aux gradients de masses volumiques des espèces et modélisé par la loi de Fick avec D_s le coefficient de diffusion de l'espèce \mathcal{M}_s dans le mélange :

$$\vec{q}_\rho = -\rho D_s \nabla Y_s$$

– du flux diffusif de température du mélange (effet Soret) :

$$\vec{q}_S = -\frac{D_{T,s}}{T} \nabla T$$

– et du flux diffusif de pression du mélange (baro-diffusion) :

$$\vec{q}_{\text{BD}} = -D_{P,s} \nabla(\ln P)$$

Par la suite, nous négligerons les effets Soret et de baro-diffusion qui sont très faibles comparés à l'effet du gradient de concentration sur la diffusion dans les situations physiques que nous serons amenés à étudier.

Ainsi, seule la loi de Fick représentera les vitesses de diffusion entre les différentes espèces en faisant de plus l'hypothèse d'égalité et de constance des coefficients de diffusion massique des espèces dans le mélange :

$$D_s = D$$

Sous ces hypothèses, l'équation de bilan de la masse s'écrit pour chaque espèce \mathcal{M}_s de fraction massique Y_s comme :

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_s \vec{v}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_s) + \dot{\rho}_s \quad (\text{III.9})$$

III.2 Equation de bilan de la masse du mélange

L'équation de bilan de la masse du mélange s'exprime comme la somme des équations de bilan de la masse des espèces \mathcal{M}_s pour $s \in \{1; N_s\}$ puisque

$$\rho = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s$$

La somme des flux diffusifs massifs des espèces \mathcal{M}_s est nulle par définition :

$$\sum_{s=1}^{N_s} \vec{q}_s = 0$$

Et la relation de conservation de la masse pour les termes de réaction chimique donne :

$$\sum_{s=1}^{N_s} \dot{\rho}_s = 0$$

Alors l'équation de bilan de conservation de la masse volumique ρ du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{III.10})$$

avec ρ la masse volumique du mélange et \vec{v} la vitesse moyenne du mélange.

III.3 Equation de bilan de la quantité de mouvement du mélange

L'équation de bilan de la quantité de mouvement du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_{\text{qdm}} + \rho \vec{g} \quad (\text{III.11})$$

où \vec{v} est la vitesse moyenne du mélange, ρ la masse volumique du mélange, \mathbf{q}_{qdm} le flux diffusif de quantité de mouvement du mélange et $\rho \vec{g}$ représente les forces de gravité.

(H2) Expression des flux diffusifs de quantité de mouvement du mélange

On suppose que le mélange gazeux est un fluide Newtonien, ainsi :

(i) \mathbf{q}_{qdm} vérifie :

$$-\mathbf{q}_{\text{qdm}} = -P \mathbf{Id} + \tau$$

avec P la pression totale et τ le tenseur des contraintes visqueuses tel que :

$$\tau = \lambda (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} + 2\mu \left[\frac{1}{2} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) \right]$$

où λ , μ sont les coefficients de Lamé.

(ii) La relation de Stokes donne :

$$3\lambda + 2\mu = 0$$

Par conséquent, les flux diffusifs de quantité de mouvement du mélange s'écrivent :

$$-\mathbf{q}_{\text{qdm}} = -P \mathbf{Id} - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} + \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$$

avec P la pression totale, \vec{v} la vitesse moyenne du mélange et μ la viscosité dynamique. Sous ces hypothèses, l'équation de bilan de la quantité de mouvement du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \nabla P = \nabla \cdot \left[-\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} + \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) \right] + \rho \vec{g} \quad (\text{III.12})$$

III.4 Equation de bilan de l'énergie totale du mélange

L'équation de bilan de l'énergie totale du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \nabla \cdot (E_t \vec{v}) = -\nabla \cdot (\mathbf{q}_{\text{qdm}} \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q}_{\text{nrj}} + \rho \vec{g} \cdot \vec{v} \quad (\text{III.13})$$

où E_t est l'énergie totale du mélange, P la pression totale, \vec{v} la vitesse moyenne du mélange, \mathbf{q}_{qdm} le flux diffusif de quantité de mouvement du mélange, \vec{q}_{nrj} le flux diffusif d'énergie et $\rho \vec{g}$ représente les forces de gravité.

(H3) Expression des flux diffusifs d'énergie

$$\vec{q}_{\text{nrj}} = \vec{q}_c + \vec{q}_h$$

Le flux diffusif d'énergie \vec{q}_{nrj} s'exprime comme la somme :

– d'un flux conductif \vec{q}_c donné par la loi de Fourier avec λ la conductivité thermique du mélange :

$$\vec{q}_c = -\lambda \nabla T ;$$

– de la somme des flux diffusifs d'enthalpie \vec{q}_h de chaque espèce \mathcal{M}_s :

$$\vec{q}_h = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s h_s \vec{V}_s ;$$

– et d'un flux radiatif \vec{q}_R .

Nous concentrerons notre étude sur les phénomènes de convection-diffusion. En conséquence, nous supposons que le flux de transport de chaleur par rayonnement est nul, $\vec{q}_R = 0$.

A l'aide de la loi de Fick pour des coefficients de diffusion massique constants et égaux $D_s = D$, nous sommes en mesure de simplifier la somme des flux diffusifs d'enthalpie \vec{q}_h de chaque espèce \mathcal{M}_s sous la forme :

$$\vec{q}_h = - \sum_{s=1}^{N_s} \rho D h_s \nabla Y_s .$$

Nous rappelons que l'hypothèse **(H2)**, portant sur l'expression des flux diffusifs de quantité de mouvement du mélange, caractérise le flux diffusif de quantité de mouvement du mélange par :

$$-\mathbf{q}_{\text{qdm}} = -P \mathbf{Id} + \tau$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses avec :

$$\tau = -\frac{2}{3}\mu (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} + \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$$

Sous ces hypothèses, l'équation de bilan de l'énergie totale du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \nabla \cdot [(E_t + P) \vec{v}] = \nabla \cdot (\tau \cdot \vec{v}) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot \left(\sum_{s=1}^{N_s} \rho D h_s \nabla Y_s \right) + \rho \vec{g} \cdot \vec{v} \quad (\text{III.14})$$

III.5 Lois d'état

La relation reliant la pression totale à la masse des espèces et à la température du mélange est la loi d'état des gaz parfaits :

$$P = \rho \left(\sum_{s=1}^{N_s} Y_s \frac{\mathcal{R}_u}{W_s} \right) T \quad (\text{III.15})$$

La loi d'état calorifique, qui relie l'énergie totale du mélange à son énergie cinétique, à son enthalpie et à la pression totale, se met sous la forme suivante :

$$E_t = \frac{1}{2} \rho \vec{v}^2 + \rho e = \frac{1}{2} \rho \vec{v}^2 + \rho h - P \quad (\text{III.16})$$

III.6 Autre formulation de l'équation de bilan de l'énergie totale du mélange

Nous rappelons que l'enthalpie du mélange s'écrit (cf. paragraphe II.2) :

$$h = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s h_{f,s}^0 + \int_{T^0}^T c_p d\tau$$

avec $h_{f,s}^0$ l'enthalpie de formation de l'espèce \mathcal{M}_s à la température de référence T^0 et $c_{p,s}$ les chaleurs spécifiques à pression constante des espèces \mathcal{M}_s et c_p la chaleur spécifique à pression constante du mélange :

$$c_p = \sum_{s=1}^{N_s} Y_s c_{p,s}$$

La loi d'état calorifique (III.16) peut donc s'écrire sous la forme :

$$E_t = \frac{1}{2} \rho \vec{v}^2 + \rho \sum_{s=1}^{N_s} Y_s h_{f,s}^0 + \rho \int_{T^0}^T c_p d\tau - P \quad (\text{III.17})$$

En introduisant la relation (III.17) dans l'équation de bilan de l'énergie totale du mélange (III.14) puis en soustrayant l'équation de bilan de la quantité de mouvement (III.12), multipliée par la vitesse \vec{v} , nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho c_p T \vec{v}) = \frac{\partial P}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla P - \tau : \nabla \vec{v} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q^0 \dot{\rho}_F + \rho \vec{g} \cdot \vec{v} \quad (\text{III.18})$$

où T est la température du mélange, ρ la masse volumique du mélange, \vec{v} la vitesse moyenne du mélange, P la pression totale, τ le tenseur des contraintes visqueuses, c_p la chaleur spécifique à pression constante du mélange, λ la conductivité thermique du mélange, Q^0 la chaleur de réaction à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, $\dot{\rho}_F$ le taux de réaction chimique de l'espèce combustible \mathcal{M}_F et $\rho \vec{g}$ représente les forces de gravité.

III.7 Conditions initiales et conditions aux limites

Les **conditions initiales** du système d'équations de bilan de conservation de la masse des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie du mélange dépendent du problème à résoudre. Dans notre étude, le domaine d'étude est rempli d'air avec deux espèces en présence : un comburant \mathcal{M}_{Ox} et un inerte \mathcal{M}_I . Du combustible \mathcal{M}_F y est ensuite injecté. Le champ de vitesse du mélange est initialement nul, de même que la pression dynamique, tandis que la pression thermodynamique est égale à la pression atmosphérique. La température initiale correspond à celle du mélange initial. Enfin, les coefficients de transport sont fonction des propriétés des gaz étudiés.

Les **conditions aux limites** sont les conditions de Dirichlet et de Neumann. Les conditions aux limites de Dirichlet sont associées aux phénomènes d'injection, aux murs isothermes ou à la condition d'adhérence du champ de vitesse. Les conditions de Neumann sont associées aux frontières symétriques et aux murs adiabatiques.

IV Forme adimensionnée

Pour exprimer les équations de bilan pour les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse sous une forme adimensionnée, nous introduisons les quantités référentielles (ρ_{ref} , P_{ref} , \vec{v}_{ref}) pour la masse volumique du mélange, la pression totale et le champ de vitesse du mélange, (t_{ref} , L_{ref}) pour le temps et les coordonnées d'espace, et μ_{ref} , λ_{ref} , $c_{p,ref}$, D_{ref} pour les paramètres des relations constitutives.

Cette procédure d'adimensionnement conduit à un ensemble de nombres caractéristiques :

Le nombre de **Froude** est caractérisé par :

$$Fr = \frac{\|\vec{v}_{ref}\|}{\sqrt{L_{ref} \|\vec{g}_{ref}\|}}$$

Le nombre de Froude caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces volumiques associées au champ de pesanteur. Ce nombre intervient par exemple dans l'étude d'écoulements à masse volumique variable.

Le nombre de **Lewis** (ou Lewis-Semenov) est :

$$Le = \frac{\lambda_{ref}}{\rho_{ref} D_{ref} c_{p,ref}} = \frac{Sc}{Pr}$$

Le nombre de Lewis est une mesure du rapport entre l'énergie transportée par conduction et celle transportée par diffusion. Pour beaucoup de gaz, le nombre de Lewis est proche de l'unité ; il est parfois légèrement inférieur à l'unité dans les mélanges de gaz combustibles. Enfin, l'approximation $Le = 1$ est souvent utile dans les analyses théoriques de la combustion.

On note M le nombre de **Mach**, défini par :

$$M = \frac{\|\vec{v}_{ref}\|}{\sqrt{\gamma P_{ref} / \rho_{ref}}}$$

Le carré du nombre de Mach est proportionnel au rapport de l'énergie cinétique par unité de masse et de l'énergie interne par unité de masse. Le nombre de Mach joue un rôle central dans l'analyse des écoulements compressibles.

Le nombre de **Peclet** s'écrit :

$$Pe = \frac{\rho_{ref} \|\vec{v}_{ref}\| L_{ref} c_{p,ref}}{\lambda_{ref}}$$

Le nombre de Peclet compare les transferts de chaleur convectif et conductif au sein d'un écoulement. Ce nombre peut être exprimé en fonction des nombres de Reynolds et de Prandtl : $Pe = Re \cdot Pr$

Le nombre de **Prandtl** est défini par :

$$\text{Pr} = \frac{\mu_{\text{ref}} c_{p,\text{ref}}}{\lambda_{\text{ref}}}$$

Le nombre de Prandtl compare les transferts de quantité de mouvement, associés aux forces visqueuses, aux transferts de chaleur par conduction.

Le nombre de **Reynolds** s'écrit :

$$\text{Re} = \frac{\rho_{\text{ref}} \|\vec{v}_{\text{ref}}\| L_{\text{ref}}}{\mu_{\text{ref}}}$$

Le nombre de Reynolds compare les forces d'inertie aux forces de viscosité. Pour de faibles nombres de Reynolds, les forces visqueuses sont prépondérantes devant les forces d'inertie, tandis que pour de grands nombres de Reynolds, ce sont les forces d'inertie qui dominent.

On note nombre de **Schmidt**, le nombre :

$$\text{Sc} = \frac{\mu_{\text{ref}}}{\rho_{\text{ref}} D_{\text{ref}}}$$

Le nombre de Schmidt compare les transferts de quantité de mouvement associés à la viscosité aux transferts de masse par diffusion moléculaire. Ce nombre intervient dans l'étude des transferts de masse dans un mélange.

On appelle nombre de **Strouhal**, le nombre adimensionné suivant :

$$\text{Sr} = \frac{t_{\text{ref}} \|\vec{v}_{\text{ref}}\|}{L_{\text{ref}}}$$

Le nombre de Strouhal compare les quantités d'accélération instationnaire et convective. Ce quotient sans dimension apparaît dans l'étude des écoulements instationnaires.

Le système d'équations de bilan pour les écoulements réactifs laminares en phase gazeuse s'écrit alors sous la forme adimensionnée suivante :

Equations de bilan de la masse des espèces \mathcal{M}_s , $s \in \{\text{F}, \text{Ox}, \text{P}\}$:

$$\frac{1}{\text{Sr}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \nabla \cdot (\rho Y_s \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_s + \dot{\rho}_s \quad (\text{IV.19})$$

Equation de bilan de la masse totale du mélange :

$$\frac{1}{\text{Sr}} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{IV.20})$$

Equation de bilan de la quantité de mouvement du mélange :

$$\frac{1}{\text{Sr}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + \frac{1}{\gamma M^2} P \text{Id}) = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau + \frac{1}{\text{Fr}^2} \rho \vec{g} \quad (\text{IV.21})$$

Equation de bilan de l'énergie du mélange :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\text{Sr}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) &= \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left\{ \frac{1}{\text{Sr}} \frac{\partial P}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla P \right\} + (\gamma - 1) \frac{M^2}{\text{Re}} \tau : \nabla \vec{v} \\ &+ \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + \frac{Q^0}{c_p} \dot{\rho}_{\text{F}} \end{aligned} \quad (\text{IV.22})$$

où Q^0 est la chaleur de réaction à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, définie par :

$$Q^0 = h_{\text{f},\text{F}}^0 + \frac{\hat{v}_{\text{Ox}} W_{\text{Ox}}}{\hat{v}_{\text{F}} W_{\text{F}}} h_{\text{f},\text{Ox}}^0 - \frac{\hat{v}_{\text{P}} W_{\text{P}}}{\hat{v}_{\text{F}} W_{\text{F}}} h_{\text{f},\text{P}}^0$$

Equation d'état :

$$P = \rho \mathcal{R}_u \left(\sum_{s \in \{\text{F}, \text{Ox}, \text{P}, \text{I}\}} \frac{Y_s}{W_s} \right) T \quad (\text{IV.23})$$

Par la suite, nous choisissons $\text{Sr} = 1$, ce qui revient à prendre comme temps de référence, la quantité

$$t_{\text{ref}} = \frac{L_{\text{ref}}}{\|\vec{v}_{\text{ref}}\|}.$$

V Cas du faible nombre de Mach

V.1 Système d'équations de bilan

Nous nous intéressons aux processus de combustion se déroulant à faible nombre de Mach, dont nous avons présenté les difficultés au paragraphe I. Dans ce paragraphe, nous introduisons le modèle à faible nombre de Mach pour modéliser les écoulements réactifs laminares en phase gazeuse caractérisés par un faible nombre de Mach. Initialement, la première dérivation de ces équations pour la combustion à faible nombre de Mach a été réalisée par Majda et Sethian dans [41]. Formellement, sous l'hypothèse de faible nombre de Mach, *i.e.* $\gamma M^2 \ll 1$ avec M le nombre de Mach et $\gamma = c_p/c_v$ le rapport des chaleurs spécifiques, les auteurs dérivent, à travers des développements asymptotiques des variables physiques, un système d'équations pour décrire les processus de combustion à faible nombre de Mach. Ici, nous présentons les résultats de ces développements asymptotiques. Le modèle à faible nombre de Mach suppose la décomposition de la pression totale P en deux parties :

$$P(\vec{x}, t) = P_0(t) + \gamma M^2 P_1(\vec{x}, t) \quad (\text{V.24})$$

où $P_0(t)$ est la pression thermodynamique qui est uniforme en espace mais peut varier en temps et qui intervient dans l'équation d'état, alors que $P_1(\vec{x}, t)$ représente la pression dynamique, fonction de l'espace et du temps, intervenant dans l'équation de bilan de la quantité de mouvement du mélange.

Une conséquence de la décomposition de la pression totale (V.24) concerne la pression thermodynamique qui se comporte comme une fonction des conditions aux limites et des termes sources :

$$P_0 = P_0 \text{ (Conditions aux limites, Termes sources)} \quad (\text{V.25})$$

Par ailleurs, la masse volumique du mélange ρ ne dépend spatialement que de la température T puisque la loi d'état est de la forme : $\rho = \rho(P_0, T)$. Les variations de la masse volumique du mélange en fonction de la pression dynamique sont nulles, conduisant au même comportement que pour les écoulements incompressibles. Le système d'équations de bilan est alors plus simple que le système d'équations de bilan des écoulements compressibles puisque les effets des ondes acoustiques ont été supprimés. Ce système prend la forme suivante :

Equations de bilan de la masse des espèces \mathcal{M}_s , $s \in \{\text{F}, \text{Ox}, \text{P}\}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_s) + \nabla \cdot (\rho Y_s \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_s + \dot{\rho}_s \quad (\text{V.26})$$

Equation de bilan de la masse totale du mélange :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{V.27})$$

Equation de bilan de la quantité de mouvement du mélange :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + \frac{1}{\gamma} P_1 \text{Id}) = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau + \frac{1}{\text{Fr}^2} (\rho - \rho_0) \vec{g} \quad (\text{V.28})$$

où dans les effets de gravité, ρ_0 représente la masse volumique moyenne sur l'ensemble du domaine.

Equation de bilan de l'énergie du mélange :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \frac{dP_0}{dt} + \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + \frac{Q^0}{c_p} \dot{\rho}_F \quad (\text{V.29})$$

où Q^0 est la chaleur de réaction à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, définie par :

$$Q^0 = h_{\text{f},\text{F}}^0 + \frac{\dot{\nu}_{\text{Ox}} W_{\text{Ox}}}{\dot{\nu}_{\text{F}} W_{\text{F}}} h_{\text{f},\text{Ox}}^0 - \frac{\dot{\nu}_{\text{F}} W_{\text{F}}}{\dot{\nu}_{\text{F}} W_{\text{F}}} h_{\text{f},\text{P}}^0 \quad (\text{V.30})$$

Equation d'état :

$$P_0 = \rho \mathcal{R} T \quad \text{avec} \quad \mathcal{R} = \mathcal{R}_u \left(\sum_{s \in \{\text{F}, \text{Ox}, \text{P}, \text{I}\}} \frac{Y_s}{W_s} \right) \quad (\text{V.31})$$

En conclusion, nous avons $7 + d$ inconnues. Il s'agit de la fraction massique du combustible Y_F , de la fraction massique du comburant Y_{O_x} , de la fraction massique des produits Y_P , de la masse volumique du mélange ρ , des d composantes du champ de vitesse du mélange \vec{v} , de la pression dynamique P_1 , de la pression thermodynamique P_0 , et de la température du mélange T . Nous possédons par ailleurs $6 + d$ équations : $5 + d$ équations de bilan (conservation de la masse de l'espèce combustible (\mathcal{M}_F), comburant (\mathcal{M}_{O_x}), produits (\mathcal{M}_P), de la masse volumique du mélange, des d composantes de la quantité de mouvement et d'énergie) et une équation d'état. Il manque donc une équation pour résoudre le modèle à faible nombre de Mach. Nous détaillons l'équation manquante dans le paragraphe V.2 suivant.

V.2 La pression thermodynamique P_0

Dans ce paragraphe, nous détaillons l'équation manquante du modèle à faible nombre de Mach pour trois cas : le cas d'un domaine Ω ouvert, le cas d'un domaine Ω fermé et celui d'un domaine Ω relié à l'atmosphère. On consultera Frölich [21] pour une analyse des différents cas exposés ci-dessous.

V.2.1 Cas d'un domaine Ω ouvert

Le fluide est en contact avec un très grand réservoir à pression P_∞ , par exemple l'atmosphère. Alors,

$$P_0(t) = P_\infty = \text{connu}$$

V.2.2 Cas d'un domaine Ω fermé

Pour calculer P_0 en fonction du temps, on utilise des relations intégrales à l'aide soit de l'équation de bilan d'énergie, soit de la loi d'état. Ces relations intégrales sont réalisées sur l'ensemble du domaine de calcul, puisque par construction, la pression thermodynamique est uniforme en espace.

Equation de bilan de l'énergie. Tout d'abord, nous pouvons exprimer l'évolution de la pression thermodynamique. En effet, quelques manipulations dans l'équation de bilan de l'énergie du mélange à l'aide des équations (V.26), de la loi d'état (V.31) et de la chaleur de réaction par unité de masse de combustible consommé Q^0 permettent de déduire un autre bilan énergétique sous la forme :

$$\frac{1}{\gamma} \frac{dP_0}{dt} + P_0 \nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + \frac{Q^0}{c_p} \dot{\rho}_F \quad (\text{V.32})$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = -\frac{1}{P_0} \left[\frac{1}{\gamma} \frac{dP_0}{dt} - \left(\frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + \frac{Q^0}{c_p} \dot{\rho}_F \right) \right] \quad (\text{V.33})$$

On intègre l'équation (V.33) sur tout le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{v} d\Omega = -\frac{1}{P_0} \left[\frac{1}{\gamma} \frac{dP_0}{dt} \int_{\Omega} d\Omega - \int_{\Omega} \left(\frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + \frac{Q^0}{c_p} \dot{\rho}_F \right) d\Omega \right]$$

Par la théorème de Gauss, on obtient :

$$\oint_{\partial\Omega} \vec{v} \cdot \vec{n} d\sigma = -\frac{1}{P_0} \left[\frac{1}{\gamma} \frac{dP_0}{dt} \int_{\Omega} d\Omega - \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \oint_{\partial\Omega} \nabla T \cdot \vec{n} d\sigma + \frac{Q^0}{c_p} \int_{\Omega} \dot{\rho}_F d\Omega \right] \quad (\text{V.34})$$

Or pour un domaine fermé, le champ de vitesses est toujours nul ou constant aux bords. Il existe donc une relation de compatibilité pour l'équation (V.34), car elle n'est vérifiée que si l'intégrale du second membre est compatible avec les conditions du champ de vitesse aux bords. On calcule alors P_0 pour un domaine fermé par :

$$\frac{dP_0}{dt} = \frac{\gamma}{\text{mes}(\Omega)} \left[- \oint_{\partial\Omega} \left(P_0 \vec{v} - \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla T \right) \cdot \vec{n} d\sigma + \frac{Q^0}{c_p} \int_{\Omega} \dot{\rho}_F d\Omega \right] \quad (\text{V.35})$$

Loi d'état. La loi d'état est : $P_0 = \rho \mathcal{R} T$.

En intégrant cette loi d'état sur le domaine Ω , on obtient :

$$\int_{\Omega} \rho \, d\Omega = \frac{P_0}{\mathcal{R}} \int_{\Omega} \frac{d\Omega}{T}$$

On définit la masse incluse dans le domaine par :

$$m_0 = \int_{\Omega} \rho \, d\Omega$$

et on obtient :

$$P_0 = \frac{\mathcal{R} m_0}{\int_{\Omega} \frac{d\Omega}{T}} \quad (\text{V.36})$$

Cette relation (V.36) reste vraie, quelles que soient les conditions aux limites.

Pour un domaine fermé, la masse incluse dans le domaine reste constante :

$$m_0(t) = m_0(t = 0) = \text{connue} \quad (\text{V.37})$$

VI Cas d'une chimie simple et infiniment rapide

L'objectif de ce paragraphe est de simplifier l'expression des équations de bilan de la masse des espèces et d'énergie à l'aide principalement de l'hypothèse de chimie simple. Nous verrons que quelques manipulations algébriques permettent de retirer le terme source dû à la réaction chimique de la plupart des équations, en considérant des combinaisons linéaires des variables. Ces combinaisons linéaires sont souvent nommées *fonctions couplées*. L'approche utilisée, pour la dérivation des équations des fonctions couplées, est la *formulation de Shvab-Zel'dovich*. L'établissement des relations données ci-dessous est détaillé en Annexe A.

Sous l'hypothèse II.1 de chimie simple définie au paragraphe II.3, le système d'équations de bilan de la masse des espèces combustible, oxydant, inerte et produit et de la température se réduit donc à :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial (\rho Y_F)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_F \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_F - W_F \hat{\nu}_F \dot{\omega} \\ \frac{\partial (\rho Y_{O_x})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_{O_x} \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_{O_x} - W_{O_x} \hat{\nu}_{O_x} \dot{\omega} \\ \frac{\partial (\rho Y_P)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_P \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_P + W_P \hat{\nu}_P \dot{\omega} \\ \frac{\partial (\rho Y_I)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_I \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_I \\ \frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \frac{dP_0}{dt} + W_F \hat{\nu}_F \frac{Q^0}{c_p} \dot{\omega} \end{array} \right.$$

En supposant que le domaine d'étude Ω est relié à l'atmosphère, *i.e.* $P_0 = P_{\text{atm}}$, les variations de la pression thermodynamique sont nulles et l'équation de bilan de la température se simplifie en :

$$\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T + W_F \hat{\nu}_F \frac{Q^0}{c_p} \dot{\omega}$$

Supposons que les masses des espèces et la chaleur diffusent avec la même rapidité, c'est-à-dire $\text{Le} = 1 \Rightarrow \text{Pr} = \text{Sc}$, alors les équations de bilan précédentes vérifient le même type d'équation aux dérivées partielles (équation de convection-diffusion avec un terme source). Ce système d'équations de bilan se met sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho Y_F)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_F \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_F - W_F \hat{\nu}_F \dot{\omega} \\ \frac{\partial(\rho Y_{O_x})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_{O_x} \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_{O_x} - W_{O_x} \hat{\nu}_{O_x} \dot{\omega} \\ \frac{\partial(\rho Y_P)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_P \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_P + W_P \hat{\nu}_P \dot{\omega} \\ \frac{\partial(\rho Y_I)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_I \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Y_I \\ \frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 T + W_F \hat{\nu}_F \frac{Q^0}{c_p} \dot{\omega} \end{array} \right.$$

Nous définissons le facteur stœchiométrique s , et la richesse équivalente φ par les relations suivantes :

$$s = \frac{\hat{\nu}_{O_x} W_{O_x}}{\hat{\nu}_F W_F}, \quad \varphi = s \frac{Y_F^0}{Y_{O_x}^0}$$

Nous remarquons que la quantité $(\hat{\nu}_{O_x} W_{O_x} Y_F - \hat{\nu}_F W_F Y_{O_x})$ vérifie une équation aux dérivées partielles sans terme source. Il s'agit simplement de multiplier l'équation de bilan de la masse de combustible par $\hat{\nu}_{O_x} W_{O_x}$, de multiplier l'équation de bilan de la masse d'oxydant par $\hat{\nu}_F W_F$ et de les soustraire. Il en est de même pour la quantité $\varphi \frac{Y_F}{Y_F^0} - \frac{Y_{O_x}}{Y_{O_x}^0}$.

Posons alors :

$$Z_1 = \frac{\varphi \frac{Y_F}{Y_F^0} - \frac{Y_{O_x}}{Y_{O_x}^0} + 1}{1 + \varphi}$$

Z_1 vérifie également une équation aux dérivées partielles sans terme source. De plus, Z_1 caractérise le mélange au sens où $Z_1 = 1$ dans le combustible pur, et $Z_1 = 0$ dans l'oxydant pur.

Posons encore :

$$Z_2 = \frac{Y_F + \frac{Y_P}{1+s}}{Y_F^0}, \quad Z_3 = \frac{Q^0 Y_F + c_p(T - T_{O_x}^0)}{Q^0 Y_F^0 + c_p(T_F^0 - T_{O_x}^0)}$$

Nous vérifions que Z_1 , Z_2 et Z_3 satisfont tous la même équation aux dérivées partielles sans terme source, qui s'écrit (cf. Annexe A) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z_i) + \nabla \cdot (\rho Z_i \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z_i, \quad \forall i \in \{1, 3\}$$

En s'assurant que Z_1 , Z_2 et Z_3 vérifient les mêmes conditions initiales et les mêmes conditions aux limites, nous avons donc égalité de ces trois valeurs en tout point et en tout instant.

Sur la frontière Γ du domaine de calcul Ω , considérons deux jets ayant des propriétés uniformes sur une portion de la frontière : une injection de combustible (d'indice F , d'exposant 0 pour l'état de référence), et une injection d'oxydant (d'indice O_x , d'exposant 0 pour l'état de référence).

Supposons qu'il n'y ait ni oxydant ni produits dans le jet de combustible, c'est à dire $(Y_{O_x})_F^0 = 0$, $(Y_P)_F^0 = 0$, et qu'il n'y ait ni combustible ni produits dans le jet d'oxydant, *i.e.* $(Y_F)_{O_x}^0 = 0$, $(Y_P)_{O_x}^0 = 0$. Dans ce cas, les quantités Z_1 , Z_2 et Z_3 satisfont les mêmes conditions aux limites. Nous considérons de plus que le domaine de calcul est initialement rempli d'air. Dans ce cas, les quantités Z_1 , Z_2 et Z_3 satisfont les mêmes conditions initiales.

Alors, nous posons $Z := Z_1 = Z_2 = Z_3$. La fraction de mélange Z satisfait l'équation de bilan sans terme source suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z) + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z$$

Supposons enfin que la chimie soit infiniment rapide. Les réactions chimiques sont tellement rapides que le combustible (\mathcal{M}_F) et l'oxydant (\mathcal{M}_{O_x}) ne peuvent coexister dans la même particule fluide sans produire immédiatement des produits brûlés (\mathcal{M}_P). La réaction chimique est localisée à la stœchiométrie du mélange, notée flamme, qui constitue alors une surface infiniment mince.

Dans ce cadre, nous savons que la facteur stœchiométrique est (cf. Williams [58]) : $s = \left(\frac{Y_{Ox}}{Y_F} \right)_c$, donc la fraction de mélange stœchiométrique s'écrit :

$$Z_c = \frac{1}{1 + \varphi}$$

Connaissant alors la position de la flamme, et sachant que ni le combustible ni l'oxydant ne peuvent la traverser, nous en déduisons les fractions massiques et les températures dans tout le domaine. Nous obtenons :

$$\text{Pour } Z \leq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F = 0 \\ Y_{Ox} = Y_{Ox}^0 [1 - (\varphi + 1)Z] \\ Y_P = Y_{Ox}^0 \frac{(1+s)}{s} \varphi Z \\ Y_I = 1 - Y_{Ox} - Y_P \\ T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z \end{array} \right.$$

$$\text{Pour } Z \geq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F = Y_F^0 \frac{(1+\varphi)Z - 1}{\varphi} \\ Y_{Ox} = 0 \\ Y_P = Y_F^0 \frac{(1+s)(1-Z)}{\varphi} \\ Y_I = 1 - Y_F - Y_P \\ T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} \frac{1-Z}{\varphi} \end{array} \right.$$

De plus, nous pouvons définir la température adiabatique de flamme. C'est la température maximale, atteinte pour la valeur stœchiométrique de la fraction de mélange. Elle est définie par :

$$T_c = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z_c + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z_c$$

VII Résumé

VII.1 Equations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante

Les écoulements incompressibles à masse volumique constante sont représentés par le système d'équations de Navier-Stokes, qui est composé de l'équation de conservation de la masse et de l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{VII.38})$$

$$\rho_0 \left\{ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right\} + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau \quad (\text{VII.39})$$

où ρ_0 est la masse volumique du mélange (constante), \vec{v} la vitesse du mélange, P_1 la pression dynamique et τ le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = \nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T$.

VII.2 Equations de conservation des écoulements à faible nombre de Mach non réactif

Les écoulements à faible nombre de Mach non réactifs sont représentés par un système d'équations de conservation, qui sont l'équation de conservation de la masse, l'équation de conservation de la

quantité de mouvement et l'équation de conservation de l'énergie, l'équation d'état des gaz parfaits et l'équation d'évolution pour la pression thermodynamique :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{VII.40})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + \frac{1}{\gamma} P_1 \mathbf{Id}) = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau + \frac{1}{\text{Fr}^2} (\rho - \rho_0) \vec{g} \quad (\text{VII.41})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \frac{dP_0}{dt} + \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T \quad (\text{VII.42})$$

$$P_0 = \rho \mathcal{R} T \quad (\text{VII.43})$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{dP_0}{dt} + P_0 \nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T \quad (\text{VII.44})$$

où ρ est la masse volumique du mélange, \vec{v} la vitesse du mélange, P_1 la pression dynamique, τ le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = -\frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} + (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$, $\rho \vec{g}$ représente les forces de gravité, γ est le rapport des chaleurs spécifiques, T la température du mélange, P_0 la pression thermodynamique, \mathcal{R} la constante des gaz parfaits. Les nombres sans dimension sont le nombre de Reynolds Re , le nombre de Prandtl Pr et le nombre de Froude Fr .

VII.3 Equations de conservation des écoulements à faible nombre de Mach réactif avec chimie simple et infiniment rapide

Nous considérons la réaction chimique simple suivante :



Les écoulements à faible nombre de Mach réactif avec chimie simple et infiniment rapide sont représentés par les équations de conservation de la masse totale, de la fraction de mélange, de la quantité de mouvement du mélange et l'équation d'état des gaz parfaits :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{VII.46})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z \quad (\text{VII.47})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + \frac{1}{\gamma} P_1 \mathbf{Id}) = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau \quad (\text{VII.48})$$

$$P_{\text{atm}} = \rho \mathcal{R}_u \left(\sum_{s \in \{F, \text{Ox}, P, I\}} \frac{Y_s}{W_s} \right) T \quad (\text{VII.49})$$

où ρ est la masse volumique du mélange et \vec{v} la vitesse du mélange, Z la fraction de mélange, P_1 la pression dynamique, τ le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = -\frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} + (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$, γ le rapport des chaleurs spécifiques, P_{atm} la pression atmosphérique, \mathcal{R}_u la constante universelle des gaz parfaits, Y_s (resp. W_s) sont les fractions massiques (resp. les masses molaires) des espèces combustible (\mathcal{M}_F), oxydant (\mathcal{M}_{Ox}), inerte (\mathcal{M}_I) et produits (\mathcal{M}_P), T la température du mélange. Les nombres sans dimension sont le nombre de Reynolds Re , le nombre de Prandtl Pr et le nombre de Schmidt Sc .

Par ailleurs, nous avons les relations suivantes :

$$\text{Pour } Z \leq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F = 0 \\ Y_{Ox} = Y_{Ox}^0 [1 - (\varphi + 1)Z] \\ Y_P = Y_{Ox}^0 \frac{(1+s)}{s} \varphi Z \\ Y_I = 1 - Y_{Ox} - Y_P \\ T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z \end{array} \right. \quad (\text{VII.50})$$

$$\text{Pour } Z \geq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F = Y_F^0 \frac{(1+\varphi)Z - 1}{\varphi} \\ Y_{Ox} = 0 \\ Y_P = Y_F^0 \frac{(1+s)(1-Z)}{\varphi} \\ Y_I = 1 - Y_F - Y_P \\ T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} \frac{1-Z}{\varphi} \end{array} \right.$$

où s est le facteur stœchiométrique, défini par :

$$s = \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F}, \quad (\text{VII.51})$$

φ est la richesse équivalente, définie par :

$$\varphi = s \frac{Y_F^0}{Y_{Ox}^0}, \quad (\text{VII.52})$$

Z_c est la fraction de mélange stœchiométrique, définie par :

$$Z_c = \frac{1}{1 + \varphi}, \quad (\text{VII.53})$$

et Q^0 est la chaleur de réaction à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, définie par :

$$Q^0 = h_{f,F}^0 + \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F} h_{f,Ox}^0 - \frac{\hat{\nu}_P W_P}{\hat{\nu}_F W_F} h_{f,P}^0. \quad (\text{VII.54})$$

Nous pouvons calculer la température adiabatique de flamme T_c comme la température maximale atteinte pour la valeur stœchiométrique de la fraction de mélange :

$$T_c = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z_c + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z_c \quad (\text{VII.55})$$

VII.4 Conditions initiales et conditions aux limites

Les conditions initiales pour le champ de vitesse sont :

$$\vec{v}(\vec{x}, t = 0) = \vec{v}_0(\vec{x}) \quad (\text{VII.56})$$

Les conditions initiales pour la température du mélange et la pression thermodynamique sont :

$$T(\vec{x}, t = 0) = T_0(\vec{x}) \quad (\text{VII.57})$$

$$P_0(\vec{x}, t) = P_{\text{atm}} \quad (\text{VII.58})$$

De ce fait, la condition initiale pour la masse volumique du mélange est dans le cas mono-constituant :

$$\rho(\vec{x}, t = 0) = \rho_0(\vec{x}) = \frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R} T_0(\vec{x})} \quad (\text{VII.59})$$

Sinon, nous définissons le mélange initial par ses fractions de mélange :

$$Y_{\text{F}}^0 = 0, \quad Y_{\text{Ox}}^0 = 0.232, \quad Y_{\text{I}}^0 = 0.768, \quad Y_{\text{P}}^0 = 0 \quad (\text{VII.60})$$

dans le cas d'un mélange initial qui est de l'air. La masse volumique initiale du mélange est alors donnée par :

$$\rho_0(\vec{x}) = \frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R}_u \left(\sum_{s \in \{\text{F}, \text{Ox}, \text{P}, \text{I}\}} \frac{Y_s^0}{W_s} \right) T_0(\vec{x})} \quad (\text{VII.61})$$

Les conditions aux limites de type Dirichlet sont :

- les conditions d'injection :

$$\rho \vec{v} = (\rho \vec{v})_{\text{q}}, \quad (\text{VII.62})$$

- les conditions d'éjection :

$$\vec{v} \cdot \vec{t} = 0, \quad P_1 = 0, \quad (\text{VII.63})$$

- les conditions de non-glissement à la paroi :

$$\vec{v} = \vec{0}, \quad (\text{VII.64})$$

- pour une paroi chauffée :

$$T = T_h, \quad (\text{VII.65})$$

- pour une paroi refroidie :

$$T = T_c. \quad (\text{VII.66})$$

Les conditions aux limites de type Neumann homogène sont :

- les conditions de symétrie :

$$\frac{\partial(\vec{v} \cdot \vec{t})}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{VII.67})$$

- les conditions de parois adiabatiques :

$$\nabla T \cdot \vec{n} = 0. \quad (\text{VII.68})$$

Chapitre 2

Discrétisation numérique

Dans ce chapitre, nous présentons la discrétisation numérique des équations de conservation des écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse et à faible nombre de Mach définies au chapitre 1.

Tout d'abord, nous réalisons la discrétisation temporelle d'une équation de conservation pour un scalaire au paragraphe I. Puis, nous présentons la discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes par les méthodes de projection au paragraphe II. Au paragraphe II.1, nous traitons les méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes dans le cas des écoulements incompressibles à masse volumique constante, décrites plus en détail en Annexe B.

Ensuite, le paragraphe II.2 donne la méthode de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements à faible nombre de Mach, spécialement développée pour nos applications. Au paragraphe III, nous résumons les deux algorithmes issus de la discrétisation temporelle des modèles à faible nombre de Mach non réactif et réactif.

Enfin, le paragraphe IV est consacré à la discrétisation spatiale des équations de conservation par une méthode de volumes finis sur maillage décalé de type MAC. Les paragraphes IV.2 et IV.3 décrivent les estimations des flux diffusifs et convectifs. Enfin, le paragraphe IV.4 traite de la résolution numérique des systèmes algébriques issus de la discrétisation numérique. Une remarque particulière liée à la méthode de projection développée est soulignée dans le cas d'un problème de Poisson avec des conditions aux limites de type Neumann homogène.

L'intervalle de temps $[0; T]$ est partitionné en $N + 1$ intervalles de temps, notés $]t^n; t^{n+1}]$, $\forall n \in \{0; N\}$, avec $\Delta t = T/N$ le pas de temps. Par la suite, nous noterons par l'exposant n la solution discrète au temps t^n , par exemple \vec{v}^n est une approximation du champ de vitesse $\vec{v}(t^n)$ au temps t^n , $\forall n \in \{0; N\}$.

I Discrétisation temporelle d'une équation de conservation d'un scalaire

Nous considérons l'équation de conservation d'une quantité scalaire φ , qui s'écrit sous la forme générique suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) + \nabla \cdot (\rho \varphi \vec{v}) = \nabla \cdot (\alpha_\varphi \nabla \varphi) + S_\varphi \quad (\text{I.1})$$

où φ est la quantité conservée, ρ est la masse volumique, \vec{v} est le champ de vitesse, α_φ est le coefficient de diffusion de la quantité φ , et S_φ est le terme source associé à la quantité φ . La condition initiale est :

$$\varphi(\vec{x}, t = 0) = \varphi_0(\vec{x}). \quad (\text{I.2})$$

Nous choisissons de discrétiser l'équation (I.1) sur un pas de temps t^n et $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ de la manière suivante :

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} \varphi^{n+1} - \rho^n \varphi^n) + \nabla \cdot (\rho^n \varphi^n \vec{v}^n) = \nabla \cdot (\alpha_\varphi^{n+1} \nabla \varphi^{n+1}) + S_\varphi^n \quad (\text{I.3})$$

Les termes instationnaires sont ainsi discrétisés par une méthode d'Euler implicite d'ordre 1 en temps. Les flux convectifs sont explicites et les flux diffusifs implicites. Le terme source est explicite.

I.1 Application à l'équation de bilan de température dans le cas non réactif

Nous rappelons que l'équation de bilan de l'énergie portant sur la température dans le cas du faible nombre de Mach s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \frac{dP_0}{dt} + \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T \quad (\text{I.4})$$

La discrétisation temporelle de l'équation (I.4) est alors :

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} T^{n+1} - \rho^n T^n) + \nabla \cdot (\rho^n T^n \vec{v}^n) = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \frac{1}{\Delta t} (P_0^{n+1} - P_0^n) + \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T^{n+1} \quad (\text{I.5})$$

I.2 Application à l'équation de bilan de fraction de mélange dans le cas réactif

Nous rappelons que l'équation de bilan de fraction de mélange du modèle à faible nombre de Mach s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z \quad (\text{I.6})$$

La discrétisation temporelle de l'équation (I.6) est donc :

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} Z^{n+1} - \rho^n Z^n) + \nabla \cdot (\rho^n Z^n \vec{v}^n) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z^{n+1} \quad (\text{I.7})$$

II Discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes : méthodes de projection

Les méthodes de projection ont été initialement proposées par Chorin [16] pour calculer les écoulements incompressibles. Elles sont basées sur la décomposition de Hodge et s'effectue en deux étapes. Tout d'abord, on estime un champ de vitesse intermédiaire par le bilan de quantité de mouvement sans tenir compte des termes de pression, ce qui revient à calculer les termes instationnaires et de convection-diffusion. Puis en résolvant le bilan de masse volumique avec ce champ de vitesse, on calcule le champ de pression, et on corrige le champ de vitesse, *i.e.* projette le champ de vitesse intermédiaire sur l'espace des champs de vecteurs à divergence nulle.

Cette méthode, discrétisée en espace par des différences finies, est d'ordre $O(\Delta t + \Delta x^2)$ pour des conditions aux limites périodiques en 2-D ou 3-D.

Par la suite, la méthode de projection proposée par Chorin a été largement testée pour les écoulements incompressibles. En premier lieu, Kim et Moin [32] utilisent l'algorithme de Chorin, en remplaçant le traitement des termes non linéaires par une méthode d'Adams-Bashforth explicite d'ordre $O(\Delta x^2)$ et en utilisant le maillage décalé de type MAC, proposé par Harlow et Welch [27]. Ils montrent numériquement que la méthode construite est d'ordre $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Van Kan [52] propose une autre généralisation de la méthode de projection de Chorin par un schéma de Crank-Nicholson avec le maillage MAC d'Harlow et Welch, qui sous certaines conditions de régularité est d'ordre $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Bell *et al.* [3] introduisent plus de couplage entre l'étape de prédiction du champ de vitesse intermédiaire et l'étape de projection, et traitent les termes advectifs avec une méthode de Godunov. Ils obtiennent alors une méthode de projection d'ordre $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Zhu [59] utilise la méthode de projection de Bell *et al.* [3] pour calculer des écoulements à grands nombres de Reynolds. Zhu conclut que les résultats obtenus confirment l'ordre de la méthode et donnent des solutions physiquement acceptables jusqu'au régime turbulent.

Minion [42] étend la méthode de projection de Bell *et al.* à une méthode de raffinement de maillage, inspirée de celle proposée par Berger et Oliger [7], dans le cas des écoulements incompressibles. Minion précise que l'ordre de la méthode est $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Par la suite, la méthode de projection par Bell *et al.* a été étendue aux écoulements incompressibles à densité variable dans Bell et Marcus [4] et avec raffinement local de maillage par Almgren *et al.* [1]. Elle traite aussi le cas des écoulements réactifs à faible nombre de Mach par Lai [36] et Klein [33] où l'étape de projection utilise une expression de la divergence du champ de vitesse obtenue en combinant l'équation de bilan de masse volumique, d'énergie et l'équation d'état [41]. Dans le cadre de la méthode de projection de Lai [36], une stratégie de raffinement est développée dans Pember *et al.* [45].

Bijl et Wesseling [8, 9, 56] ont mis au point une méthode de projection avec une discrétisation spatiale par des volumes finis permettant de calculer les écoulements incompressibles et compressibles. Avec cette méthode de projection, l'ordre de précision temporelle est d'au moins $O(\Delta t)$ pour des écoulements compressibles et de $O(\Delta t)^2$ pour des écoulements incompressibles. Le but principal de cette méthode de projection est la robustesse et la précision quel que soit le nombre de Mach.

Dans nos applications, nous avons développé une méthode de projection différente : nous utilisons dans l'étape de projection la forme générale de l'équation de bilan de masse volumique, *i.e.*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

Cette approche conduit à généraliser une méthode de projection pour les écoulements à masse volumique variable, puisque les variations temporelles et spatiales de la masse volumique interviennent dans de nombreux phénomènes physiques.

A notre connaissance, le travail de Najm *et al.* [26] est la seule utilisation antérieure de ce type de projection : Najm *et al.* résolvent un problème de combustion (flammes de prémélange) par le même type de méthode de projection formellement d'ordre $O(\Delta t^2)$ et utilisent une méthode de différences finies pour la discrétisation spatiale. Dans notre cas, nous utilisons une discrétisation spatiale par des volumes finis sur maillage MAC et avons simplifié la méthode de Najm *et al.* à l'ordre $O(\Delta t)$. Pour notre méthode de projection, nous avons développé une méthode de raffinement local multi-niveaux, dont l'algorithme est introduit par Angot *et al.* [2] et est détaillée au chapitre 3.

Enfin, les méthodes de projection sont étudiées dans de nombreuses publications dans le cas d'écoulements incompressibles, dont on pourra voir à cet effet l'étude de la précision temporelle pour la forme incrémentale de la méthode de projection de Chorin par Wetton [57], le lien entre les méthodes de projection et la décomposition ILU par Blair Perot [10], l'analyse des estimations d'erreurs pour la vitesse et la pression pour des schémas de premier ordre par Shen [48], et du second ordre par Shen [49]. Enfin, une revue générale de l'étape de projection qui sert à imposer l'incompressibilité est réalisée par Guermond dans [24].

II.1 Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante

Les écoulements incompressibles à masse volumique constante sont représentés par le système d'équations de Navier-Stokes, composé de l'équation de conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{II.8})$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho_0 \left\{ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right\} + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau \quad (\text{II.9})$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$ et Re est le nombre de Reynolds.

Les conditions initiales sont :

$$\vec{v}(\vec{x}, t = 0) = \vec{v}_0(\vec{x}). \quad (\text{II.10})$$

Les conditions aux limites sont des conditions de Dirichlet :

$$\vec{v} = \vec{v}_D. \quad (\text{II.11})$$

Les équations (II.8) et (II.9) sont fondamentalement différentes de celles d'un écoulement compressible. Les équations de conservation d'un écoulement compressible sont des équations d'évolution pour la masse volumique ρ , la vitesse \vec{v} et la pression P_1 . Pour des conditions initiales données, ces équations forment un problème de Cauchy bien posé. Dans le cas d'un écoulement incompressible, les équations de Navier-Stokes sont la combinaison d'une équation d'évolution (II.9) et d'une contrainte (II.8) sur le champ de vitesse, indépendante du temps. De plus, il n'y a aucune équation évidente pour la pression P_1 .

Ces équations (II.8) et (II.9) peuvent être reformulées en introduisant le concept de projection. Ce concept est basé sur la décomposition de Hodge qui sépare un champ de vecteurs arbitraire en deux composantes orthogonales : une à divergence nulle et l'autre exprimée comme le gradient d'un champ scalaire. Considérons un domaine Ω ouvert de \mathbb{R}^n , de frontière $\partial\Omega$ suffisamment régulière, et de vecteur normal \vec{n} . Soit un vecteur \vec{w} quelconque de Ω , tel que \vec{w} soit suffisamment régulier sur la frontière $\partial\Omega$ de Ω .

Alors la décomposition de Hodge du vecteur \vec{w} s'écrit sous la forme :

$$\vec{w} = \vec{w}_d + \nabla \phi \quad (\text{II.12})$$

où \vec{w}_d est solution du problème aux limites suivant :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{w}_d = 0 & \text{sur } \Omega, \\ \vec{w}_d \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{II.13})$$

et ϕ est solution de l'équation elliptique :

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi = \nabla \cdot \vec{w} & \text{sur } \Omega, \\ \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{w} \cdot \vec{n} & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

Cette décomposition est orthogonale au sens du produit scalaire suivant :

$$\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \vec{v} \, d\Omega \quad (\text{II.15})$$

Avec cette décomposition, nous pouvons alors définir l'opérateur de projection orthogonal \mathbf{P} comme l'opérateur qui projete un champ de vecteurs \vec{w} sur l'espace des champs de vecteurs à divergence nulle, *i.e.*

$$\mathbf{P}(\vec{w}) = \vec{w}_d \quad (\text{II.16})$$

La relation entre l'opérateur de projection \mathbf{P} et la composante gradient $\nabla\phi$ s'écrit :

$$\mathbf{Q}(\vec{w}) = (\mathbf{Id} - \mathbf{P})(\vec{w}) = \nabla\phi \quad (\text{II.17})$$

Notons que l'opérateur \mathbf{P} opérant sur un gradient donne zéro, *i.e.* $\mathbf{P}(\nabla\phi) = 0$, tandis qu'il laisse un champ de vecteur à divergence nulle inchangé, *i.e.* $\mathbf{P}(\vec{w}_d) = \vec{w}_d$. Nous avons alors $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$.

L'opérateur de projection \mathbf{P} s'applique aux équations de Navier-Stokes (II.8) et (II.9) et donne pour $\vec{w} = -(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho_0 \text{Re}} \nabla \cdot \tau$, la formulation suivante :

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \mathbf{P} \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho_0 \text{Re}} \nabla \cdot \tau \right) \quad (\text{II.18})$$

Cette formulation modifie les équations de Navier-Stokes en une unique équation d'évolution pour la vitesse, pour laquelle la contrainte (II.8) est automatiquement vérifiée si $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ au temps $t = 0$. Avec des conditions initiales qui vérifient la contrainte (II.8), l'équation (II.18) est un problème de Cauchy bien posé. Par ailleurs, la formulation par l'opérateur de projection \mathbf{P} nous permet de mieux comprendre le rôle du gradient de pression, qui vérifie l'équation :

$$\frac{1}{\rho_0 \gamma} \nabla P_1 = (\mathbf{Id} - \mathbf{P}) \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho_0 \text{Re}} \nabla \cdot \tau \right) \quad (\text{II.19})$$

∇P_1 est la composante gradient de la décomposition de Hodge, qui est éliminée lorsque l'opérateur de projection est appliqué pour satisfaire la contrainte divergentielle (II.8).

La méthode de projection décompose chaque pas de temps Δt en deux sous-pas de la manière suivante :

Résoudre tout d'abord :

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} (\tilde{\vec{v}}^{n+1} - \vec{v}^n) + (\vec{v}^n \cdot \nabla) \vec{v}^n \\ \quad = \frac{1}{\rho_0 \text{Re}} \nabla \cdot \left((\nabla \tilde{\vec{v}}^{n+1} + \nabla \tilde{\vec{v}}^{n+1 \text{T}}) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\vec{v}}^{n+1}) \mathbf{Id} \right) \\ \text{condition de Dirichlet : } \vec{v}^n = \tilde{\vec{v}}^{n+1} = \vec{v}_D ; \end{cases} \quad (\text{II.20})$$

Puis le champ de vitesse prédit est projeté sur l'espace des champs de vitesses à divergence nulle, *i.e.*

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} (\vec{v}^{n+1} - \tilde{\vec{v}}^{n+1}) + \frac{1}{\gamma \rho_0} \nabla P_1^{n+1} = 0 \\ \nabla \cdot \vec{v}^{n+1} = 0 \\ \text{condition de Dirichlet : } \vec{v}^{n+1} = \tilde{\vec{v}}^{n+1} = \vec{v}_D ; \end{cases} \quad (\text{II.21})$$

La série \vec{v}^n est initialisée par $\vec{v}^0 = \vec{v}_0$.

L'algorithme précédent peut être amélioré en calculant une meilleure estimation du champ de vitesse prédit $\tilde{\vec{v}}^{n+1}$ en incorporant le gradient de pression dynamique ∇P_1^n estimé au temps précédent t^n . Cet algorithme est noté méthode de projection incrémentale et est défini par :

Résoudre tout d'abord :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t}(\tilde{v}^{n+1} - \vec{v}^n) + (\vec{v}^n \cdot \nabla) \vec{v}^n + \frac{1}{\gamma \rho_0} \nabla P_1^n \\ \qquad \qquad \qquad = \frac{1}{\rho_0 \text{Re}} \nabla \cdot \left(\left(\nabla \tilde{v}^{n+1} + \nabla \tilde{v}^{n+1 \text{T}} \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{v}^{n+1}) \text{Id} \right) \\ \text{condition de Dirichlet : } \vec{v}^n = \tilde{v}^{n+1} = \vec{v}_D ; \end{array} \right. \quad (\text{II.22})$$

Puis le champ de vitesse prédit est projeté sur l'espace des champs de vitesses à divergence nulle, *i.e.*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t}(\vec{v}^{n+1} - \tilde{v}^{n+1}) + \frac{1}{\gamma \rho_0} (\nabla P_1^{n+1} - \nabla P_1^n) = 0 \\ \nabla \cdot \vec{v}^{n+1} = 0 \\ \text{condition de Dirichlet : } \vec{v}^{n+1} = \tilde{v}^{n+1} = \vec{v}_D ; \end{array} \right. \quad (\text{II.23})$$

La série \vec{v}^n (resp. P_1^n) est initialisée par $\vec{v}^0 = \vec{v}_0$ (resp. $(P_1)_0$).

On note que cet algorithme suppose plus de régularité que la forme non-incrémentale puisqu'une condition supplémentaire sur la condition initiale pour la pression dynamique est demandée, *i.e.* $P_1^0 = (P_1)_0$.

Les étapes (II.21) et (II.23) sont des étapes de projection, car elles sont équivalentes à :

$$\vec{v}^{n+1} = \mathbf{P}(\tilde{v}^{n+1}) \quad (\text{II.24})$$

où \mathbf{P} est la projection orthogonale sur l'espace des vecteurs à divergence nulle.

Dans le cas de la méthode de projection non-incrémentale (II.20)-(II.21), nous avons :

$$\nabla P_1^{n+1} = (\vec{v}^{n+1} - \mathbf{P}(\tilde{v}^{n+1})) / \Delta t \quad (\text{II.25})$$

Et dans le cas de la méthode de projection incrémentale (II.22)-(II.23), nous obtenons :

$$\nabla(P_1^{n+1} - P_1^n) = (\vec{v}^{n+1} - \mathbf{P}(\tilde{v}^{n+1})) / \Delta t \quad (\text{II.26})$$

II.2 Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes pour des écoulements à faible nombre de Mach

Les écoulements à faible nombre de Mach sont représentés par le système d'équations de Navier-Stokes, qui sont l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{II.27})$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau + \frac{1}{\text{Fr}^2} (\rho - \rho_0) \vec{g} \quad (\text{II.28})$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = -\frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id} + (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^{\text{T}})$, ρ_0 est la masse volumique moyenne sur le domaine, Re est le nombre de Reynolds et Fr est le nombre de Froude.

Les conditions initiales sont :

$$\rho(\vec{x}, t = 0) = \rho_0(\vec{x}), \quad \vec{v}(\vec{x}, t = 0) = \vec{v}_0(\vec{x}), \quad P_1(\vec{x}, t = 0) = (P_1)_0(\vec{x}). \quad (\text{II.29})$$

Les conditions aux limites sont des conditions de Dirichlet pour :

- les conditions d'injection :

$$(\rho \vec{v}) = (\rho \vec{v})_q. \quad (\text{II.30})$$

- les conditions d'éjection :

$$P_1 = 0, \quad \vec{v} \cdot \vec{t} = 0. \quad (\text{II.31})$$

Les conditions de symétrie sont pour le champ de vitesse :

$$\frac{\partial}{\partial \vec{n}}(\vec{v} \cdot \vec{t}) = 0, \quad \vec{v} \cdot \vec{n} = 0, \quad (\text{II.32})$$

et pour la pression dynamique :

$$\frac{\partial P_1}{\partial \vec{n}} = 0. \quad (\text{II.33})$$

Pour les équations de Navier-Stokes relatives à des écoulements à faible nombre de Mach, chaque pas de temps de la méthode de projection est décomposé en deux sous-pas comme suit :

Pour ρ^n et ρ^{n+1} donnés, résoudre d'abord

(i) **Advection-Diffusion du champ de vitesse (AD)**

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t}(\rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} - \rho^n \vec{v}^n) + \nabla \cdot (\rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1^n \\ \quad = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left((\nabla \tilde{v}^{n+1} + \nabla \tilde{v}^{n+1 \text{T}}) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{v}^{n+1}) \text{Id} \right) + \frac{1}{\text{Fr}^2} (\rho^{n+1} - \rho_0^n) \vec{g} \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} = (\rho \vec{v})_{\text{q}} ; \quad \text{éjection : } P_1^n = 0, \tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 \\ \text{symétrie : } \frac{\partial}{\partial \vec{n}}(\tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{t}) = 0, \tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{n} = 0. \end{array} \right.$$

Puis, le champ de vitesse prédit \tilde{v}^{n+1} est projeté sur l'espace des champs de vitesse qui vérifient l'équation de bilan de masse, *i.e.*

(ii) **estimation de la Pression dynamique et Correction du champ de vitesse (PC)**

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t}(\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} - \rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} (\nabla P_1^{n+1} - \nabla P_1^n) = 0 \\ \nabla \cdot (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1}) = \frac{-1}{\Delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n) \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{n} = \rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{n} ; \quad \text{éjection : } P_1^{n+1} = 0, \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 \\ \text{symétrie : } \frac{\partial P_1^n}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \frac{\partial P_1^{n+1}}{\partial \vec{n}} = 0. \end{array} \right.$$

A notre connaissance, aucune estimation d'erreurs n'a été réalisée sur les méthodes de projection pour le modèle à faible nombre de Mach. Il est vrai que l'extension des résultats des écoulements incompressibles n'est pas facilement réalisable. Bell *et al.* [4] montrent toutefois numériquement un ordre $O(\Delta t^2)$ dans le cas des méthodes de projection pour des écoulements à masse volumique variable mais à divergence nulle.

III Discrétisation temporelle des modèles à faible nombre de Mach non réactif et réactif

III.1 Modèle à faible nombre de Mach non réactif

Le système d'équations formant le modèle à faible nombre de Mach non réactif est le système d'équations de conservation de la masse volumique, de la quantité de mouvement, de l'énergie avec l'équation d'état des gaz parfaits et une équation supplémentaire pour la pression thermodynamique. Il s'agit du système d'équations (VII.40)-(VII.44) décrit au paragraphe VII du chapitre 1.

Ce système d'équations de conservation précédent permet de représenter les écoulements anisothermes non réactifs (tels que les écoulements en convection naturelle par exemple).

La semi-discrétisation en temps du modèle à faible nombre de Mach non réactif se schématise par l'algorithme suivant :

Algorithme III.1 : Modèle à faible nombre de Mach non réactif

Initialisation : $P_0^0, T^0, \rho^0, \vec{v}^0, P_1^0$ données

Itérations : Pour $n = 0$ à N par pas de 1, faire

(1) **Calcul de T^{n+1}** :

$$\frac{\rho^n}{\Delta t} (T^{n+1} - T^n) + \nabla \cdot (\rho^n T^n \vec{v}^n) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T^{n+1} + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{P_0^{n+1} - P_0^n}{\Delta t} \right)$$

+ Conditions aux limites sur les vitesses \vec{v} et la température T

(2) **Calcul de P_0^{n+1}** :

$$\frac{|\Omega|}{\Delta t} (P_0^{n+1} - P_0^n) + P_0^{n+1} \oint_{\partial\Omega} \vec{v}^n \cdot \vec{n} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \oint_{\partial\Omega} \nabla T^{n+1} \cdot \vec{n}$$

+ Conditions aux limites sur la température T et les vitesses \vec{v}

(3) **Calcul de ρ^{n+1}** :

$$\rho^{n+1} = \frac{P_0^{n+1}}{T^{n+1}}$$

(4) **Méthode de projection incrémentale** :

(i) **Advection-Diffusion du champ de vitesse (AD)**

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1} - \rho^n \vec{v}^n) + \nabla \cdot (\rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1^n \\ \quad = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left((\nabla \tilde{\vec{v}}^{n+1} + \nabla \tilde{\vec{v}}^{n+1 \text{T}}) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\vec{v}}^{n+1}) \text{Id} \right) + \frac{1}{\text{Fr}^2} (\rho^{n+1} - \rho_0^n) \vec{g} \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1} = (\rho \vec{v})_{\text{q}} ; \quad \text{éjection : } P_1^n = 0, \tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 \\ \text{symétrie : } \frac{\partial}{\partial \vec{n}} (\tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{t}) = 0, \tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{n} = 0. \end{array} \right.$$

(ii) **estimation de la Pression dynamique et Correction du champ de vitesse (PC)**

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} - \rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} (\nabla P_1^{n+1} - \nabla P_1^n) = 0 \\ \nabla \cdot (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1}) = \frac{-1}{\Delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n) \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{n} = \rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{n} ; \quad \text{éjection : } P_1^{n+1} = 0, \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 \\ \text{symétrie : } \frac{\partial P_1^n}{\partial \vec{n}} = 0, \frac{\partial P_1^{n+1}}{\partial \vec{n}} = 0. \end{array} \right.$$

Dans l'Algorithme III.1 proposé précédemment, on note trois points importants :

– Le calcul de P_0 effectué à l'étape (2) n'assure généralement pas l'uniformité spatiale de la pression thermodynamique (conséquence de la méthode de perturbation).

Pour remédier aux erreurs numériques, on préférera, pour le cas d'un domaine fermé avec une masse incluse qui reste constante, la discrétisation de l'équation (VII.44) sous la forme suivante :

$$P_0^{n+1} = \frac{m_0}{\int_{\Omega} \frac{d\Omega}{T^{n+1}}}$$

avec

$$m_0 = \int_{\Omega} \rho^0 = \int_{\Omega} \frac{P_0^0}{T^0} = \int_{\Omega} \frac{P_0^n}{T^n}$$

D'où le calcul de la pression thermodynamique P_0^{n+1} de l'étape (2) qui peut s'écrire :

$$P_0^{n+1} = \frac{\int_{\Omega} \frac{P_0^n}{T^n}}{\int_{\Omega} \frac{d\Omega}{T^{n+1}}} \quad (\text{III.34})$$

- Pour calculer la température T^{n+1} , on utilise la masse volumique à l’instant initial pour estimer les termes instationnaires. Nous supposons donc que :

$$\frac{\rho^n}{\Delta t} (T^{n+1} - T^n) \approx \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) \right)^{n+1} \quad (\text{III.35})$$

Cette formulation n’assure pas que l’équation de bilan de l’énergie totale et la loi d’état sont satisfaites simultanément, sauf dans le cas des écoulements avec solutions stationnaires. Dans le cas des écoulements sans solutions stationnaires, il faut pouvoir suivre les évolutions de la température et de la masse volumique au cours du temps. Une stratégie possible pour vérifier à la fois l’équation de bilan d’énergie et la loi d’état est de considérer l’approximation suivante :

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho^* T^{n+1} - \rho^n T^n) \approx \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) \right)^{n+1}$$

avec ρ^* la masse volumique calculée par la loi d’état et initialisée par $\rho^* = \rho^n$. On itère, par exemple par une méthode de point fixe (méthode de Picard), au cours d’une itération en temps jusqu’à ce qu’un critère de convergence soit atteint ($|\rho^{n+1} - \rho^*| < \varepsilon$, avec ε donné).

- Enfin, un critère de stabilité de type CFL doit être respecté, en raison de l’utilisation d’une vitesse explicite \vec{v}^n dans le terme de convection de la température et du champ de vitesse. Nous avons choisi un schéma explicite pour les termes de flux convectifs en raison de sa simplicité algorithmique (même pour des schémas de décentrement d’ordre élevé, voir paragraphe IV) et de son faible coût en temps de calcul.

III.2 Modèle à faible nombre de Mach réactif

Le modèle à faible nombre de Mach réactif permet la représentation des écoulements multi-espèces réactifs (comme les phénomènes de mélange réactif, par exemple les flammes de diffusion laminaires). Il est composé des équations de conservation de la fraction de mélange, de la masse volumique du mélange, de la quantité de mouvement, de l’énergie avec l’équation d’état des gaz parfaits et une équation supplémentaire pour la pression thermodynamique. Il s’agit du système d’équations (VII.46)-(VII.49) décrit au paragraphe VII du chapitre 1.

La semi-discrétisation en temps du modèle à faible nombre de Mach réactif s’écrit sur un pas de temps t^n et $t^{n+1} = t^n + \Delta t$, comme l’algorithme suivant :

Algorithme III.2 : Modèle à faible nombre de Mach réactif

Initialisation : $P_0^0, T^0, \rho^0, \vec{v}^0, P^0$ données

Itérations : Pour $n = 0$ à N par pas de 1, faire

(1) **Calcul de Z^{n+1} :**

$$\frac{\rho^n}{\Delta t} (Z^{n+1} - Z^n) + \nabla \cdot (\rho^n Z^n \vec{v}^n) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z^{n+1}$$

+ Conditions aux limites sur les vitesses \vec{v} et la fraction de mélange Z

(2) Calcul de Y_s^{n+1} et T^{n+1} :

$$\text{Pour } Z^{n+1} \leq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F^{n+1} = 0 \\ Y_{O_x}^{n+1} = Y_{O_x}^0 [1 - (\varphi + 1)Z^{n+1}] \\ Y_P^{n+1} = Y_{O_x}^0 \frac{(1+s)}{s} \varphi Z^{n+1} \\ Y_I^{n+1} = 1 - Y_{O_x}^{n+1} - Y_P^{n+1} \\ T^{n+1} = T_{O_x}^0 + (T_F^0 - T_{O_x}^0)Z^{n+1} + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z^{n+1} \end{array} \right.$$

$$\text{Pour } Z^{n+1} \geq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F^{n+1} = Y_F^0 \frac{(1+\varphi)Z^{n+1} - 1}{\varphi} \\ Y_{O_x}^{n+1} = 0 \\ Y_P^{n+1} = Y_F^0 \frac{(1+s)(1-Z^{n+1})}{\varphi} \\ Y_I^{n+1} = 1 - Y_F^{n+1} - Y_P^{n+1} \\ T^{n+1} = T_{O_x}^0 + (T_F^0 - T_{O_x}^0)Z^{n+1} + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} \left[\frac{1-Z^{n+1}}{\varphi} \right] \end{array} \right.$$

où s est le facteur stœchiométrique, défini par :

$$s = \frac{\hat{\nu}_{O_x} W_{O_x}}{\hat{\nu}_F W_F},$$

φ est la richesse équivalente, définie par :

$$\varphi = s \frac{Y_F^0}{Y_{O_x}^0},$$

Z_c est la fraction de mélange stœchiométrique, définie par :

$$Z_c = \frac{1}{1 + \varphi}$$

Q^0 est la chaleur de réaction à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, définie par :

$$Q^0 = h_{f,F}^0 + \frac{\hat{\nu}_{O_x} W_{O_x}}{\hat{\nu}_F W_F} h_{f,O_x}^0 - \frac{\hat{\nu}_P W_P}{\hat{\nu}_F W_F} h_{f,P}^0$$

(3) Calcul de ρ^{n+1} :

$$\rho^{n+1} = \frac{P_0^0}{\mathcal{R}_u \left(\sum_{s=1}^{N_s} \frac{Y_s^{n+1}}{W_s} \right) T^{n+1}}$$

(4) Méthode de projection incrémentale :

(i) Advection-Diffusion du champ de vitesse (AD)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1} - \rho^n \vec{v}^n) + \nabla \cdot (\rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1^n \\ \quad = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left(\left(\nabla \tilde{\vec{v}}^{n+1} + \nabla \tilde{\vec{v}}^{n+1 \text{T}} \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\vec{v}}^{n+1}) \text{Id} \right) \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1} = (\rho \vec{v})_q ; \quad \text{éjection : } P_1^n = 0, \tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 \\ \text{symétrie : } \frac{\partial}{\partial \vec{n}} (\tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{t}) = 0, \tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{n} = 0. \end{array} \right.$$

(ii) estimation de la Pression dynamique et Correction du champ de vitesse (PC)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t}(\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} - \rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} (\nabla P_1^{n+1} - \nabla P_1^n) = 0 \\ \nabla \cdot (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1}) = \frac{-1}{\Delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n) \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{n} = \rho^{n+1} \tilde{\vec{v}}^{n+1} \cdot \vec{n} ; \text{ éjection : } P_1^{n+1} = 0, \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 \\ \text{symétrie : } \frac{\partial P_1^n}{\partial \vec{n}} = 0, \frac{\partial P_1^{n+1}}{\partial \vec{n}} = 0. \end{array} \right.$$

Comme pour l'algorithme précédent, nous notons plusieurs points importants :

- L'approximation des termes instationnaires pour l'équation de conservation de la fraction de mélange est réalisée par :

$$\frac{\rho^n}{\Delta t} (Z^{n+1} - Z^n) \approx \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z) \right)^{n+1}$$

Cette approximation est valable si l'écoulement possède une solution stationnaire. C'est le cas que nous traiterons pour une flamme de diffusion laminaire. Dans le cas de solutions instationnaires, une méthode de Picard (itération interne jusqu'à un critère de convergence) peut être mise en œuvre.

- Aucun calcul n'est effectué pour estimer la pression thermodynamique. En effet, nous supposons que le domaine de calcul est relié à l'atmosphère, ce qui conduit à une pression thermodynamique constante en temps et égale à la pression atmosphérique. Dans le cas d'un domaine de calcul fermé dont la masse incluse reste constante, la relation (III.34) est encore vraie et peut alors être utilisée pour calculer la pression thermodynamique.
- L'estimation des termes de flux convectifs est réalisée par un schéma explicite en temps. Nous devons alors vérifier une condition de stabilité de type CFL.

IV Discrétisation spatiale : méthode des volumes finis

Pour discrétiser les équations de bilan par une méthode de volumes finis sur un maillage décalé de type MAC, e.g. [27], on doit évaluer des intégrales volumiques discrètes des inconnues sur un volume de contrôle et des intégrales surfaciques discrètes des flux convectifs et diffusifs sur les faces.

IV.1 Intégration discrète

Le domaine de calcul Ω^0 est discrétisé en $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ volumes de contrôle $K_{i,j}$ pour $(i, j) \in [0; N_x] \times [0; N_y]$. Pour (i, j) donné, le volume de contrôle $K_{i,j}$ est centré autour du point (x_i, y_j) .

La frontière du volume de contrôle $K_{i,j}$ est notée $\partial K_{i,j}$ et est décomposée en quatre faces : $\mathcal{E}_{i,j}$ pour la frontière Est, $\mathcal{O}_{i,j}$ pour la frontière Ouest, $\mathcal{S}_{i,j}$ pour la frontière Sud et $\mathcal{N}_{i,j}$ pour la frontière Nord. Les milieux des faces Nord, Sud, Est et Ouest de $K_{i,j}$ sont notés respectivement $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$, $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$, $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$, $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$, de telle sorte que $K_{i,j} = [x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}; y_{j+\frac{1}{2}}]$. Notons $\vec{n}_{i,j}$ la normale extérieure définie sur la frontière $\partial K_{i,j}$.

Par définition, nous avons alors les relations suivantes pour tout $(i, j) \in \{1; N_x - 1\} \times \{1; N_y - 1\}$:

$$\mathcal{E}_{i,j} = \mathcal{O}_{i+1,j}, \mathcal{N}_{i,j} = \mathcal{S}_{i,j+1}, \mathcal{O}_{i,j} = \mathcal{E}_{i-1,j}, \mathcal{S}_{i,j} = \mathcal{N}_{i,j-1}.$$

Les inconnues $u_{i\pm\frac{1}{2},j}$ et $v_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ sont localisées aux points $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j)$ et $(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})$; nous les avons représentées sur la Figure 2.1.

Nous noterons par la suite $K_{i-\frac{1}{2},j} = [x_{i-1}; x_i] \times [y_{j-\frac{1}{2}}; y_{j+\frac{1}{2}}]$ les volumes de contrôle associés à la première composante u du champ de vitesse, et $K_{i,j-\frac{1}{2}} = [x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-1}; y_j]$ les volumes de contrôle associés à la seconde composante v du champ de vitesse pour tout couple $(i, j) \in \{1; N_x\} \times \{1; N_y\}$.

Dans cette étude, le domaine de calcul Ω^0 est discrétisé par une grille structurée uniforme de pas d'espace $\Delta x = \frac{1}{N_x}$ dans la direction (Ox) et $\Delta y = \frac{1}{N_y}$ dans la direction (Oy) . Par conséquent, on a $x_i = i\Delta x$ pour $i \in \{0; N_x\}$ et $y_j = j\Delta y$ pour $j \in \{0; N_y\}$.

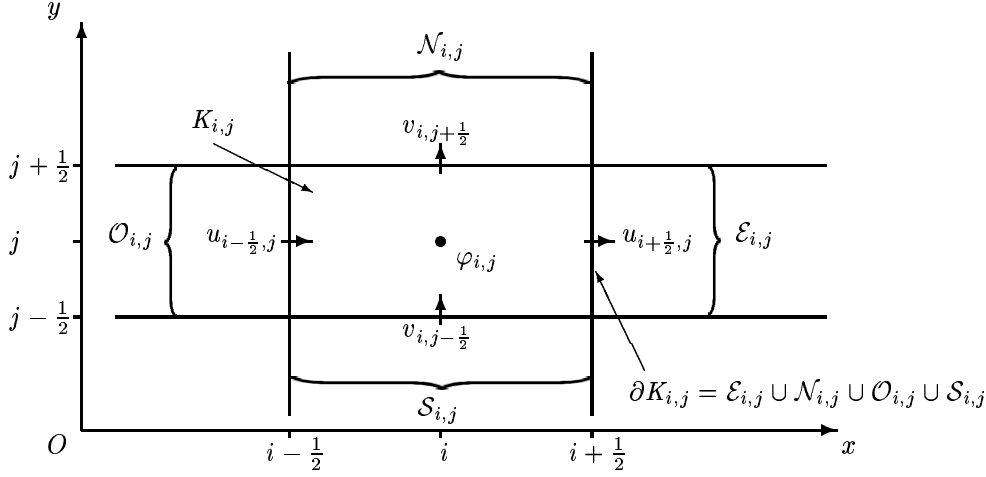


FIG. 2.1 – Localisation des inconnues $\varphi_{i,j}$, $u_{i\pm\frac{1}{2},j}$ et $v_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ aux points (x_i, y_j) , $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j)$ et $(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})$.

IV.1.1 Inconnues scalaires

Pour un couple (i, j) donné, on note alors $\varphi_{i,j}$ la valeur discrète d'un champ scalaire donné φ , connue au point (x_i, y_j) , centre du volume de contrôle $K_{i,j}$, et définie par l'équation (IV.36) suivante :

$$\varphi_{i,j} = \frac{1}{|K_{i,j}|} \int_{K_{i,j}} \varphi(\vec{x}, t) \quad (\text{IV.36})$$

Par conséquent, la formulation conservative de (I.3) intégrée sur un volume de contrôle $K_{i,j}$, $\forall (i, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}$, s'écrit :

$$\int_{K_{i,j}} \left(\frac{\rho^{n+1} \varphi^{n+1} - \rho^n \varphi^n}{\Delta t} \right) + \oint_{\partial K_{i,j}} \rho^n \varphi^n \vec{v}^n \cdot \vec{n} - \oint_{\partial K_{i,j}} \alpha_\varphi^{n+1} \nabla \varphi^{n+1} \cdot \vec{n} = \int_{K_{i,j}} S_\varphi^n$$

Ou encore avec (IV.36) :

$$\frac{|K_{i,j}|}{\Delta t} (\rho_{i,j}^{n+1} \varphi_{i,j}^{n+1} - \rho_{i,j}^n \varphi_{i,j}^n) + \oint_{\partial K_{i,j}} \rho^n \varphi^n \vec{v}^n \cdot \vec{n} - \oint_{\partial K_{i,j}} \alpha_\varphi^{n+1} \nabla \varphi^{n+1} \cdot \vec{n} = |K_{i,j}| (S_\varphi^n)_{i,j} \quad (\text{IV.37})$$

IV.1.2 Inconnues vectorielles

De la même façon que pour les champs scalaires, pour un couple $(i + \frac{1}{2}, j)$ donné, nous définissons $u_{i+\frac{1}{2},j}$ la valeur discrète de la première composante u du champ de vitesse, connue au point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$, centré autour du volume de contrôle $K_{i+\frac{1}{2},j}$ et donnée par (IV.38) :

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{|K_{i+\frac{1}{2},j}|} \int_{K_{i+\frac{1}{2},j}} u(\vec{x}, t) \quad (\text{IV.38})$$

Enfin, pour un couple $(i, j + \frac{1}{2})$ donné, la valeur discrète de la seconde composante v du champ de vitesse, connue au point $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$, centré autour du volume de contrôle $K_{i,j+\frac{1}{2}}$, est donnée par (IV.39) :

$$v_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{|K_{i,j+\frac{1}{2}}|} \int_{K_{i,j+\frac{1}{2}}} v(\vec{x}, t) \quad (\text{IV.39})$$

De ce fait, la formulation conservative de l'étape d'Advection-Diffusion du champ de vitesse (AD) intégrée sur un volume de contrôle K , s'écrit :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \int_K (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} - \rho^n \vec{v}^n) + \oint_{\partial K} (\rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n \cdot \vec{n}) + \frac{1}{\gamma} \int_K \nabla P_1^n \\ & = \oint_{\partial K} \left(\mu^{n+1} (\nabla \vec{v}^{n+1} + \nabla \vec{v}^{n+1T}) \cdot \vec{n} - \frac{2}{3} \mu^{n+1} (\nabla \cdot \vec{v}^{n+1}) \cdot \vec{n} \right) + \int_K (\rho^{n+1} - \rho_0^n) \vec{g} \end{aligned} \quad (\text{IV.40})$$

Avec la notation (IV.38), la formulation conservative de l'étape d'Advection-Diffusion (AD) de la première composante u du champ de vitesse intégrée sur un volume de contrôle $K_{i+\frac{1}{2},j}$ pour tout couple $(i + \frac{1}{2}, j)$ devient alors :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \int_{K_{i+\frac{1}{2},j}} (\rho^{n+1} \tilde{u}^{n+1} - \rho^n u^n) + \oint_{\partial K_{i+\frac{1}{2},j}} (\rho^n u^n \vec{v}^n \cdot \vec{n}) + \frac{1}{\gamma} \int_{K_{i+\frac{1}{2},j}} \frac{\partial P_1^n}{\partial x} \\ & = \oint_{\partial K_{i+\frac{1}{2},j}} \left(\mu^{n+1} (\nabla \tilde{v}^{n+1} + \nabla \tilde{v}^{n+1T}) \cdot \vec{n} - \frac{2}{3} \mu^{n+1} (\nabla \cdot \tilde{v}^{n+1}) \cdot \vec{n} \right) \end{aligned} \quad (\text{IV.41})$$

La notation (IV.39) donne la formulation conservative de l'étape d'Advection-Diffusion (AD) de la seconde composante v du champ de vitesse intégrée sur un volume de contrôle $K_{i,j+\frac{1}{2}}$ pour tout couple $(i, j + \frac{1}{2})$ sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \int_{K_{i,j+\frac{1}{2}}} (\rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} - \rho^n v^n) + \oint_{\partial K_{i,j+\frac{1}{2}}} (\rho^n v^n \vec{v}^n \cdot \vec{n}) + \frac{1}{\gamma} \int_{K_{i,j+\frac{1}{2}}} \frac{\partial P_1^n}{\partial y} \\ & = \oint_{\partial K_{i,j+\frac{1}{2}}} \left(\mu^{n+1} (\nabla \tilde{v}^{n+1} + \nabla \tilde{v}^{n+1T}) \cdot \vec{n} - \frac{2}{3} \mu^{n+1} (\nabla \cdot \tilde{v}^{n+1}) \cdot \vec{n} \right) + \int_{K_{i,j+\frac{1}{2}}} (\rho^{n+1} - \rho_0^n) \vec{g} \end{aligned} \quad (\text{IV.42})$$

IV.2 Estimation des flux diffusifs

L'estimation des flux diffusifs pour une équation de bilan scalaire ou l'équation de bilan de quantité de mouvement est effectuée par un schéma centré en espace.

Sous l'hypothèse d'un maillage de type Voronoï, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \forall i \in \{0; N_x - 1\}, \quad \Delta x &= x_{i+1} - x_i \text{ et } x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \\ \forall j \in \{0; N_y - 1\}, \quad \Delta y &= y_{j+1} - y_j \text{ et } y_{j+\frac{1}{2}} = \frac{y_{j+1} + y_j}{2} \end{aligned}$$

Alors l'approximation discrète des flux diffusifs par un schéma centré est une approximation d'ordre 2 en espace [29].

IV.2.1 Inconnues scalaires

Au regard de l'équation (IV.37), nous observons que l'évaluation des flux diffusifs requière la connaissance de :

$$\int_{K_{i,j}} \nabla \cdot (\alpha_\varphi^{n+1} \nabla \varphi^{n+1}) = \oint_{\partial K_{i,j}} \alpha_\varphi^{n+1} \nabla \varphi^{n+1} \cdot \vec{n}$$

Il s'agit donc d'estimer la quantité $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ aux points $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j)$ et la quantité $\frac{\partial \varphi}{\partial y}$ aux points $(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})$.

La semi-discrétisation temporelle est implicite pour les flux diffusifs et s'effectue par un schéma centré, e.g. [44]. Cela donne alors au point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ (voir Figure 2.2) :

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^{n+1}}{\Delta x}$$

avec $(\alpha_\varphi^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}$ défini par la moyenne suivante :

$$(\alpha_\varphi^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{(\alpha_\varphi^{n+1})_{i+1,j} + (\alpha_\varphi^{n+1})_{i,j}}{2}$$

Nous obtenons au point $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{\varphi_{i,j+1}^{n+1} - \varphi_{i,j}^{n+1}}{\Delta y}$$

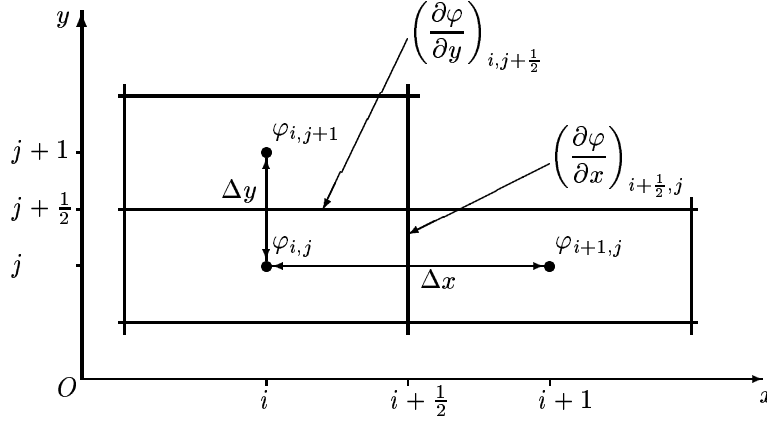


FIG. 2.2 – Exemple 2-D de mailles scalaires pour l'estimation des flux diffusifs $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ au point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ et $\frac{\partial \varphi}{\partial y}$ au point $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$.

avec $(\alpha_\varphi^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$ défini par la moyenne suivante :

$$(\alpha_\varphi^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{(\alpha_\varphi^{n+1})_{i,j+1} + (\alpha_\varphi^{n+1})_{i,j}}{2}$$

IV.2.2 Inconnues vectorielles

Considérant l'équation d'advection-diffusion pour le champ de vitesse (IV.40), les flux diffusifs s'écrivent :

$$\mathcal{F}_d(\vec{v}) = \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{Id} \right)$$

En développant les termes avec un champ de vitesse se notant $\vec{v} = (u, v)^T$, nous avons :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_d \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= \nabla \cdot \left[\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} - \frac{2}{3} \mu \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \right] \\ &= \nabla \cdot \left[\mu \begin{pmatrix} \frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{4}{3} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \end{pmatrix} \right] \end{aligned}$$

Pour la première composante u du champ de vitesse, nous notons $K_{i+\frac{1}{2},j}$ les volumes de contrôle pour $(i, j) \in \{0; N_x - 1\} \times \{0; N_y\}$. La frontière est notée $\partial K_{i+\frac{1}{2},j}$ et se décompose en quatre faces : Est $\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}$ de normale $\vec{n} = (1, 0)^T$, Ouest $\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}$ de normale $\vec{n} = (-1, 0)^T$, Sud $\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}$ de normale $\vec{n} = (0, -1)^T$ et Nord $\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}$ de normale $\vec{n} = (0, 1)^T$, de la façon suivante (voir Figure 2.3) :

$$\partial K_{i+\frac{1}{2},j} = \mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j} \cup \mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j} \cup \mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j} \cup \mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}$$

En intégrant le flux diffusif correspondant à la première composante sur le volume de contrôle $K_{i+\frac{1}{2},j}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_{K_{i+\frac{1}{2},j}} \mathcal{F}_d(u) &= \oint_{\partial K_{i+\frac{1}{2},j}} \mu \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \quad \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \cdot \vec{n} \\ &= \left[\oint_{\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}} -\mu \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \oint_{\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}} \mu \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right. \\ &\quad \left. + \oint_{\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}} -\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \oint_{\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}} \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \end{aligned}$$

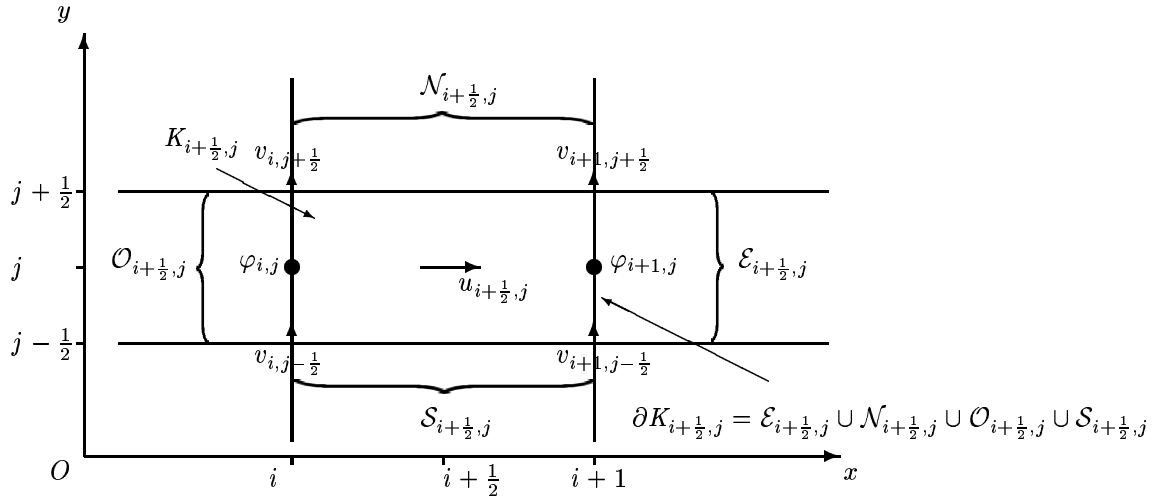


FIG. 2.3 – Volume de contrôle $K_{i+\frac{1}{2},j}$ associé à la première composante du champ de vitesse u de frontière $\partial K_{i+\frac{1}{2},j}$.

Nous détaillons les différentes intégrales sur les faces. Tout d'abord, pour la face Ouest $\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}$, nous avons :

$$\oint_{\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}} -\mu \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\bar{\mu}_{\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}} \left| \mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j} \right| \left[\frac{4}{3} \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} - \frac{2}{3} \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right]$$

où $\bar{\mu}_{\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}}$ est la valeur discrète de la viscosité μ définie sur la face Ouest $\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}$ par :

$$\bar{\mu}_{\mathcal{O}_{i+\frac{1}{2},j}} = \mu_{i,j}$$

La face Est $\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}$ donne :

$$\oint_{\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}} -\mu \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \bar{\mu}_{\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}} \left| \mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j} \right| \left[\frac{4}{3} \frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta x} - \frac{2}{3} \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i+1,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right]$$

où $\bar{\mu}_{\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}}$ est la valeur discrète de la viscosité μ définie sur la face Est $\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}$ par :

$$\bar{\mu}_{\mathcal{E}_{i+\frac{1}{2},j}} = \mu_{i+1,j}$$

Pour la face Sud $\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}$ nous obtenons :

$$\oint_{\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}} -\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\bar{\mu}_{\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}} \left| \mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j} \right| \left[\frac{v_{i+1,j-\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\Delta y} \right]$$

où $\bar{\mu}_{\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}}$ est la moyenne harmonique de la viscosité μ sur la face Sud $\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}$, définie par :

$$\bar{\mu}_{\mathcal{S}_{i+\frac{1}{2},j}} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\mu_{i,j}} + \frac{1}{\mu_{i+1,j}} + \frac{1}{\mu_{i,j-1}} + \frac{1}{\mu_{i+1,j-1}} \right)$$

Enfin, la face Nord $\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}$ donne :

$$\oint_{\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}} -\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \bar{\mu}_{\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}} \left| \mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j} \right| \left[\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta y} \right]$$

où $\bar{\mu}_{\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}}$ est la moyenne harmonique de la viscosité μ sur la face Nord $\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}$, définie par :

$$\bar{\mu}_{\mathcal{N}_{i+\frac{1}{2},j}} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\mu_{i,j+1}} + \frac{1}{\mu_{i+1,j+1}} + \frac{1}{\mu_{i,j}} + \frac{1}{\mu_{i+1,j}} \right)$$

L'estimation des flux diffusifs correspondant à la seconde composante v du champ de vitesse est réalisée d'une façon similaire. Nous ne la détaillerons pas.

IV.3 Estimation des flux convectifs

Dans de nombreux domaines de la mécanique des fluides numérique, qui traitent en particulier des transferts convectifs de masse et de chaleur, les schémas *upwind*, *hybrid* et *power-law* ont été largement et longuement utilisés. La popularité de ces méthodes pour le calcul d'états stationnaires provient de leur simplicité algorithmique, de leur rapide convergence et de leurs résultats numériques corrects. Toutefois, le schéma *upwind* (ou schéma décentré amont) est un schéma d'approximation d'ordre 1 en espace et crée de la diffusion numérique. L'introduction d'antidiffusion (ou viscosité artificielle) est requise pour améliorer la précision de ce schéma. D'autre part, les schémas *hybrid*, *power-law* ou *exponentiel* combinent la stratégie des méthodes du premier ordre d'approximation et celles du second ordre. Ces schémas sont souvent vus comme des méthodes d'approximation du premier ordre, à moins de clairement établir que la diffusion numérique qu'ils créent ne remplace pas d'importants termes de diffusion à modéliser.

D'un autre côté, les méthodes centrées du second ordre ont souvent des problèmes de convergence et peuvent conduire à des solutions non-physiques exhibant des oscillations numériques.

Par le passé, les méthodes d'ordre élevé (supérieur ou égal à trois) n'étaient pas populaires en raison de difficultés de convergence et de leur tendance à générer des sur-estimations (ou sous-estimations) non physiques près des transitions monotones mais raides.

Cependant, les récents développements dans ce domaine, utilisant des méthodes robustes de prédiction/correction des solutions et des techniques de limiteurs de pente (et flux) simples, ont éliminés toutes ces difficultés. Des solutions très précises, physiquement correctes peuvent alors être obtenues à un coût de calcul peu élevé.

Parmi les schémas de décentrement d'ordre élevé, le schéma QUICK [38] (décentrement amont du troisième ordre) est le plus utilisé. Ce schéma est stable, économique et très précis [40]. Par la suite, les techniques diffèrent suivant le limiteur de pente utilisé. Elles conduisent aux schémas ULTRA-SHARP [40], SMART [22], VONOS [54].

Nous avons choisi d'utiliser un schéma de décentrement d'ordre élevé, QUICK, avec une approximation à l'ordre 3 des conditions aux limites, comme proposé dans [28]. Nous utilisons par ailleurs le limiteur de pente ULTRA introduit par Leonard *et al.* [40]. Nous obtenons alors un schéma de décentrement qui préserve la positivité et la monotonicité, tel que l'a montré Huynh [30].

IV.3.1 Inconnues scalaires

L'évaluation des flux convectifs de la discrétisation spatiale d'une équation de bilan pour la quantité scalaire φ du type (IV.37) nécessite la connaissance de l'inconnue φ aux points $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j)$ et $(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})$ des faces du volume de contrôle $K_{i,j}$. D'après l'équation de bilan (IV.37), la discrétisation temporelle des termes convectifs d'une équation de bilan scalaire conduit à estimer la quantité $\nabla \cdot (\rho^n \varphi^n \vec{v}^n)$ sur un volume de contrôle scalaire $K_{i,j}$. Nous écrivons :

$$\begin{aligned} \int_{K_{i,j}} \nabla \cdot (\rho^n \varphi^n \vec{v}^n) &= \oint_{\partial K_{i,j}} \rho^n \varphi^n \vec{v}^n \cdot \vec{n} \\ &= |\mathcal{E}_{i,j}| (\rho^n \varphi^n)_{i+\frac{1}{2},j} u_{i+\frac{1}{2},j} + |\mathcal{O}_{i,j}| (\rho^n \varphi^n)_{i-\frac{1}{2},j} u_{i-\frac{1}{2},j} \\ &\quad + |\mathcal{S}_{i,j}| (\rho^n \varphi^n)_{i,j-\frac{1}{2}} v_{i,j-\frac{1}{2}} + |\mathcal{N}_{i,j}| (\rho^n \varphi^n)_{i,j+\frac{1}{2}} v_{i,j+\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Puisque nous cherchons une approximation d'ordre 3 en espace, nous avons besoin, pour estimer les quantités $(\rho^n \varphi^n)$ aux faces, des mailles scalaires d'un stencil de quatre mailles.

Nous considérons deux cas. Le premier cas apparaît lorsque le stencil de mailles est strictement à l'intérieur du domaine de calcul, c'est-à-dire qu'aucune des mailles formant le stencil n'est une maille frontière du domaine de calcul, tel que le représente la Figure 2.4.

Par exemple sur la face $\mathcal{E}_{i,j}$, la quantité $(\rho^n \varphi^n)_{i+\frac{1}{2},j}$ est alors évaluée comme (voir Figure 2.4) :

$$(\rho^n \varphi^n)_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} (\rho^n \varphi^n)_{i,j} + \frac{1}{8} \left(3(\rho^n \varphi^n)_{i+1,j} - 2(\rho^n \varphi^n)_{i,j} - (\rho^n \varphi^n)_{i-1,j} \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j} > 0, \\ (\rho^n \varphi^n)_{i+1,j} + \frac{1}{8} \left(3(\rho^n \varphi^n)_{i,j} - 2(\rho^n \varphi^n)_{i+1,j} - (\rho^n \varphi^n)_{i+2,j} \right) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le second cas concerne un stencil dont une des mailles est maille frontière du domaine de calcul comme l'indique la Figure 2.5.

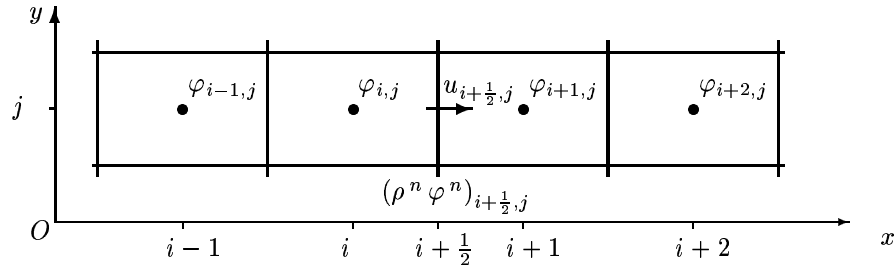


FIG. 2.4 – Exemple 2-D d'un stencil de mailles scalaires pour l'estimation de la quantité $(\rho^n \varphi^n)_{i+\frac{1}{2},j}$ au point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$.

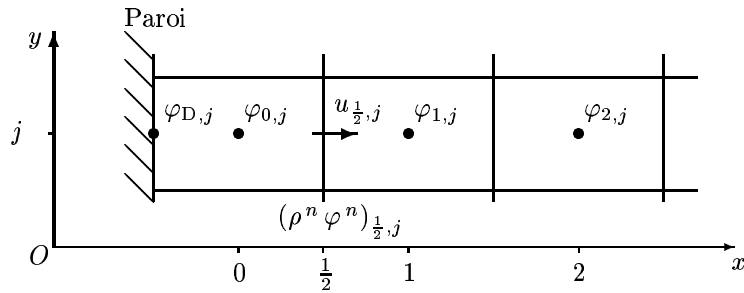


FIG. 2.5 – Exemple 2-D d'un stencil de mailles scalaires pour l'estimation de la quantité $(\rho^n \varphi^n)_{\frac{1}{2},j}$ au point $(x_{\frac{1}{2}}, y_j)$.

Dans ce cas, l'estimation de la quantité $\rho^n \varphi^n$ au point $(x_{\frac{1}{2}}, y_j)$ s'écrit :

$$(\rho^n \varphi^n)_{\frac{1}{2},j} = \begin{cases} (\rho^n \varphi^n)_{0,j} + \frac{1}{3} \left((\rho^n \varphi^n)_{1,j} - (\rho^n \varphi^n)_{D,j} \right) & \text{si } u_{\frac{1}{2},j} > 0, \\ (\rho^n \varphi^n)_{1,j} + \frac{1}{8} \left(3(\rho^n \varphi^n)_{0,j} - 2(\rho^n \varphi^n)_{1,j} - (\rho^n \varphi^n)_{2,j} \right) & \text{sinon} \end{cases}$$

IV.3.2 Inconnues vectorielles

De la même façon, l'estimation des flux convectifs de la discrétisation spatiale de l'équation de bilan de quantité de mouvement pour la quantité vectorielle $\vec{v} = (u, v)^T$ nécessite la connaissance de l'inconnue u aux points (x_i, y_j) , (x_{i+1}, y_j) , $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}})$ et $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}})$ et de l'inconnue v aux points $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}})$, $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}})$, (x_i, y_{j-1}) et (x_i, y_j) .

Dans le cas d'une inconnue vectorielle, *i.e.* du champ de vitesse \vec{v} , nous devons estimer les quantités :

$$\int_K \nabla \cdot (\rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n) = \oint_{\partial K} \rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n \cdot \vec{n}$$

pour les volumes de contrôle $K_{i+\frac{1}{2},j}$ pour $(i, j) \in \{0; N_x - 1\} \times \{0; N_y\}$ si nous résolvons la première composante u du champ de vitesse, et les volumes de contrôle $K_{i,j+\frac{1}{2}}$ pour $(i, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y - 1\}$ si nous résolvons la seconde composante v du champ de vitesse.

A nouveau, deux cas sont à envisager. Le premier cas concerne un stencil d'interpolation dont toutes les mailles décalées sont strictement à l'intérieur du domaine de calcul, tel que le montre la Figure 2.6. Nous n'envisageons que la première composante du champ de vitesse puisque le traitement pour la seconde composante est naturellement identifiable.

Pour la première composante du champ de vitesse, nous devons calculer deux types de flux. Le premier s'écrit sous la forme $(\rho^n u^n) u^n$ où la quantité u^n au point (x_{i+1}, y_j) pour tout couple $(i, j) \in \{0; N_x - 1\} \times \{0; N_y\}$ est évaluée comme :

$$u_{i+1,j}^n = \frac{u_{i+\frac{3}{2},j}^n + u_{i+\frac{1}{2},j}^n}{2}$$

Le second flux se met sous la forme $(\rho^n u^n) v^n$. Dans ce cas, la quantité v^n au point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}})$

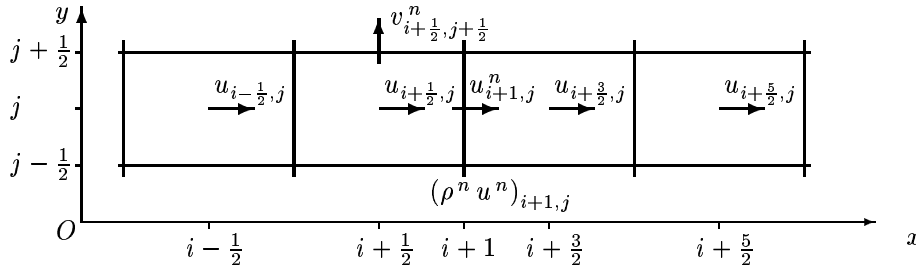


FIG. 2.6 – Exemple 2-D d'un stencil de mailles décalés pour l'estimation de la quantité $(\rho^n u^n)_{i+1,j}$ au point (x_{i+1}, y_j) .

pour tout couple $(i, j) \in \{0; N_x - 1\} \times \{0; N_y - 1\}$ s'estime par :

$$v_{i+1/2,j+1/2}^n = \frac{v_{i+1,j}^n + v_{i,j}^n}{2}$$

Pour le premier type de flux, la quantité $(\rho^n u^n)_{i+1,j}$ est alors évaluée comme (voir Figure 2.6) :

$$(\rho^n u^n)_{i+1,j} = \begin{cases} (\rho^n u^n)_{i+1/2,j} + \frac{1}{8} \left(3(\rho^n u^n)_{i+3/2,j} - 2(\rho^n u^n)_{i+1/2,j} - (\rho^n u^n)_{i-1/2,j} \right) & \text{si } u_{i+1,j}^n > 0, \\ (\rho^n u^n)_{i+3/2,j} + \frac{1}{8} \left(3(\rho^n u^n)_{i+1/2,j} - 2(\rho^n u^n)_{i+3/2,j} - (\rho^n u^n)_{i+5/2,j} \right) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Par ailleurs, les quantités ρ^n aux interfaces sont évaluées, par exemple pour $\rho_{i+1/2,j}^n$, comme :

$$\rho_{i+1/2,j}^n = \frac{\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n}{2}$$

L'autre type de flux convectif pour la première composante du champ de vitesse s'estime de la même façon.

Le second cas concerne un stencil de mailles décalées où une maille décalée est frontière du domaine de calcul. Dans cette situation, il y a deux possibilités suivant que la composante du champ de vitesse considérée est parallèle ou perpendiculaire à la paroi.

Si la seconde composante du champ de vitesse, par exemple, est parallèle à la paroi, alors nous nous retrouvons dans un cas similaire à celui présenté sur la Figure 2.5 pour les quantités scalaires. Dans ce cas, selon la Figure 2.7, nous écrivons :

$$(\rho^n v^n)_{\frac{1}{2},j} = \begin{cases} (\rho^n v^n)_{0,j} + \frac{1}{3} \left((\rho^n v^n)_{1,j} - (\rho^n v^n)_{D,j} \right) & \text{si } u_{\frac{1}{2},j} > 0, \\ (\rho^n v^n)_{1,j} + \frac{1}{8} \left(3(\rho^n v^n)_{0,j} - 2(\rho^n v^n)_{1,j} - (\rho^n v^n)_{2,j} \right) & \text{sinon} \end{cases}$$

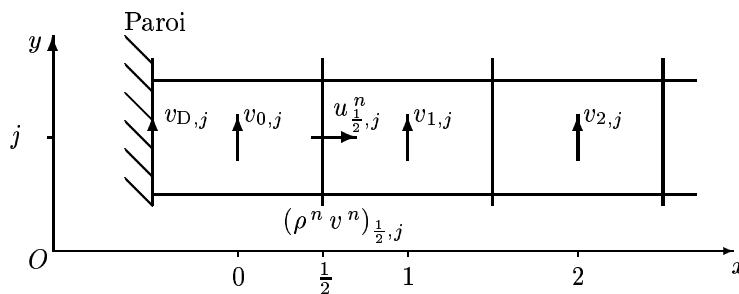


FIG. 2.7 – Exemple 2-D d'un stencil de mailles décalées pour l'estimation de la quantité $(\rho^n v^n)_{\frac{1}{2},j}$ au point $(x_{\frac{1}{2}}, y_j)$.

Si au contraire, la première composante du champ de vitesse, par exemple, est perpendiculaire à la paroi, alors à l'aide de la Figure 2.8, nous sommes en mesure d'écrire :

$$(\rho^n u^n)_{0,j} = \begin{cases} (\rho^n u^n)_{D,j} + \frac{1}{8} \left(-5 (\rho^n u^n)_{D,j} + 6 (\rho^n u^n)_{\frac{1}{2},j} - (\rho^n u^n)_{\frac{3}{2},j} \right) & \text{si } u_{0,j}^n > 0, \\ (\rho^n u^n)_{\frac{1}{2},j} + \frac{1}{8} \left(3 (\rho^n u^n)_{D,j} - 2 (\rho^n u^n)_{\frac{1}{2},j} - (\rho^n u^n)_{\frac{3}{2},j} \right) & \text{sinon} \end{cases}$$

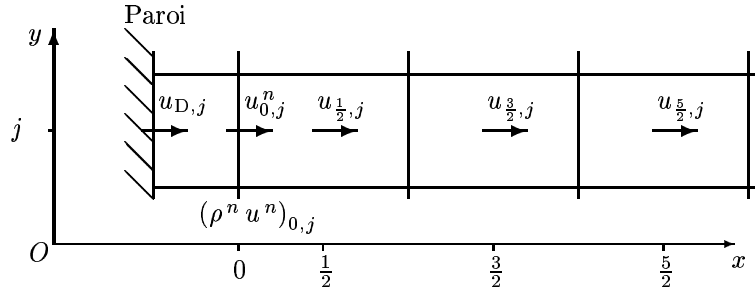


FIG. 2.8 – Exemple 2-D d'un stencil de mailles décalées pour l'estimation de la quantité $(\rho^n u^n)_{0,j}$ au point (x_0, y_j) .

IV.3.3 Limiteur de pente ULTRA

Les schémas de décentrement d'ordre peu élevé, *i.e.* d'ordre 1 comme le décentrement amont, donnent des résultats corrects mais créent de la dissipation numérique ; tandis que les schémas de décentrement d'ordre élevé souffrent de la création d'oscillations, c'est la dispersion numérique, et parfois de problèmes de convergence [25, 39, 40]. Pour s'affranchir de ces oscillations non-physiques dans notre schéma de décentrement d'ordre élevé, nous introduisons un limiteur de pente, ULTRA [40], dont l'objectif est de garantir qu'à l'état stationnaire d'une formulation volumes finis, la valeur de la quantité convectée, initialement estimée par une approximation d'ordre élevé, appartient à un intervalle de limites donnés. C'est réalisable par exemple en réduisant l'ordre d'approximation d'une quantité au voisinage des grandes variations de cette quantité. Le limiteur de pente ULTRA préserve par ailleurs la positivité et la monotonie du schéma numérique [30].

La stratégie ULTRA se détaille de façon simple à l'aide de la fonction median introduite par Huynh [30]. La fonction median de trois nombres a , b et c sélectionne le nombre qui se trouve entre les deux autres. Elle s'écrit :

$$\text{median}(a, b, c) = a + \min(\text{mod}(b - a, c - a))$$

où la fonction minmod des deux nombres a et b est :

$$\text{minmod}(a, b) = \begin{cases} \text{sgn}(a) \min(|a|, |b|) & \text{si } ab > 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Par exemple pour le cas scalaire où l'on veut évaluer la quantité $\varphi_{i+\frac{1}{2},j}$ avec l'hypothèse $u_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0$, nous partons des quantités suivantes :

$$f_1 = \varphi_{i,j}$$

$$f_2 = \varphi_{i+1,j}$$

Nous construisons une quantité f_3 , approximation de la quantité $\varphi_{i+1,j}$, par :

$$f_3 = \varphi_{i-1,j} + C(\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j})$$

avec C une constante telle que $C = O(10)$ pour conserver une grande précision. On note que les schémas TVD utilisent une pente $C = 2$ pour cette contrainte, ce qui introduit une imprécision pour les profils raides.

Puis, nous évaluons la quantité f_4 telle que :

$$f_4 = \text{median}(f_1, f_2, f_3)$$

Enfin, connaissant l'approximation d'ordre élevé, notée $f^{\text{O.E.}}$, la quantité f effectivement utilisée se calcule telle que :

$$f = \text{median} (f_1, f_4, f^{\text{O.E.}})$$

Cette procédure de limiteur de pente conduit à une convergence très rapide, et donne des résultats précis et non-oscillants, comme l'a montré Leonard [39].

IV.4 Résolution des systèmes linéaires

IV.4.1 Description des méthodes

La discrétisation spatio-temporelle des équations de bilan scalaires et vectorielle proposée conduit à des systèmes algébriques linéaires. Ils sont de la forme :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{b} \quad (\text{IV.43})$$

avec :

- $\mathbf{A} \in \mathcal{M}_n(\mathcal{V})$ une matrice creuse, non symétrique et parfois singulière (par exemple, dans le cas d'un problème de Poisson avec des conditions aux limites de type Neumann homogène que nous détaillons au paragraphe suivant) avec \mathcal{V} un espace vectoriel (par exemple \mathbb{R}^n),
- $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ le vecteur solution cherché,
- $\mathbf{b} \in \mathcal{V}$ le second membre incluant les termes sources et les conditions aux limites.

Chercher la solution \mathbf{v} revient donc à inverser la matrice \mathbf{A} , tel que :

$$\mathbf{v} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$$

Plusieurs méthodes permettent de résoudre ce problème. Elles sont classées en deux types :

- les méthodes directes, basées sur un nombre fini d'opérations arithmétiques, conduisant à la solution exacte du système algébrique.
- les méthodes itératives, basées sur une succession de solutions approximées, conduisant à la solution exacte du système algébrique après un nombre infini d'opérations.

Pour nos applications, nous avons choisi les méthodes de descente ou méthodes de Krylov et en particulier la méthode de Gradient conjugué et la méthode GMRES (Generalized Minimum RESidual), toutes deux définies par Saad dans [47].

L'idée de base de ce groupe de méthodes itératives est le suivant. A chaque itération d'une méthode de descente, nous déterminons un vecteur \mathbf{p}_k et un scalaire α_k tels que la solution $\mathbf{v}^{(k+1)}$ soit estimée par :

$$\mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{v}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}_k$$

et telle qu'elle minimise une fonctionnelle (à définir). Le critère d'arrêt de la méthode de Gradient conjugué est le critère standard [47] et doit être inférieur à un epsilon fixé à $\epsilon = 10^{-8}$. Ceci nous assure qu'à l'itération k de la méthode itérative, la solution $\mathbf{v}^{(k)}$ vérifie :

$$\left\| \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}^{(k)} - \mathbf{b} \right\|_{\infty} < \epsilon$$

Dans le cas d'une matrice \mathbf{A} symétrique définie positive, il existe un résultat de convergence pour la méthode de Gradient Conjugué et pour la méthode GMRES, qui dépend du conditionnement de la matrice \mathbf{A} [47].

Toutefois, les matrices obtenues par les techniques de discrétisation sont souvent non symétriques, et mal conditionnées. De ce fait, les méthodes de descente souffrent de convergence lente. Les techniques de préconditionnement sont la clé essentielle pour l'amélioration des méthodes de Krylov. Le préconditionnement est un moyen de transformer le système algébrique original en un autre qui possède la même solution, mais qui est plus facile à résoudre avec une méthode itérative.

Nous avons choisi la méthode MILU(0) comme méthode de préconditionnement. De manière générale, une factorisation incomplète LU calcule une matrice triangulaire inférieure creuse \mathbf{L} et une matrice triangulaire supérieure creuse \mathbf{U} telles que la matrice résidu $\mathbf{R} = \mathbf{L} \mathbf{U} - \mathbf{A}$ satisfasse certaines contraintes, comme posséder des coefficients nuls à certains endroits. Ce préconditionneur est basé sur la variante IKJ d'élimination de Gauss [47]. Le chiffre 0 représente la technique de remplissage. Enfin, la lettre M signifie Modified, et consiste en une compensation diagonale des termes qui ont été écartés lors de la construction des matrices \mathbf{L} et \mathbf{U} (étapes 2, 7, 10 de l'algorithme suivant).

Pour une matrice $\mathbf{A} = (a_{i,j})$ pour $1 \leq i, j \leq n$, l'algorithme de factorisation MILU(0) s'écrit :

Algorithme IV.1 : Factorisation MILU(0)

```

1 Pour  $i = 1$  à  $n$ 
2     termes_écartés = 0.
3     Pour  $k = 1$  à  $i - 1$ 
4          $a_{i,k} = a_{i,k} / a_{k,k}$ 
5     Pour  $j = k + 1$  à  $n$ 
6         Si  $a_{i,j} \neq 0$  Alors  $a_{i,j} = a_{i,j} - a_{i,k} * a_{k,j}$ 
7         Sinon termes_écartés =  $-a_{i,k} * a_{k,j}$ 
8     Fin de boucle
9 Fin de boucle
10  $a_{i,i} = a_{i,i} - \text{termes\_écartés}$ 
11 Fin de boucle

```

IV.4.2 Remarques sur le problème de Poisson pour la pression dynamique

Rappelons que la méthode de projection, définie au paragraphe II, donne à résoudre un problème de Poisson pour la pression dynamique. Il s'écrit sous la forme continue :

Trouver P_1 de $\Omega \times [0; T]$ dans \mathbb{R} tel que :

$$\nabla^2 P_1 = f \quad (\text{IV.44})$$

Deux types de conditions aux limites sont concernées :

- une condition aux limites de type Dirichlet : la pression dynamique P_1 est imposée à une valeur donnée sur une partie ou toute la frontière du domaine de calcul ;
- une condition aux limites de type Neumann homogène : le gradient de pression dynamique perpendiculairement à la paroi est supposé nul, *i.e.* $\nabla P_1 \cdot \vec{n} = 0$ sur une partie ou toute la frontière du domaine de calcul.

Dans le cas où une condition de type Dirichlet est imposée, aucun problème particulier n'apparaît pour la résolution du problème de Poisson. Nous ne détaillerons que le cas d'une condition de type Neumann homogène imposée sur toute la frontière du domaine de calcul.

En effet, dans ce cas, il existe une relation de compatibilité (ou solvabilité) entre le terme source f du problème et les conditions aux limites de type Neumann homogène. En intégrant l'équation (IV.44) sur tout le domaine de calcul Ω , nous obtenons cette relation de compatibilité :

$$\int_{\Omega} f = \oint_{\partial\Omega} \nabla P_1 \cdot \vec{n} = 0$$

En discrétisant le problème de Poisson (IV.44) par une méthode de volumes finis sur maillage MAC, nous obtenons le problème discret suivant :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{b} \quad (\text{IV.45})$$

où $\mathbf{A} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ et $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ si n est le nombre de degrés de liberté.

De plus, la matrice \mathbf{A} est singulière dans le sens où $\forall \alpha \in \mathbb{R}$, $\mathbf{1} = (1) \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u} = \alpha \mathbf{1} \in \mathbb{R}^n$ est vecteur propre de la matrice \mathbf{A} , associé à la valeur propre $\lambda = 0$.

Par conséquent, le problème discret (IV.45) admet une solution s'il vérifie une relation de compatibilité discrète de la forme :

$$\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{b} = 0$$

où \mathbf{w} est le vecteur propre de la matrice \mathbf{A}^T , associé à la valeur propre $\lambda = 0$. C'est la discrétisation de la relation de compatibilité continue. On note que si la matrice \mathbf{A} n'est pas symétrique, alors $\mathbf{u} \neq \mathbf{w}$.

Numériquement, les erreurs de discrétisation n'assurent pas la condition de compatibilité discrète. Dans ce cas, le problème discret n'a pas de solution.

Pour pallier ces difficultés, une solution a été proposée par Briley [13]. Elle consiste à remplacer le problème discret initial (IV.45) par le problème perturbé suivant :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{b} - \epsilon \mathbf{c} \quad (\text{IV.46})$$

avec \mathbf{c} un vecteur arbitraire de \mathbb{R}^n tel que $\mathbf{c}^T \cdot \mathbf{c} = 1$ et où ϵ est ajusté tel que la relation de compatibilité discrète soit satisfaite, *i.e.*

$$\mathbf{w}^T \cdot (\mathbf{b} - \epsilon \mathbf{c}) = 0. \quad (\text{IV.47})$$

D'après Pozridikis [46], cette technique est la moins coûteuse en temps de calcul et donne des résultats équivalents à la perturbation optimale, *i.e.* la perturbation minimale du problème discret (IV.45) où le second membre est projeté sur l'orthogonal du complément de l'adjoint du vecteur propre \mathbf{w} . Cette perturbation assure que le problème discret vérifie la relation de compatibilité discrète par construction. En d'autres termes, cela revient à résoudre :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} = (\mathbf{Id} - \mathbf{w}\mathbf{w}^T) \cdot \mathbf{b}$$

Notons que la perturbation proposée par Briley se met sous la forme optimale en prenant $\mathbf{c} = \mathbf{w}$ et $\epsilon = \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{b}$.

Pour nos applications, nous avons utilisé la régularisation proposée par Briley. La matrice \mathbf{A} issue de la discrétisation du problème (IV.44) par une méthode de volumes finis de type MAC est symétrique, $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$.

De ce fait, le vecteur propre \mathbf{w} associé à la valeur propre $\lambda = 0$ s'écrit alors :

$$\mathbf{w} = \alpha \mathbb{1}, \text{ avec } \alpha \in \mathbb{R}, \mathbb{1} = (1) \in \mathbb{R}^n$$

Pour vérifier la relation de compatibilité discrète (IV.47), il suffit alors de choisir un vecteur \mathbf{c} tel que :

$$\mathbf{c} = \left(\frac{1}{n}\right) \in \mathbb{R}^n$$

où n est le nombre de degrés de liberté. Ce vecteur est colinéaire au vecteur \mathbf{w} et satisfait naturellement l'égalité $\sum_{i=1}^n \mathbf{c}_i = 1$.

Le paramètre ϵ est estimé par la relation suivante :

$$\epsilon = \sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i$$

Nous vérifions alors que :

$$\mathbf{w}^T \cdot (\mathbf{b} - \epsilon \mathbf{c}) = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}^T \cdot \left[\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} - \sum_{i=1}^n b_i \begin{pmatrix} \frac{1}{n} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \end{pmatrix} \right] = \sum_{i=1}^n b_i - \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n b_i = 0$$

Nous savons que $\text{Im}(\mathbf{A}) = (\text{Ker}(\mathbf{A}^T))^{\perp} = (\text{Ker}(\mathbf{A}))^{\perp}$, ce qui signifie que $\mathbf{w} \perp \text{Im}(\mathbf{A})$. Par ailleurs, le vecteur \mathbf{c} est colinéaire à \mathbf{w} . La relation $\mathbf{b} - \epsilon \mathbf{c}$ traduit simplement la projection orthogonale du second membre \mathbf{b} sur l'image $\text{Im}(\mathbf{A})$ de la matrice \mathbf{A} .

Chapitre 3

Méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux

Dans ce chapitre, une méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux est décrite dans le cadre de la modélisation des écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse et à faible nombre de Mach. Cette méthode est la méthode de correction de flux à l'interface (FIC) initialement développée par Angot *et al.* [2, 31]. Ici, nous présentons son application aux écoulements réactifs. Dans un premier temps, nous définissons le principe de la méthode pour deux niveaux de grilles. Le paragraphe I.1 formalise les notations utilisées. Les opérateurs de grilles spécialement développés pour l'application qui nous intéresse sont détaillés au paragraphe I.2. Le paragraphe I.3 décrit l'algorithme de la méthode de raffinement local pour deux niveaux.

Dans un second temps, nous définissons au paragraphe II.1 les notations pour le cas multi-niveaux (paragraphe II.1) puis décrivons l'algorithme correspondant au paragraphe II.2.

I Méthode FIC pour deux niveaux de grilles

I.1 Notations pour deux niveaux de grilles

Domaines. Nous définissons une suite de domaines emboîtés Ω^l , $0 \leq l \leq 1$ de frontière $\Gamma^l = \partial\Omega^l$ et d'adhérence $\bar{\Omega}^l = \Omega^l \cup \Gamma^l$.

Notons $\Gamma^{0,1}$ l'interface entre les deux sous-espaces consécutifs Ω^0 et Ω^1 .

On a les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\Omega^0 &= \Omega, \quad \Gamma^0 = \Gamma; \\ \bar{\Omega}^1 &\subset \bar{\Omega}^0 := \bar{\Omega}; \\ \Gamma^{0,1} &= \Gamma^1 \setminus (\Gamma^1 \cap \Gamma) \neq \emptyset.\end{aligned}$$

Grille "initiale" Soit G_0 la grille associée au domaine de calcul initial.

Un des avantages majeurs des méthodes de raffinement multi-niveaux réside dans la possibilité d'utiliser des maillages structurés uniformes, en profitant ainsi des propriétés de superconvergence associées à ce cas particulier géométrique. En conséquence, nous ne manipulerons ici que des grilles uniformes. Soit $\Delta x_0 = 1/N_x$ et $\Delta y_0 = 1/N_y$ les pas d'espaces dans les directions respectivement (Ox) et (Oy) de la grille G_0 . Nous notons alors :

$$\begin{aligned}x_i &= i\Delta x_0, \quad \forall i \in \{0; N_x\} \\ y_j &= j\Delta y_0, \quad \forall j \in \{0; N_y\} \\ x_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{x_{i+1} + x_i}{2}\end{aligned}$$

G_0 définit $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ volumes de contrôle $K_{i,j}$ pour $(i, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}$, qui constituent une partition du domaine de calcul $\bar{\Omega}$:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{(i,j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}} K_{i,j}.$$

Le volume de contrôle $K_{i,j}$ est centré autour du point (x_i, y_j) . La frontière du volume de contrôle $K_{i,j}$ est notée $\partial K_{i,j}$ et est décomposée en quatre faces : $\mathcal{E}_{i,j}$ pour la frontière Est, $\mathcal{O}_{i,j}$ pour la frontière Ouest, $\mathcal{S}_{i,j}$ pour la frontière Sud et $\mathcal{N}_{i,j}$ pour la frontière Nord :

$$\partial K_{i,j} = \mathcal{E}_{i,j} \cup \mathcal{N}_{i,j} \cup \mathcal{O}_{i,j} \cup \mathcal{S}_{i,j}$$

Les milieux des faces Nord, Sud, Est et Ouest sont les points $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$, $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$, $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$, $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$. $K_{i,j}$ est donné par :

$$K_{i,j} = [x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{i-\frac{1}{2}}; y_{i+\frac{1}{2}}].$$

Grille "raffinée" La grille G_0 sera dénommée dans la suite "grille grossière" et les volumes de contrôle qu'elle délimite seront appelés "volumes de contrôle grossiers".

Les "volumes de contrôle fins" associés à la "grille fine" G^1 sont construits en partitionnant chaque volume de contrôle grossier de la zone de raffinement en $r \times r$ rectangles identiques ; l'entier r est appelé le rapport de raffinement.

On a la relation suivante, liant le rapport de raffinement aux pas d'espaces des grille G_0 et G_1 :

$$r = \frac{\Delta x_0}{\Delta x_1} = \frac{\Delta y_0}{\Delta y_1} \in \mathbb{N}^*$$

où Δx_1 et Δy_1 désignent les pas d'espace dans chacune des directions associées à la grille fine.

Nous choisissons un rapport de raffinement $r = 3$ comme représenté sur la Figure 3.1, ce choix nous permettant de définir une inconnue fine au même point qu'une inconnue grossière. Les volumes de contrôle fins, définis à l'intérieur du volume de contrôle grossier $K_{i,j}$, sont alors notés :

$$K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}, \quad \forall (\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1; 0; 1\} \times \{-1; 0; 1\}$$

Le volume de contrôle fin $K_{i,j}^{0,0}$ est centré autour du point (x_i, y_j) définissant le volume de contrôle grossier $K_{i,j}$.

La frontière du volume de contrôle fin $K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ est notée $\partial K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$, pour tout $(\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1; 0; 1\} \times \{-1; 0; 1\}$.

Cette frontière $\partial K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ est elle-même décomposée en quatre : $\mathcal{E}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ pour la frontière Est, $\mathcal{O}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ pour la frontière Ouest, $\mathcal{S}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ pour la frontière Sud et $\mathcal{N}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ pour la frontière Nord.

Par définition, nous avons alors les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}} &= \mathcal{O}_{i,j}^{\bar{i}+1,\bar{j}}, \quad \forall \bar{i} \in \{-1; 0\}, \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0; 1\} \\ \mathcal{N}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}} &= \mathcal{S}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}+1}, \quad \forall \bar{i} \in \{-1; 0; 1\}, \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0\} \\ \mathcal{O}_{i,j}^{-1,\bar{j}} &= \mathcal{E}_{i-1,j}^{1,\bar{j}}, \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0; 1\} \\ \mathcal{N}_{i,j}^{\bar{i},1} &= \mathcal{S}_{i,j+1}^{\bar{i},-1}, \quad \forall \bar{i} \in \{-1; 0; 1\} \end{aligned}$$

Notons $\vec{n}_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ la normale extérieure à la frontière $\partial K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ du volume de contrôle fin $K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$.

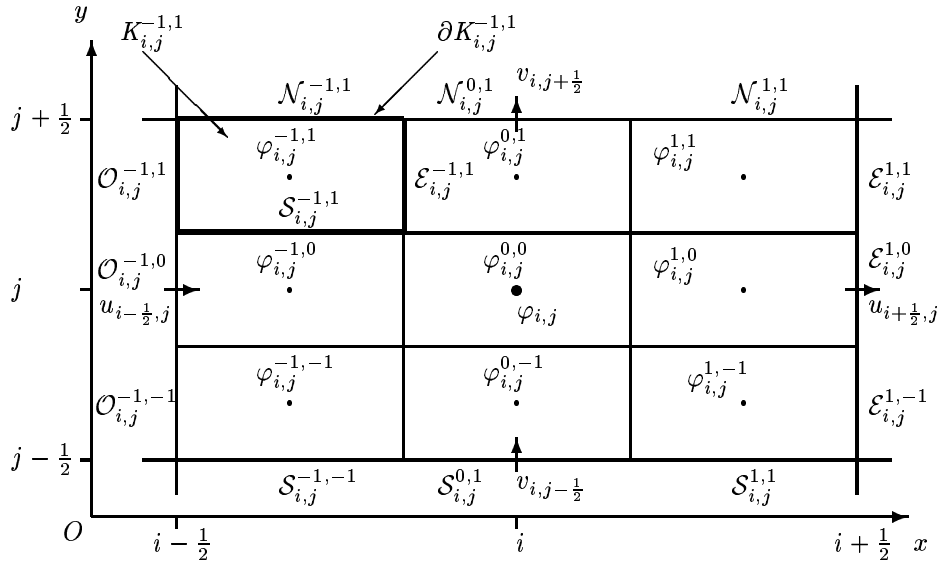


FIG. 3.1 – Exemple 2-D de maille raffinée avec un rapport de raffinement $r_0 = 3$.

Inconnues discrètes En ce qui concerne la grille grossière, les inconnues scalaires situées au point (x_i, y_j) sont notées $\varphi_{i,j}$; l'inconnue du champ de vitesse localisée au point $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j)$ (respectivement $(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})$) est notée $u_{i\pm\frac{1}{2},j}$ (respectivement $v_{i,j\pm\frac{1}{2}}$) (cf. Figure 2.1 du paragraphe IV).

Les inconnues scalaires définies sur les volumes de contrôles fins $K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ sont notées $\varphi_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}$ pour un point (x_i, y_j) appartenant à la grille G_1 de la zone de raffinement du domaine de calcul, *i.e.* pour un point $(x_i, y_j) \in G_0 \cap G_1$.

De façon similaire, la première composante u (resp. v) du champ de vitesse est notée $u_{i\pm\frac{1}{2},j}^{\bar{i},\bar{j}}$ (resp. $v_{i,j\pm\frac{1}{2}}^{\bar{i},\bar{j}}$) sur les volumes de contrôle $K_{i\pm\frac{1}{2},j}^{\bar{i},\bar{j}}$ (resp. $K_{i,j\pm\frac{1}{2}}^{\bar{i},\bar{j}}$) définis à l'intérieur du volume de contrôle

grossier $K_{i\pm\frac{1}{2},j}$ (resp. $K_{i,j\pm\frac{1}{2}}$) pour un point $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j)$ (resp. $(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})$) appartenant à la grille G_1 de la zone de raffinement du domaine de calcul.

Nous choisissons de noter $\varphi_{i,j}^{\bar{J}}$ (resp. $\varphi_{i,j}^{\bar{I}}$) les conditions aux limites de l'inconnue scalaire φ situées sur une frontière Sud $S_{i,j}^{\bar{J}}$ ou Nord $N_{i,j}^{\bar{I}}$ (resp. sur une frontière Est $E_{i,j}^{\bar{J}}$ ou Ouest $O_{i,j}^{\bar{I}}$). Cette notation est aussi valable pour les conditions aux limites portant sur le champ de vitesse.

Normes discrètes pour la grille grossière G_0 . Nous utiliserons par la suite les normes discrètes suivantes :

$$\begin{aligned} \|\varphi_0\|_{L^\infty} &= \max_{1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y} |\varphi_{i,j}| \\ \|u_0\|_{L^\infty} &= \max_{0 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y} |u_{i+\frac{1}{2},j}| \\ \|v_0\|_{L^\infty} &= \max_{1 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y} |v_{i,j+\frac{1}{2}}| \\ \|\varphi_0\|_{L^2} &= \left(\sum_{1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y} \text{mes}(K_{i,j}) |\varphi_{i,j}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ \|u_0\|_{L^2} &= \left(\sum_{0 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y} \text{mes}(K_{i+\frac{1}{2},j}) |u_{i+\frac{1}{2},j}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ \|v_0\|_{L^2} &= \left(\sum_{1 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y} \text{mes}(K_{i,j+\frac{1}{2}}) |v_{i,j+\frac{1}{2}}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

I.2 Opérateurs de grilles

L'algorithme FIC est décrit dans le paragraphe suivant. Nous verrons qu'il conduit à résoudre le problème différentiel sur chacun des niveaux de raffinement. Typiquement, les problèmes que nous traitons dans la présente étude sont de la forme :

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}^0)^k &: \begin{cases} (\mathcal{D}^0)^k (u^0)^k = (f^0)^k & , \text{ dans } \Omega \\ + \text{ conditions aux limites} & , \text{ sur } \Gamma \\ + \text{ conditions initiales} \end{cases} \\ (\mathcal{P}^1)^k &: \begin{cases} (\mathcal{D}^1)^k (u^1)^k = (f^1)^k & , \text{ dans } \Omega^1 \\ + \text{ conditions aux limites} & , \text{ sur } \Gamma^1 \cap \Gamma \\ + \text{ conditions aux limites} & , \text{ sur } \Gamma^1 \setminus (\Gamma^1 \cap \Gamma) \\ + \text{ conditions initiales} \end{cases} \end{aligned}$$

Pour la grille fine G_1 , l'écriture ci-dessus signifie que l'on doit décomposer les conditions aux limites imposées de la manière suivante :

- s'il existe une frontière commune entre les domaines $\bar{\Omega}^1$ et $\bar{\Omega}$, *i.e.* si $\Gamma^1 \cap \Gamma \neq \emptyset$, on impose sur cette frontière les conditions aux limites définies sur Γ , c'est à dire les conditions aux limites du problème physique ;
- sur le reste de la frontière Γ^1 n'ayant aucune partie commune avec la frontière Γ , *i.e.* sur $\Gamma^1 \setminus (\Gamma^1 \cap \Gamma)$, on choisit des conditions aux limites de type Dirichlet, évaluées à partir de la solution $(u^0)^k$ obtenue dans le domaine Ω sur $\Gamma^1 \setminus (\Gamma^1 \cap \Gamma)$.

Il apparaît donc que nous aurons besoin d'effectuer les opérations suivantes :

- évaluer sur la grille fine les valeurs d'un champ défini sur la grille grossière, pour fixer les conditions initiales du problème différentiel posé sur la grille fine : c'est le rôle de l'opérateur de prolongement à l'intérieur du domaine ;

– évaluer sur la partie intérieure de la frontière de la grille fine la valeur d'un champ défini sur la grille grossière, pour fixer les conditions aux limites du problème différentiel posé sur la grille fine : c'est le rôle de l'opérateur de prolongement à la frontière.

Enfin, à la fin de l'algorithme, on effectue une étape consistant à surcharger, dans la zone de zoom, la valeur du champ évalué sur la grille grossière par son homologue calculé sur la grille fine : c'est le rôle de l'opérateur de restriction.

Contraintes pour les opérateurs de prolongement et de restriction. Lors de chacune de ces étapes, il est important pour les performances numériques des schémas développés de "conserver la masse", c'est à dire de garantir l'invariance :

- de l'intégrale de la masse volumique sur tout volume de contrôle grossier,
- du flux de masse traversant toute face de tout volume de contrôle grossier.

Dans le cas contraire, parmi les désagréments auxquels on s'expose, citons notamment la perte du principe du maximum discret pour le transport d'un scalaire passif ou la non existence d'une solution à l'équation de Poisson vérifiée par la pression lors de l'étape de projection.

Il s'agit donc de vérifier, lors de toute opération de prolongement ou de restriction, que les relations suivantes sont satisfaites :

$\forall K_{i,j} \subset \Omega_0 \cap \Omega_1 :$

$$\text{mes}(K_{i,j}) \rho_{i,j} = \sum_{(\bar{i},\bar{j}) \in \{-1;0;1\} \times \{-1;0;1\}} \text{mes}(K_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}}) \rho_{i,j}^{\bar{i},\bar{j}} \quad (\text{I.1})$$

$$\begin{aligned} \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i-\frac{1}{2},j} &= \sum_{\bar{j} \in \{-1;0;1\}} \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,\bar{j}}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i+\frac{1}{2},j}^{1,\bar{j}} \\ \text{mes}(\mathcal{O}_{i,j}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i+\frac{1}{2},j} &= \sum_{\bar{j} \in \{-1;0;1\}} \text{mes}(\mathcal{O}_{i,j}^{-1,\bar{j}}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i-\frac{1}{2},j}^{-1,\bar{j}} \\ \text{mes}(\mathcal{S}_{i,j}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i,j-\frac{1}{2}} &= \sum_{\bar{i} \in \{-1;0;1\}} \text{mes}(\mathcal{S}_{i,j}^{\bar{i},-1}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i,j-\frac{1}{2}}^{\bar{i},-1} \\ \text{mes}(\mathcal{O}_{i,j}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i,j+\frac{1}{2}} &= \sum_{\bar{i} \in \{-1;0;1\}} \text{mes}(\mathcal{O}_{i,j}^{\bar{i},1}) (\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i,j+\frac{1}{2}}^{\bar{i},1} \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

où, dans ces dernières relations, les flux de masse à travers les surfaces sont à exprimer en fonction de la discrétisation adoptée (notamment, du choix effectué pour l'évaluation des variables scalaires). Tous les opérateurs de grilles présentés dans les paragraphes suivants ont été développés spécifiquement, de telle sorte que les relations ci-dessus soient vérifiées **par construction**.

I.2.1 Opérateur de prolongement à l'intérieur du domaine P_0^1

Les conditions initiales pour les champs inconnus définis dans le domaine de calcul fin sont imposées à l'aide d'opérateurs d'interpolation. Ces opérateurs recopient la condition initiale des champs inconnus scalaires (resp. vectoriels) définis aux nœuds grossiers de la grille scalaire (resp. décalée) vers les nœuds fins de la grille scalaire (resp. décalée).

Inconnues scalaires. Nous définissons l'opérateur P_0^1 à l'aide de la Figure 3.2 de la manière suivante :

Pour $(i+1, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}$ fixés tels que le point x_{i+1}, y_j appartienne à la zone de raffinement, les champs inconnus scalaires $\varphi_{i+1,j}^{\bar{i},\bar{j}}, \forall (\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1;0;1\} \times \{-1;0;1\}$ sont estimés par :

$$\varphi_{i+1,j}^{\bar{i},\bar{j}} = P_0^1(\varphi) := \varphi_{i+1,j} \quad (\text{I.3})$$

Inconnues vectorielles. De la même façon que pour les champs scalaires fins, les champs vectoriels, *i.e.* le champ de vitesse \vec{v} , sont initialisés sur le maillage fin par un opérateur d'interpolation, noté P_0^1 .

À l'aide de la Figure 3.3, pour la première composante u du champ de vitesse \vec{v} , l'opérateur P_0^1 est défini par la relation suivante :

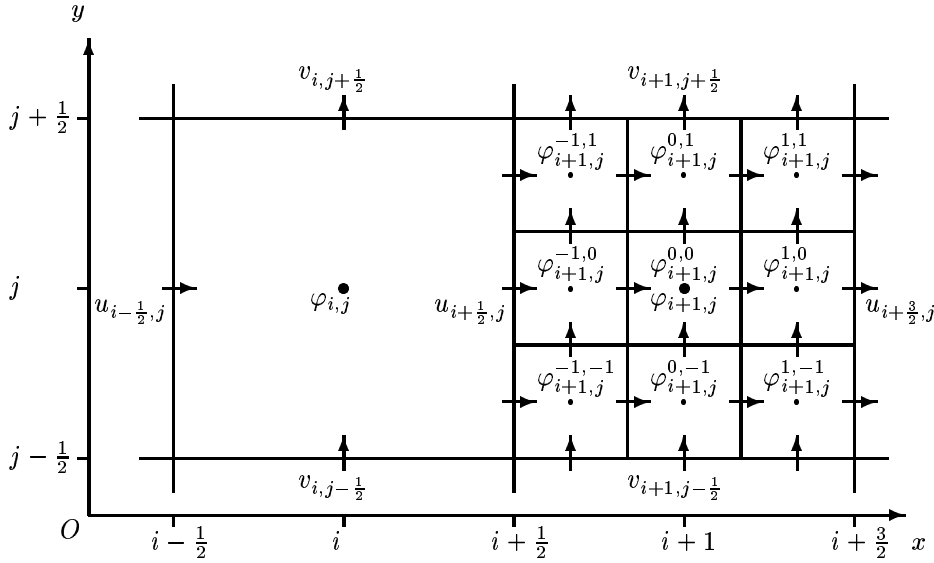


FIG. 3.2 – Exemple 2-D d'une maille scalaire raffinée avec un rapport de raffinement $r = 3$.

Pour $(i + \frac{1}{2}, j)$ fixés avec $(i, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}$ tels que le point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ appartienne à la zone de raffinement, $\forall(\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1; 0; 1\} \times \{-1; 0; 1\}$, les champs inconnus $u_{i+\frac{1}{2}, j}^{\bar{i}, \bar{j}}$ sont définis par :

$$u_{i+\frac{1}{2}, j}^{\bar{i}, \bar{j}} = P_0^1(u) := \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}, j}}{\rho_{i+\frac{1}{2}, j}^{\bar{i}, \bar{j}}} u_{i+\frac{1}{2}, j}$$

où les quantités $\rho_{i+\frac{1}{2}, j}$ et $\rho_{i+\frac{1}{2}, j}^{\bar{i}, \bar{j}}$ sont des quantités auxiliaires définies par :

$$\rho_{i+\frac{1}{2}, j} = \frac{\rho_{i+1, j} + \rho_{i, j}}{2}$$

$$\rho_{i+\frac{1}{2}, j}^{\bar{i}, \bar{j}} = \frac{\rho_{i+1, j}^{\bar{i}, \bar{j}} + \rho_{i, j}^{\bar{i}, \bar{j}}}{2}$$

Par la relation précédente (I.3), nous en déduisons que :

$$u_{i+\frac{1}{2}, j}^{\bar{i}, \bar{j}} = P_0^1(u) := u_{i+\frac{1}{2}, j}, \quad \forall(\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1; 0; 1\} \times \{-1; 0; 1\}$$

De façon similaire, la seconde composante v du champ de vitesse aux nœuds fins est définie à l'aide de la Figure 3.4 par :

Pour $(i, j + \frac{1}{2})$ fixés avec $(i, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}$ tels que le point $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ appartienne à la zone de raffinement, $\forall(\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1; 0; 1\} \times \{-1; 0; 1\}$, les champs inconnus $v_{i, j+\frac{1}{2}}^{\bar{i}, \bar{j}}$ sont définis par :

$$v_{i, j+\frac{1}{2}}^{\bar{i}, \bar{j}} = P_0^1(v) := \frac{\rho_{i, j+\frac{1}{2}}}{\rho_{i, j+\frac{1}{2}}^{\bar{i}, \bar{j}}} v_{i, j+\frac{1}{2}}$$

Et par définition des quantités $\rho_{i, j+\frac{1}{2}}$ et $\rho_{i, j+\frac{1}{2}}^{\bar{i}, \bar{j}}$, et la relation (I.3), nous concluons que :

$$v_{i, j+\frac{1}{2}}^{\bar{i}, \bar{j}} = P_0^1(v) := v_{i, j+\frac{1}{2}}, \quad \forall(\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1; 0; 1\} \times \{-1; 0; 1\}$$

I.2.2 Opérateur de prolongement à la frontière \hat{P}_0^1

Pour résoudre le problème discret associé à la grille fine, nous devons imposer des conditions aux limites à la frontière pour les champs inconnus fins. Un traitement particulier est réalisé pour les conditions aux limites du champ de vitesse pour s'assurer que le bilan de masse est satisfait sur le périmètre de la frontière.

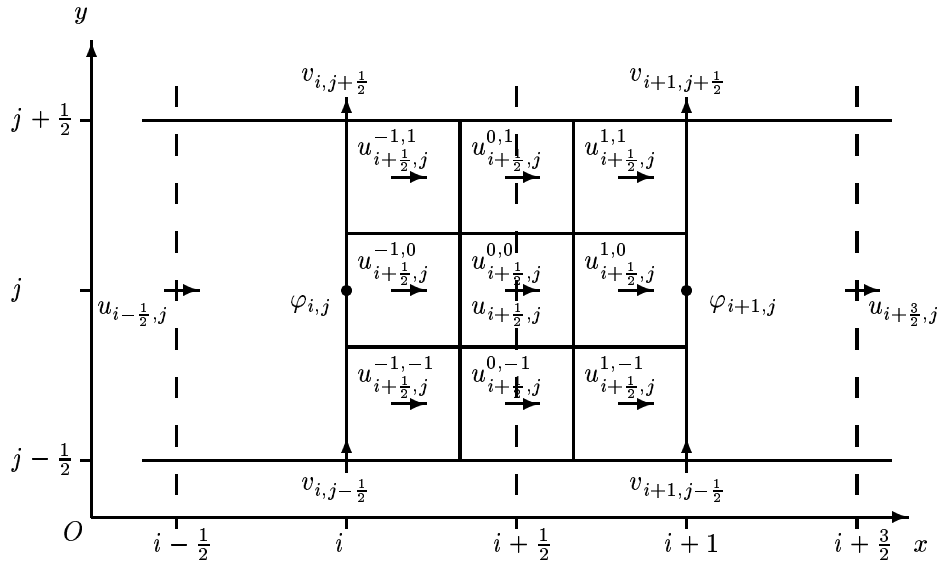


FIG. 3.3 – Exemple 2-D de maille décalée raffinée pour la première composante u du champ de vitesse avec un rapport de raffinement $r = 3$.

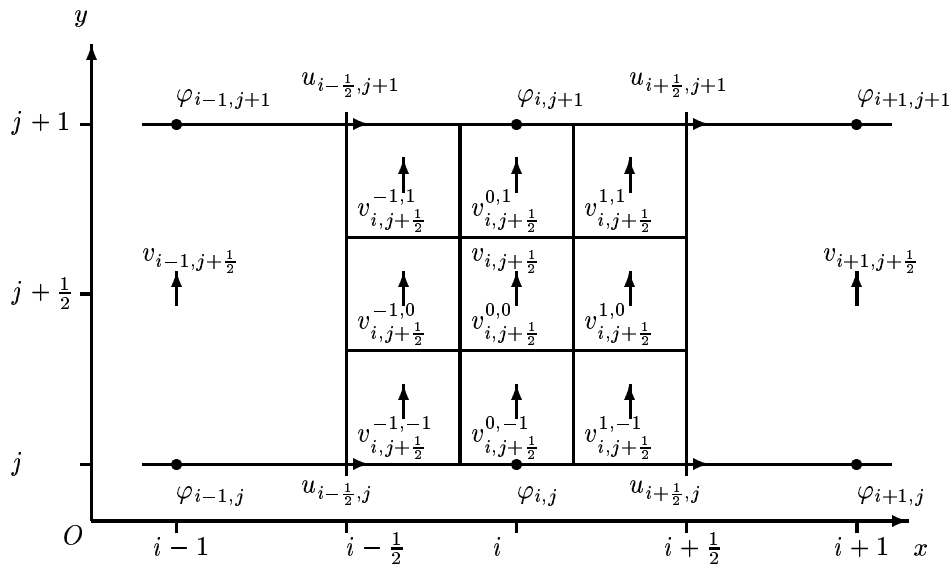


FIG. 3.4 – Exemple 2-D de maille décalée raffinée pour la deuxième composante v du champ de vitesse avec un rapport de raffinement $r = 3$.

Inconnues scalaires. En utilisant la Figure 3.5, nous définissons l'opérateur de prolongement à la frontière \hat{P}_0^1 . Cet opérateur agit des points de la grille grossière vers les points fins situés sur la frontière de la grille fine. Il s'écrit :

Pour $(i + \frac{1}{2}, j)$ fixés, pour un couple $(i, j) \in \{0; N_x\} \times \{0; N_y\}$ tels que le point $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ soit à la frontière de la zone de raffinement, nous définissons la condition aux limites de type Dirichlet pour la quantité scalaire φ aux points $(i + \frac{1}{2}, \bar{j})$ pour $\bar{j} \in \{-1; 0; 1\}$ par :

$$\varphi_{i+\frac{1}{2}, \bar{j}} = \hat{P}_0^1(\varphi) := \frac{\varphi_{i+1, j} + \varphi_{i, j}}{2} := \varphi_{i+\frac{1}{2}, j}, \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0; 1\}$$

Inconnues vectorielles. Avec la Figure 3.6, nous définissons l'opérateur de prolongement à la frontière \hat{P}_0^1 pour la composante normale du champ de vitesse aux points fins $(i + \frac{1}{2}, \bar{j})$ avec

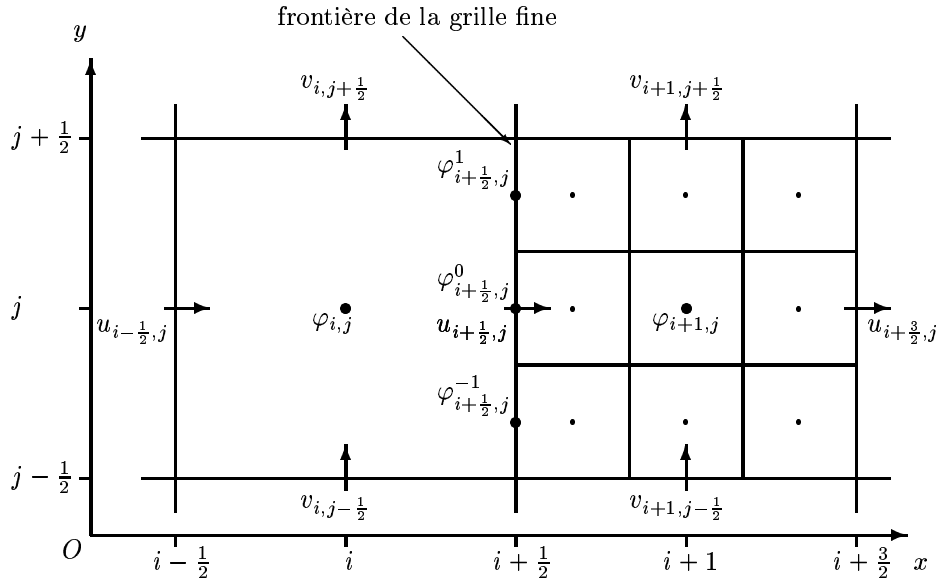


FIG. 3.5 – Exemple 2-D de conditions aux limites pour une maille scalaire raffinée avec un rapport de raffinement $r = 3$.

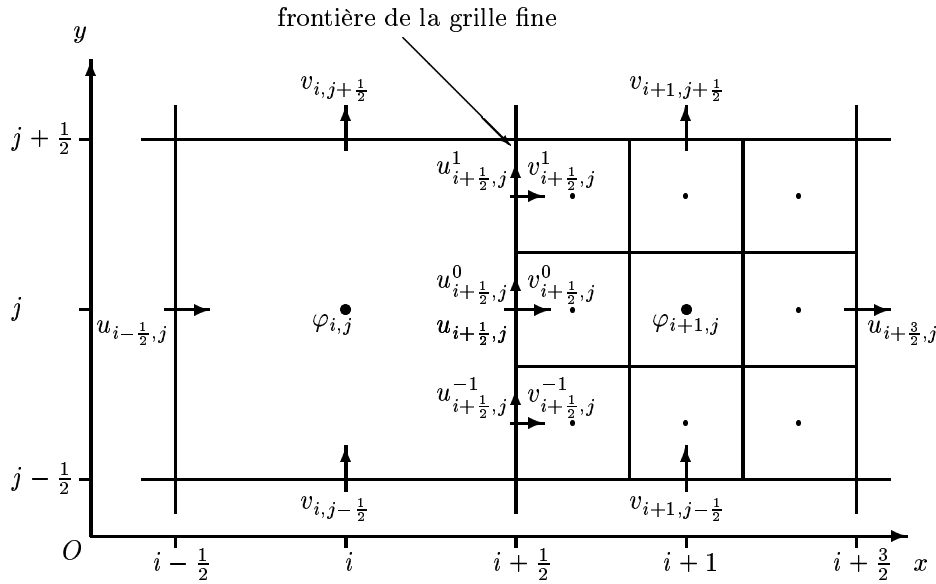


FIG. 3.6 – Exemple 2-D de conditions aux limites pour des mailles décalées avec un rapport de raffinement $r = 3$.

$\bar{j} \in \{-1; 0; 1\}$ à partir du point grossier $(i + \frac{1}{2}, j)$. On obtient :

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^{\bar{j}} = \hat{P}_0^1(u) := u_{i+\frac{1}{2},j}, \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0; 1\}$$

Le flux de masse $(\rho \vec{v} \cdot \vec{n})_{i+\frac{1}{2},\bar{j}} = (\rho u)_{i+\frac{1}{2},\bar{j}}$ est estimé par la formule suivante :

$$(\rho u)_{i+\frac{1}{2},\bar{j}} = \frac{\rho_{i+1,j} + \rho_{i,j}}{2} u_{i+\frac{1}{2},\bar{j}}, \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0; 1\}$$

Pour la composante tangentielle du champ de vitesse aux points fins, la condition aux limites est interpolée à partir des points grossiers $(i, j - \frac{1}{2})$, $(i, j + \frac{1}{2})$, $(i + 1, j - \frac{1}{2})$ et $(i + 1, j + \frac{1}{2})$. L'opérateur de prolongement à la frontière \hat{P}_0^1 est alors donné par :

$$v_{i+\frac{1}{2},j}^{\bar{j}} = \hat{P}_0^1(v) := \frac{1}{4} \left(v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}} \right), \quad \forall \bar{j} \in \{-1; 0; 1\}$$

I.2.3 Opérateur de restriction \widehat{R}_1^0

A la fin de chaque pas de temps, la solution de la grille fine est restreinte sur la grille grossière. La solution grossière est par conséquent surchargée par une interpolation des solutions fines. Toutefois cette restriction n'a lieu que pour les mailles qui sont strictement intérieures à la zone de raffinement.

Inconnues scalaires. A l'aide de la Figure 3.2, nous définissons l'opérateur de restriction pour une quantité scalaire au point grossier (x_{i+1}, y_j) strictement intérieur à la zone de raffinement, soit par une injection :

$$\varphi_{i+1,j} = \widehat{R}_1^0(\varphi) := \varphi_{i+1,j}^{0,0}$$

soit par une interpolation avec un stencil à 9 points :

$$\varphi_{i+1,j} = \widehat{R}_1^0(\varphi) := \frac{1}{\text{mes}(K_{i+1,j})} \sum_{(\bar{i}, \bar{j}) \in \{-1;0;1\}^2} \text{mes}(K_{i+1,j}^{\bar{i}, \bar{j}}) \varphi_{i+1,j}^{\bar{i}, \bar{j}}$$

Inconnues vectorielles. Par la Figure 3.3, nous sommes en mesure de définir l'opérateur de restriction \widehat{R}_1^0 au point grossier $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ strictement intérieur à la zone de raffinement pour la première composante u du champ de vitesse par :

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \widehat{R}_1^0(u) := \frac{1}{\text{mes}(\partial K_{i+\frac{1}{2},j}) \rho_{i+\frac{1}{2},j}} \sum_{\bar{j} \in \{1;3\}} \text{mes}(\partial K_{i+\frac{1}{2},j}^{\bar{j}}) \rho_{i+\frac{1}{2},j}^{0,\bar{j}} u_{i+\frac{1}{2},j}^{0,\bar{j}}$$

Le même raisonnement est valable pour la seconde composante v du champ de vitesse à l'aide de la Figure 3.4.

I.3 Algorithme FIC pour deux niveaux de grilles

La méthode de Correction de Flux à l'Interface est adaptée à une discrétisation conservative des équations. De ce fait, une discrétisation spatiale en volumes finis convient à cette méthode. Le principe de la correction de flux à l'interface est de satisfaire, sur la frontière de chaque volume de contrôle situé à l'intérieur d'une zone de zoom, une relation de continuité au sens faible (*i.e.* en moyenne) des flux associés à la solution entre deux grilles non concordantes d'un maillage composite non conforme, permettant ainsi un raccordement conservatif des sous-domaines emboîtés.

Détaillons ce principe. Supposons que l'opérateur \mathcal{D} puisse se décomposer en une partie divergente (conservative) faisant intervenir le flux $\mathcal{F}(u)$ de la solution et une partie non-conservative $\mathcal{G}(u)$, c'est à dire :

$$\mathcal{D}(u) = \nabla \cdot \mathcal{F}(u) + \mathcal{G}(u) = f$$

Le résidu associé à cette équation s'écrit :

$$r(u) = f - \nabla \cdot \mathcal{F}(u) - \mathcal{G}(u) \quad (\text{I.4})$$

Le principe de la méthode FIC peut alors s'énoncer comme suit : appliquer entre les grilles grossière G_0 et fine G_1 un résidu de correction local en flux en chaque nœud \vec{x} d'une zone de correction en flux, à travers un bilan conservatif des flux de l'équation du résidu (I.4) provenant des grilles G_0 et G_1 .

Notons I_0 la zone de zoom, définie par :

$$I_0 := \{K_0(\vec{x}), \forall \vec{x} \in G_0 \cap G_1\} \in \Omega^0$$

Et $I_{0,1}$ la zone de correction en flux, définie par :

$$I_{0,1} := \{K_0(\vec{x}), \forall \vec{x} \in G_0 \cap G_1 \text{ tel que } \partial K_0(\vec{x}) \cap \partial \Omega_0 = \emptyset\} \subset I_0$$

Nous les avons représentées sur la Figure 3.7.

L'estimation du résidu de correction en flux est alors évalué sur chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ appartenant à la zone de correction en flux $I_{0,1}$. C'est l'étape de correction sur la grille grossière G_0 .

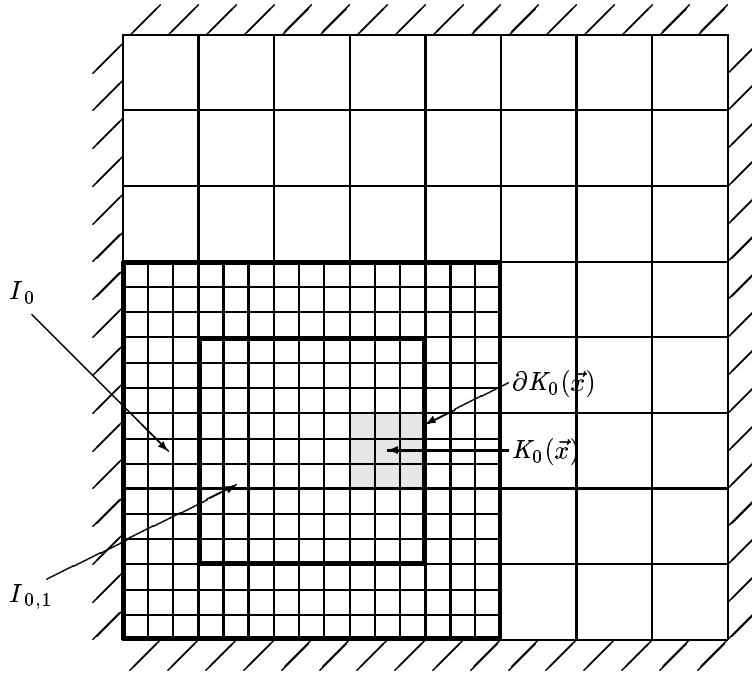


FIG. 3.7 – Exemple 2-D d'une zone de zoom I_0 et de la zone de correction en flux correspondante $I_{0,1}$.

Cette estimation pourrait être effectuée sur l'ensemble de la zone de zoom I_0 , toutefois les volumes de contrôle grossiers dont une des faces forme une partie de la frontière de la grille fine sont "proches" de la condition aux limites et corrigeront peu les flux dans cette zone. Le parti pris est donc de n'estimer le résidu de correction en flux que dans les volumes de contrôle suffisamment "loins" de la condition aux limites.

Pour chaque point $\vec{x} \in G_0$ dont le volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ appartient à la zone de correction en flux $I_{0,1}$, nous définissons le résidu local $r_0(\mathcal{F})(\vec{x})$ de correction en flux associé à la solution u par :

$$r_0(\mathcal{F})(\vec{x}) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0(\mathcal{F}(u))(\vec{x}) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \mathcal{F}_0(u) \cdot \vec{n}_0 \right\} \quad (\text{I.5})$$

où R_1^0 est l'opérateur de restriction en flux, défini par :

$$R_1^0(\mathcal{F}(u))(\vec{x}) = \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 \quad (\text{I.6})$$

A l'aide de la Figure 3.1, nous caractérisons, pour deux niveaux de grille G_0 grille grossière et G_1 grille fine, l'opérateur de restriction en flux R_1^0 pour le volume de contrôle $K_0(x_i, y_j) := K_{i,j}$ centré autour du point $(x_i, y_j) \in G_0$. Il s'écrit :

$$\begin{aligned} R_1^0(\mathcal{F}(u))(x_i, y_j) &= \oint_{\partial K_{i,j}} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 = \oint_{\mathcal{E}_{i,j} \cup \mathcal{N}_{i,j} \cup \mathcal{O}_{i,j} \cup \mathcal{S}_{i,j}} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 \\ &= \oint_{\mathcal{E}_{i,j}^{1,1} \cup \mathcal{E}_{i,j}^{1,0} \cup \mathcal{E}_{i,j}^{1,-1}} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 + \oint_{\mathcal{N}_{i,j}^{-1,1} \cup \mathcal{N}_{i,j}^{0,1} \cup \mathcal{N}_{i,j}^{1,1}} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 \\ &+ \oint_{\mathcal{O}_{i,j}^{-1,1} \cup \mathcal{O}_{i,j}^{-1,0} \cup \mathcal{O}_{i,j}^{-1,-1}} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 + \oint_{\mathcal{S}_{i,j}^{-1,-1} \cup \mathcal{S}_{i,j}^{0,-1} \cup \mathcal{S}_{i,j}^{1,-1}} \mathcal{F}(u_1) \cdot \vec{n}_1 \end{aligned}$$

Considérons le cas d'une équation de bilan d'un scalaire passif, fraction de mélange par exemple, de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Z) + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z$$

La correction en flux porte sur les flux convectifs $\mathcal{F}_c(Z) = \rho Z \vec{v}$ et les flux diffusifs $\mathcal{F}_d(Z) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla Z$.

De façon discrète, l'opérateur de restriction en flux R_1^0 pour le volume de contrôle $K_0(x_i, y_j) := K_{i,j}$ associé aux flux convectifs et diffusifs $\mathcal{F}(Z) = \mathcal{F}_c(Z) + \mathcal{F}_d(Z)$ de l'équation de bilan d'un scalaire passif s'écrit alors pour les faces $\mathcal{E}_{i,j} = \mathcal{E}_{i,j}^{1,1} \cup \mathcal{E}_{i,j}^{1,0} \cup \mathcal{E}_{i,j}^{1,-1}$:

$$R_1^0(\mathcal{F}(Z))(x_i, y_j) = \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,1}) (\rho Z)_q^{\mathcal{E}_{i,j}^{1,1}} u_{i+\frac{1}{2},j}^{0,1} + \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,1}) \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \left(\frac{Z_{i+1,j}^{-1,1} - Z_{i,j}^{1,1}}{\Delta x_1} \right) \quad (\text{I.7})$$

$$+ \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,0}) (\rho Z)_q^{\mathcal{E}_{i,j}^{1,0}} u_{i+\frac{1}{2},j}^{0,0} + \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,0}) \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \left(\frac{Z_{i+1,j}^{-1,0} - Z_{i,j}^{1,0}}{\Delta x_1} \right) \quad (\text{I.8})$$

$$+ \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,-1}) (\rho Z)_q^{\mathcal{E}_{i,j}^{1,-1}} u_{i+\frac{1}{2},j}^{0,-1} + \text{mes}(\mathcal{E}_{i,j}^{1,-1}) \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \left(\frac{Z_{i+1,j}^{-1,-1} - Z_{i,j}^{1,-1}}{\Delta x_1} \right) \quad (\text{I.9})$$

$$(\text{I.10})$$

où $(\rho Z)_q^{\mathcal{E}_{i,j}^{1,1}}$ est l'estimation de la quantité ρZ sur la face $\mathcal{E}_{i,j}^{1,1}$ par un schéma QUICK. Pour cet exemple et pour $u_{i+\frac{1}{2},j}^{0,1} > 0$, nous obtenons :

$$(\rho Z)_q^{\mathcal{E}_{i,j}^{1,1}} = (\rho Z)_{i,j}^{1,1} + \frac{1}{8} \left(3(\rho Z)_{i+1,j}^{-1,1} - 2(\rho Z)_{i,j}^{1,1} - (\rho Z)_{i,j}^{0,1} \right)$$

L'algorithme FIC pour deux niveaux de grilles G_0 et G_1 s'écrit alors :

Algorithme I.1 : Algorithme FIC pour deux niveaux de grilles G_0 et G_1

Initialisation : u_0^0 est solution du problème initial (\mathcal{P}_0^0)

Itérations : pour $k = 1$ à $\gamma(0)$ faire

(1) *Résolution sur la grille fine G_1* :

(i) Détermination des conditions aux limites : $u_1^{k-1} = \widehat{P}_0^1(u_0^{k-1})$ sur $\Gamma^1 \setminus (\Gamma^1 \cap \Gamma)$

(ii) Calculer u_1^k solution du problème (\mathcal{P}_1^k)

(2) *Correction sur la grille grossière G_0* :

(i) Calcul du résidu de correction en flux $r_0^k(\mathcal{F})(\vec{x})$ défini pour tout $\vec{x} \in G_0$ tel que $K_0(\vec{x}) \in I_{0,1}$ par :

$$r_0^k(\mathcal{F})(\vec{x}) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0(\mathcal{F}(u^{k-1}))(\vec{x}) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \mathcal{F}_0(u^{k-1}) \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

(ii) Calcul de la solution corrigée u_0^k sur la grille grossière, solution de (\mathcal{P}_0^k) avec

$$f_0^k = f_0^{k-1} + \sum_{K_0(\vec{x}) \in I_{0,1}} \mathbb{1}_{K_0(\vec{x})} r_0^k(\mathcal{F})(\vec{x})$$

où $\mathbb{1}_{K_0(\vec{x})}$ est la fonction caractéristique du volume de contrôle $K_0(\vec{x})$ définie sur G_0 par :

$$\mathbb{1}_{K_0(\vec{x})} = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in G_0 \text{ tel que } K_0(\vec{x}) \in I_{0,1} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Restriction de la solution fine sur la grille grossière G_0 :

$$u_0^{k=\gamma(0)}(\vec{x}) = \widehat{R}_1^0(u_1^{k=\gamma(0)})(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in G_0 \text{ tel que } K_0(\vec{x}) \in I_0$$

A la fin de toutes les itérations, l'étape de restriction de la solution fine sur la grille grossière G_0 à l'aide de l'opérateur \widehat{R}_1^0 est nécessaire uniquement pour parfaire la correction aux nœuds grossiers contenus dans la zone de zoom.

II Méthode FIC multi-niveaux

Les notations introduites pour deux niveaux de grilles peuvent être généralisées au cas multi-niveaux de façon récursive. C'est le but du paragraphe suivant. Par la suite, nous donnons l'algorithme FIC dans le cas multi-niveaux.

II.1 Notations multi-niveaux

Domaines. Nous définissons une suite de domaines emboîtés Ω^l de niveau l , $0 \leq l \leq l^*$, caractérisés par l'ouvert Ω^l , la frontière $\Gamma^l = \partial\Omega^l$, l'adhérence $\bar{\Omega}^l = \Omega^l \cup \Gamma^l$.

Notons $\Gamma^{l,l+1}$ l'interface entre deux sous-espaces consécutifs Ω^l et Ω^{l+1} .

On a les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\Omega^0 &= \Omega, \quad \Gamma^0 = \Gamma; \\ \bar{\Omega}^{l+1} &\subset \bar{\Omega}^l, \quad \forall l \neq 0; \\ \Gamma^{l,l+1} &= \Gamma^{l+1} \setminus (\Gamma^{l+1} \cap \Gamma^l) \neq \emptyset, \quad \forall l \neq 0.\end{aligned}$$

Grilles “grossière” et “fine”. De la même façon que pour les cas deux niveaux, on considère qu'à un niveau $l \neq l^*$ donné, deux grilles successives G_l et G_{l+1} sont notées respectivement grille grossière et grille fine. On définit le rapport de raffinement du niveau l de la grille grossière G_l pour $0 \leq l \leq l^* - 1$, par :

$$r_l = \frac{\Delta x_l}{\Delta x_{l+1}} = \frac{\Delta y_l}{\Delta y_{l+1}} \in \mathbb{N}^*, \quad \forall l \neq 0$$

où Δx_l et Δy_l désignent les pas d'espace dans chacune des directions associées à la grille grossière.

Opérateurs de grilles. Comme pour le cas deux niveaux, nous avons besoin d'opérateurs de grilles qui évaluent sur la grille fine les valeurs d'un champ défini sur la grille grossière, pour fixer les conditions initiales du problème différentiel posé sur la grille fine; qui évaluent sur la partie intérieure de la frontière de la grille fine la valeur d'un champ défini sur la grille grossière, pour fixer les conditions aux limites du problème différentiel posé sur la grille fine; et qui effectuent une étape consistant à surcharger, dans la zone de zoom, la valeur du champ évalué sur la grille grossière par son homologue calculé sur la grille fine.

Tous ces opérateurs entre deux niveaux de grilles, l et $l+1$, sont construits de façon récursive, de la même manière que pour le cas deux niveaux, en considérant la grille G_l comme la grille grossière et la grille G_{l+1} comme la grille fine.

II.2 Algorithme FIC multi-niveaux

Notons I_l la zone de zoom, définie par :

$$I_l := \{K_l(\vec{x}), \forall \vec{x} \in G_l \cap G_{l+1}\} \in \Omega^l$$

Et notons $I_{l,l+1}$ la zone de correction en flux, définie par :

$$I_{l,l+1} := \{K_l(\vec{x}), \forall \vec{x} \in G_l \cap G_{l+1} \text{ tel que } \partial K_l(\vec{x}) \cap \partial\Omega_l = \emptyset\} \subset I_l$$

L'estimation du résidu de correction en flux est alors évalué sur chaque volume de contrôle grossier $K_l(\vec{x})$ appartenant à la zone de correction en flux $I_{l,l+1}$. C'est l'étape de correction sur la grille grossière G_l .

Pour chaque point $\vec{x} \in G_l$ dont le volume de contrôle grossier $K_l(\vec{x})$ appartient à la zone de correction en flux $I_{l,l+1}$, nous définissons le résidu local $r_l(\mathcal{F})(\vec{x})$ de correction en flux associé à la solution u par :

$$r_l(\mathcal{F})(\vec{x}) = \frac{1}{|K_l(\vec{x})|} \left\{ R_{l+1}^l(\mathcal{F}(u))(\vec{x}) - \oint_{\partial K_l(\vec{x})} \mathcal{F}_l(u) \cdot \vec{n}_l \right\} \quad (\text{II.11})$$

où R_{l+1}^l est l'opérateur de restriction en flux, défini par :

$$R_{l+1}^l(\mathcal{F}(u))(\vec{x}) = \oint_{\partial K_l(\vec{x})} \mathcal{F}(u_{l+1}) \cdot \vec{n}_{l+1}$$

L'algorithme FIC multi-niveaux s'écrit alors :

Algorithme II.1 : Algorithme FIC multi-niveaux

Initialisation : u_0^0 est solution du problème initial (\mathcal{P}_0^0)

Itérations : pour $k = 1$ à $\gamma(0)$ faire :

Pour $l = 1$ à l^* par pas de 1 faire :

(1) *Résolution sur la grille fine G_l :*

(i) Détermination des conditions aux limites : $u_i^{k-1} = \widehat{P}_{l-1}^l u_{i-1}^{k-1}$ sur $\Gamma^l \setminus (\Gamma^l \cap \Gamma)$

(ii) Calculer u_i^{k-1} solution du problème (\mathcal{P}_i^{k-1})

Pour $l = l^* - 1$ à 0 par pas de -1 faire :

(2) *Correction sur la grille grossière G_l :*

(i) Calcul du résidu $r_i^k(\mathcal{F})(\vec{x})$ défini pour tout $\vec{x} \in G_l$ tel que $K_l(\vec{x}) \in I_{l,l+1}$ par :

$$r_i^k(\mathcal{F})(\vec{x}) = \frac{1}{|K_l(\vec{x})|} \left\{ R_{l+1}^l(\mathcal{F}(u^{k-1}))(\vec{x}) - \oint_{\partial K_l(\vec{x})} \mathcal{F}_l(u^{k-1}) \cdot \vec{n}_l \right\}$$

(ii) Calcul de la solution corrigée u_i^k sur la grille grossière, solution de (\mathcal{P}_i^k) avec

$$f_i^k = f_i^{k-1} + \sum_{K_l(\vec{x}) \in I_{l,l+1}} \mathbb{1}_{K_l(\vec{x})} r_i^k(\mathcal{F})(\vec{x})$$

où $\mathbb{1}_{K_l(\vec{x})}$ est la fonction caractéristique du volume de contrôle $K_l(\vec{x})$ définie sur G_l par :

$$\mathbb{1}_{K_l(\vec{x})} = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in G_l \text{ tel que } K_l(\vec{x}) \in I_{l,l+1} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Restriction de la solution fine sur une grille grossière G_l :

Pour $l = l^* - 1$ à 0 par pas de -1 faire :

$$u_i^{k=\gamma(0)}(\vec{x}) = \widehat{R}_{l+1}^l(u_{l+1}^{k=\gamma(0)})(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in G_l \text{ tel que } K_l(\vec{x}) \in I_l$$

Chapitre 4

Résultats numériques

Ce chapitre est consacré à la validation de la discrétisation spatio-temporelle du modèle à faible nombre de Mach et de la méthode de raffinement local multi-niveaux.

Nous traitons tout d'abord deux exemples académiques :

- Le premier concerne un problème elliptique avec une singularité à l'origine qui possède une solution analytique et est développé au paragraphe I.1. Nous montrons dans le cas monogrid que les schémas de discrétisation spatio-temporelle sont précis pour une équation elliptique scalaire. Nous confirmons par ailleurs la précision de la méthode de raffinement local multi-niveaux pour ce type de problème.
- Le second cas-test est un problème de Burgers qui possède une solution analytique. Il est étudié au paragraphe I.2. Dans ce cas, nous validons les schémas de discrétisation spatio-temporelle appliqués à une inconnue vectorielle. Nous montrons que la précision est améliorée par la méthode de raffinement local multi-niveaux.

Nous nous intéressons ensuite à des problèmes à faible nombre de Mach plus complexes :

- Tout d'abord, nous traitons un problème hydrodynamique instationnaire avec masse volumique variable donnée, où aucune équation de bilan d'énergie n'est résolue. Ce problème imite les conditions d'un problème de combustion et est décrit au paragraphe II.1. Dans cette application, le rapport entre la température maximum et la température minimum est de 5.
- Puis, au paragraphe II.2, nous étudions le problème de la convection naturelle à faible nombre de Mach. Dans ce problème, ce sont les forces de gravité qui sont motrices et nous étudions le cas de grands écarts de température où l'approximation de Boussinesq n'est plus valable (voir Gray et Giorgini [23]). Dans cette application, la température varie d'un facteur maximum de 1.4.
- Enfin, la paragraphe II.3 traite le cas-test d'une flamme de diffusion laminaire. Ici, nous validons la méthode de projection pour de très grands écarts de température (la température varie d'un facteur maximum de 10).

Pour chacun de ces problèmes, nous vérifions la robustesse de la méthode numérique développée et examinons le gain en précision de la méthode de raffinement local multi-niveaux.

I Validation de la méthode de raffinement local multi-niveaux pour des exemples académiques

I.1 Problème elliptique avec singularité à l'origine

Nous validons la méthode de raffinement local multi-niveaux pour une équation elliptique portant sur une inconnue scalaire. Cet exemple est proposé par Khadra *et al.* [31].

I.1.1 Position du problème

Le problème bidimensionnel elliptique (\mathcal{P}) à résoudre est défini par :

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} -\nabla^2 u = -2\pi\delta & , \text{ dans } \Omega =]0; 1[\times]0; 1[\\ u = \ln(x^2 + y^2) & , \text{ sur } \Gamma = \partial\Omega \end{cases}$$

où δ est la fonction de Dirac au point origine $(0, 0)$.

Ce problème (\mathcal{P}) possède une solution analytique qui est solution élémentaire du Laplacien bidimensionnel, soit $\bar{u} = \ln(x^2 + y^2)$.

La Figure 4.1 rappelle la géométrie du problème elliptique avec singularité à l'origine (\mathcal{P}) et les conditions aux limites, tandis que sur la Figure 4.2 est représentée la solution analytique de ce problème.

I.1.2 Discrétisation numérique

Discrétisation temporelle et méthode des volumes finis. Le problème (\mathcal{P}) est résolu sur différents maillages dont les pas varient de $h_0 = 1/7$ à $h_0/27$. Une seule itération en temps est effectuée avec un pas de temps égal à $\Delta t = 10^8$. La discrétisation spatiale par volumes finis du Laplacien est réalisée telle que présentée au chapitre 2, paragraphe IV.2 à l'aide d'un stencil à 5 points. La résolution du système linéaire utilise la méthode du Gradient Conjugué dont nous avons

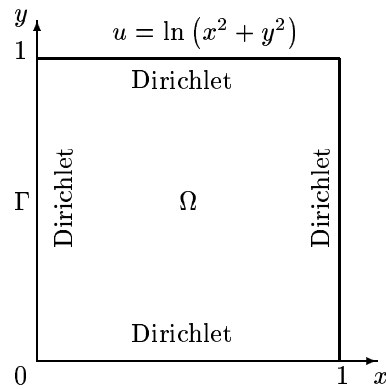


FIG. 4.1 – Géométrie et conditions aux limites.

FIG. 4.2 – Solution analytique.

fixé le critère d'arrêt à $\varepsilon = 10^{-8}$. Pour chacun des maillages, le nombre d'itérations de la méthode itérative est de l'ordre de $O(1/h)$, avec h le pas du maillage concerné.

Méthode de raffinement local multi-niveaux. Pour cet exemple académique, le choix de la zone de raffinement local est guidé par la nature du problème à résoudre, et se concentre autour de la singularité à l'origine.

Toutes les grilles G_l que nous considérons sont définies par un maillage cartésien. Elles sont carrées, structurées et uniformes de pas constant h_l identique dans chaque direction d'espace. Elles sont définies par leur domaine $\Omega^l =]0; x(l)[\times]0; y(l)[$, $0 \leq l \leq l^*$ avec $\Omega^0 = \Omega =]0; 1[\times]0; 1[$. Le rapport de raffinement r est indépendant du niveau de raffinement et est égal à 3.

Nous avons représenté sur la Figure 4.3 une grille initiale G_0 munie de deux niveaux de raffinement $G_1 =]0; 0.5[\times]0; 0.5[$ et $G_2 =]0; 0.25[\times]0; 0.25[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$.

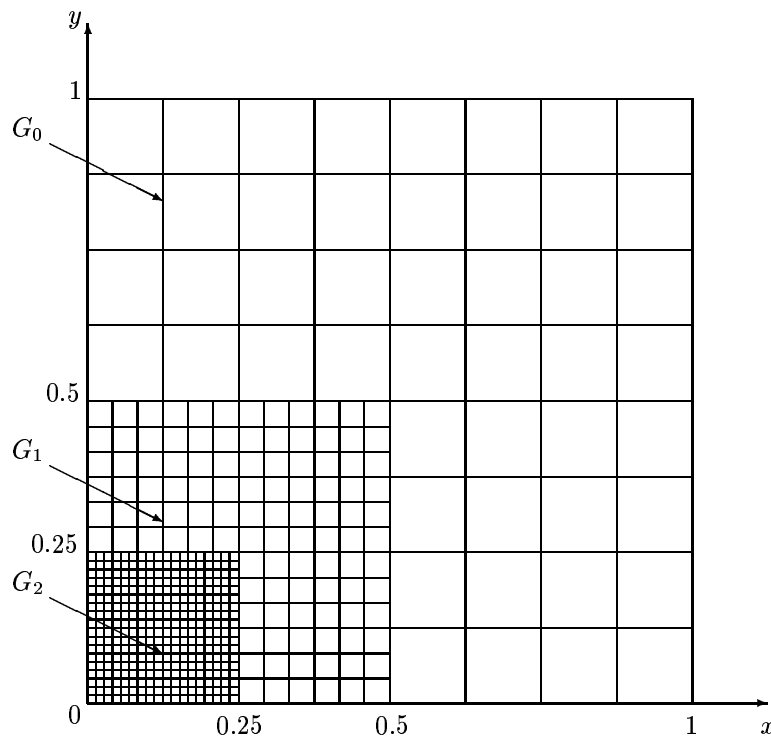


FIG. 4.3 – Grille initiale $G_0 =]0; 1[\times]0; 1[$ et grilles raffinées : $G_1 =]0; 0.5[\times]0; 0.5[$ et $G_2 =]0; 0.25[\times]0; 0.25[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$ pour le problème elliptique avec singularité à l'origine.

Le résidu de correction en flux de la méthode de raffinement local multi-niveaux porte sur les flux diffusifs. Les flux diffusifs de l'inconnue u sont $\mathcal{F}_d(u) = -\nabla u$.

	7×7	21×21	63×63	189×189
$\ e_r(l=0)\ _\infty$	0.012286	0.00829321	0.00626377	0.00503237
Rapport	-	1.48	1.32	1.24
$\ e_r(l=0)\ _2$	0.014144	0.00498254	0.00167706	0.000559952
Rapport	-	2.84	2.97	2.99

TAB. 4.1 – Normes L^2 et L^∞ discrètes des erreurs relatives associées aux maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 .

Le résidu de correction en flux pour deux niveaux de grilles s'écrit pour chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ strictement intérieur à la zone de raffinement et centré autour du point $\vec{x} \in G_0$ comme :

$$r_0(\mathcal{F}_d(u))(\vec{x}) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0(-\nabla u \cdot \vec{n}_1)(\vec{x}) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} -\nabla u \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

En ce qui concerne les opérateurs de grilles, l'opérateur de prolongement à la frontière, qui sert à imposer les conditions aux limites sur la frontière du domaine fin, est un opérateur d'interpolation. Il est défini pour une inconnue scalaire au paragraphe I.2 du chapitre 3, de même que l'opérateur de restriction en flux R_1^0 . Pour la restriction finale de la solution fine sur la grille grossière, nous avons utilisé l'injection canonique. Cet opérateur est lui-aussi défini au paragraphe I.2 pour une inconnue scalaire.

Enfin, l'algorithme de raffinement local multi-niveaux utilisé est l'algorithme II.1 décrit au chapitre 3, paragraphe II.2.

I.1.3 Résultats numériques

Normes des erreurs discrètes. Les erreurs discrètes e_i^k à l'itération k du processus de raffinement local associées à la solution discrète u_i^k du problème sont définies sur chaque grille G_l par :

$$e_i^k = T_l(\bar{u}) - u_i^k$$

où \bar{u} désigne la solution analytique du problème, $T_l(\bar{u})$ sa trace sur $\bar{\Omega}_l$ et u_i^k la solution discrète obtenue à l'itération k du processus de raffinement local et sur la grille G_l .

Sur le Tableau 4.1 est représentée l'évolution des normes d'erreurs relatives calculées sur les grilles de base G_0 associées aux maillages 7×7 de pas $h = 1/7$, 21×21 de pas $h = 1/21$, 63×63 de pas $h = 1/63$ et 189×189 de pas $h = 1/189$. Ces normes d'erreurs relatives sont évaluées par :

$$e_r^k(l=0) = \frac{\|e_{l=0}^k\|}{\|T_{l=0}(\bar{u})\|}$$

où la norme $\|\cdot\|$ est soit la norme L^2 discrète soit la norme L^∞ discrète, définies au paragraphe I.1 du chapitre 3. On note que le point origine $(0,0)$, où la solution n'est pas définie, n'intervient pas dans le calcul des normes précédentes puisque l'inconnue discrète n'est pas définie en ce point.

Résultats numériques pour des maillages monogrilles. Les résultats obtenus dans le cas monogrille confirment la convergence au maillage de la solution numérique vers la trace de la solution analytique sur chacun des maillages concernés. Par ailleurs, au regard des erreurs en norme L^2 discrète pour les différents maillages, nous observons un rapport de l'ordre de 3, confirmant les résultats théoriques d'estimation d'erreur pour la discrétisation par volumes finis du Laplacien par un stencil à 5 points.

Résultats numériques pour des maillages avec raffinement local multi-niveaux. Le Tableau 4.2 montre l'évolution de l'erreur relative en norme L^∞ discrète lorsque nous appliquons la méthode de raffinement local avec les grilles présentées ci-dessus pour les maillages 7×7 , 21×21 ,

	7×7	21×21	63×63	189×189
$l = 0$	0.012286	0.00829321	0.00626377	0.00503237
$l = 1$	0.00569402	0.00174469	0.00131292	-
$l = 2$	0.00569402	0.000602024	-	-

TAB. 4.2 – Norme L^∞ discrète des erreurs relatives associées aux maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 pour la méthode de raffinement local multi-niveaux.

	7×7	21×21	63×63	189×189
$l = 0$	0.014144	0.00498254	0.00167706	0.000559952
$l = 1$	0.00852681	0.00130968	0.000324962	-
$l = 2$	0.00851144	0.000994317	-	-

TAB. 4.3 – Normes L^2 discrètes des erreurs relatives associées aux maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 pour la méthode de raffinement local multi-niveaux.

63×63 et 189×189 . Deux itérations de raffinement local sont effectuées, *i.e.* $\gamma(0) = 2$. Sur chacun des niveaux de grilles, la méthode itérative de Gradient conjugué est utilisée avec le même critère d'arrêt $\varepsilon = 10^{-8}$.

La Figure 4.4 illustre le Tableau 4.2 en représentant la norme L^∞ discrète des erreurs relatives en fonction des pas de maillage et des niveaux de raffinement.

FIG. 4.4 – Norme L^∞ discrète des erreurs relatives pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 et un maximum de deux niveaux de raffinement.

Sur le Tableau 4.3, nous présentons l'évolution de l'erreur relative en norme L^2 discrète lorsque nous appliquons la méthode de raffinement local pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 .

La Figure 4.5 illustre le Tableau 4.3 en représentant la norme L^2 discrète des erreurs relatives en fonction des pas de maillage et des niveaux de raffinement.

D'après les Figures 4.4 et 4.5, nous constatons que les normes des erreurs relatives, quel que soit

FIG. 4.5 – Norme L^2 discrète des erreurs relatives pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 et un maximum de deux niveaux de raffinement.

la norme discrète utilisée, diminuent en utilisant la méthode de raffinement local multi-niveaux. Cependant elles tendent vers une valeur minimale, consistante avec l'ordre des schémas de discrétisation sur les différentes grilles. C'est clairement visible dans le cas du maillage 7×7 . Nous le devinons pour le maillage 21×21 . Ce phénomène de saturation est atteint pour un niveau de raffinement d'autant plus faible que le maillage initial est grossier : il suffit de comparer les maillages 7×7 et 21×21 . Autre comportement remarquable : la norme des erreurs relatives du maillage 21×21 pour un niveau maximum de raffinement $l^* = 1$, donc pour une zone du domaine de calcul équivalente au maillage 63×63 , sont plus faibles que les normes d'erreurs relatives du maillage global 63×63 . C'est encore vrai pour le maillage initial 63×63 avec un niveau de raffinement comparable au maillage global 189×189 .

Sur la Figure 4.6 est représentée l'erreur discrète en norme L^∞ entre la solution numérique du maillage 21×21 et la trace de la solution analytique sur ce même maillage.

Sur la Figure 4.7 est représentée l'erreur discrète en norme L^∞ entre la solution numérique du maillage 21×21 avec un niveau de raffinement et la trace de la solution analytique sur ce même maillage, tandis que sur la Figure 4.8 est représentée l'erreur discrète en norme L^∞ entre la solution numérique du maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement et la trace de la solution analytique sur ce même maillage.

D'après les Figures 4.6, 4.7 et 4.8, nous observons que le processus de raffinement de maillage diminue de manière significative l'erreur en norme L^∞ discrète entre la solution numérique du maillage 21×21 et la trace de la solution analytique sur ce même maillage. De plus, alors que pour le maillage 21×21 monogrid, l'erreur est concentrée autour du point origine, pour le maillage 21×21 avec une zone de raffinement, l'erreur se propage dans le domaine de calcul mais son amplitude diminue nettement. Ces comportements sont encore plus accentués pour le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement.

En conclusion, nous retrouvons les résultats obtenus par Khadra *et al.* [31] et reproduisons bien les phénomènes observés par ces auteurs :

- une diminution du maximum de l'erreur localisé autour de la singularité,
- une étalement de l'erreur dans le domaine de calcul.

Le problème de diffusion avec une singularité à l'origine valide donc la méthode de raffinement local multi-niveaux pour une équation elliptique scalaire.

FIG. 4.6 – Norme L^∞ discrète de l'erreur entre la solution numérique du maillage 21×21 et la trace de la solution analytique sur ce même maillage.

FIG. 4.7 – Norme L^∞ discrète de l'erreur entre la solution numérique du maillage 21×21 avec un niveau de raffinement et la trace de la solution analytique sur ce même maillage.

FIG. 4.8 – Norme L^∞ discrète de l'erreur entre la solution numérique du maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement et la trace de la solution analytique sur ce même maillage.

I.2 Problème de Burgers

On présente la validation de la méthode de raffinement local F.I.C pour une équation instationnaire de convection-diffusion du champ de vitesse, pour laquelle nous construisons une solution analytique. Cet exemple est proposé par Kortas et Angot [34].

I.2.1 Position du problème

Considérons les équations de Burgers non linéaires instationnaires et visqueuses dans le domaine borné $\Omega_0 = [0; L] \times [0; L]$ dans l'intervalle de temps $[0; \tau]$:

Résoudre pour $\vec{v} = (u, v)^T : \Omega_0 \times [0; \tau] \rightarrow \mathbb{R}^2$

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(\vec{x}, t) + (\vec{v} \cdot \nabla)u(\vec{x}, t) - \nabla \cdot (\mu_x \nabla u)(\vec{x}, t) = f_u(\vec{x}, t) & \text{pour } (\vec{x}, t) \in \Omega_0 \times [0; \tau] \\ \frac{\partial v}{\partial t}(\vec{x}, t) + (\vec{v} \cdot \nabla)v(\vec{x}, t) - \nabla \cdot (\mu_y \nabla v)(\vec{x}, t) = f_v(\vec{x}, t) \\ u|_{\Gamma_0}(\vec{x}, t) = g_u(\vec{x}, t) & v|_{\Gamma_0}(\vec{x}, t) = g_v(\vec{x}, t) \quad \text{sur } \Gamma_0 = \partial\Omega_0, t > 0 \\ u(\vec{x}, 0) = u_0(\vec{x}) & v(\vec{x}, 0) = v_0(\vec{x}) \quad \text{dans } \Omega_0 \end{cases} \quad (\text{I.1})$$

où $u_0, v_0, f_u, f_v, g_u, g_v$ sont des fonctions suffisamment régulières en espace et en temps, les viscosités μ_x et μ_y sont des fonctions en espace et en temps données et éventuellement non régulières.

Par ailleurs, on considère les solutions de (I.1) qui sont à divergence nulle, *i.e.* qui vérifient :

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{I.2})$$

Nous testons une surface gaussienne se déplaçant pour $t \in [0; 1]$ du coin bas-gauche du domaine de calcul $\Omega_0 = [0; 1] \times [0; 1]$ au coin opposé haut droit. On considère de plus que les viscosités sont constantes en espace et en temps : $\mu_x(\vec{x}, t) = \mu_y(\vec{x}, t) \equiv \mu$. Si l'on note :

$$h(x, y, t) = \frac{-(t-x)^2 - (t-y)^2}{\mu}$$

alors la surface gaussienne s'écrit :

$$\vec{v}(x, y, t) = \begin{pmatrix} u(x, y, t) = 10(t-y)e^{h(x, y, t)} \\ v(x, y, t) = 10(x-t)e^{h(x, y, t)} \end{pmatrix} \quad (\text{I.3})$$

Cette surface vérifie le problème (P) pour des conditions aux limites déterminées par la donnée de \vec{v} par (I.3) pour $x = 0, x = 1, y = 0$ et $y = 1$. Les conditions initiales sont définies comme $\vec{v}(x, y, 0)$. Enfin, le vecteur \vec{v} est solution du problème (P) pour les conditions aux limites et les conditions initiales définies précédemment si les seconds membres f_u et f_v sont de la forme :

$$\begin{pmatrix} f_u(x, y, t) \\ f_v(x, y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10e^{h(x, y, t)} \left\{ 1 + \frac{2}{\mu}(t-y)(x+y-2t) + 10(x-t)e^{h(x, y, t)} + 8(t-y) - \frac{4}{\mu}(t-y)(t-x)^2 - \frac{4}{\mu}(t-y)^3 \right\} \\ 10e^{h(x, y, t)} \left\{ -1 + \frac{2}{\mu}(x-t)(x+y-2t) + 10(t-y)e^{h(x, y, t)} + 8(x-t) - \frac{4}{\mu}(x-t)(t-y)^2 - \frac{4}{\mu}(x-t)^3 \right\} \end{pmatrix}$$

On donne une représentation des deux composantes u et v du champ de vitesse au temps $t = 0.5$ pour une viscosité $\mu = 0.1$ sur la Figure 4.9.

Sur les Figures 4.11, 4.13 et 4.15 sont représentés les champs de vitesse $\vec{v} = (u, v)^T$, solution analytique du problème (P) au temps $t = 0.5$ pour les trois viscosités $\mu = 1, \mu = 0.1$ et $\mu = 0.01$.

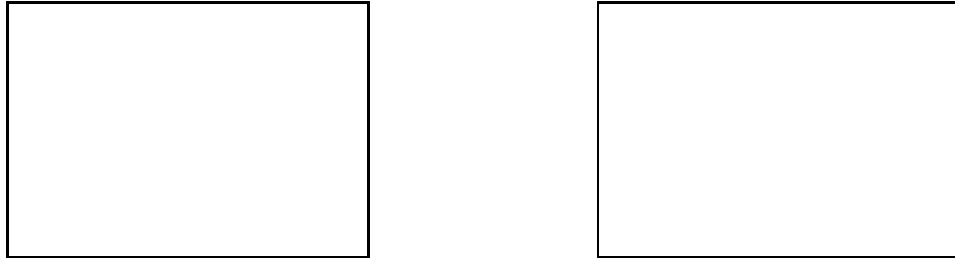


FIG. 4.9 – Première et seconde composante u et v de la solution analytique au temps $t = 0.5$ pour une viscosité $\mu = 0.1$.

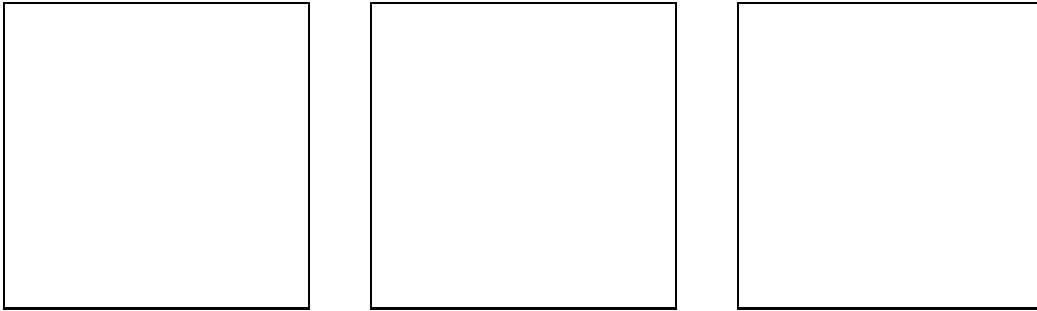


FIG. 4.11 – Solution analytique au temps $t = 0.5$ pour une viscosité $\mu = 1$.

FIG. 4.13 – Solution analytique au temps $t = 0.5$ pour une viscosité $\mu = 0.1$.

FIG. 4.15 – Solution analytique au temps $t = 0.5$ pour une viscosité $\mu = 0.01$.

I.2.2 Discrétisation numérique

Discrétisation temporelle et méthode des volumes finis. Le problème (\mathcal{P}) est discrétisé en temps selon la première étape de la méthode de projection, définie au paragraphe II.2 du chapitre 2. Les flux convectifs sont explicites alors que les flux diffusifs sont implicites. En espace, la discrétisation est assurée par la méthode des volumes finis définie au chapitre 2, paragraphe IV. Les flux convectifs sont estimés par un schéma de décentrement d'ordre élevé ULTRA-QUICK, associé à un limiteur de pente. Les flux diffusifs sont centrés en espace.

Le domaine de calcul initial $\Omega_0 = [0; 1] \times [0; 1]$ est maillé par une grille uniforme en deux dimensions, de pas d'espace $\Delta x = \Delta y = h$ et l'intervalle de temps $[0; 1]$ est divisé en pas de temps constants Δt . Pour nos applications, quatre maillages initiaux sont utilisés : 7×7 de pas $h = 1/7$, 21×21 de pas $h = 1/21$, 63×63 de pas $h = 1/63$ et 189×189 de pas $h = 1/189$. Les pas de temps Δt doivent vérifier la condition de stabilité CFL issue du traitement explicite des flux convectifs. Nous avons choisi une constante de stabilité CFL = 0.5. La résolution des systèmes linéaires issus de la discrétisation en temps et en espace est réalisée par la méthode itérative de Krylov GMRES, préconditionnée par MILU(0).

Méthode de raffinement local multi-niveaux. Dans cet exemple, nous avons choisi une zone de raffinement local centré dans le domaine de calcul. Cette zone de raffinement local permet de vérifier que les conditions aux limites sur la frontière de la grille fine sont correctement imposées. En effet, pour cette zone de raffinement local, aucune frontière du domaine fin n'est commune avec la frontière du domaine de calcul.

Toutes les grilles G_l que nous considérons sont définies par un maillage cartésien. Elles sont carrées, structurées et uniformes de pas constant h_l identique dans chaque direction d'espace. Elles sont définies par leur domaine $\Omega^l =]x_0(l); x_1(l)[\times]y_0(l); y_1(l)[$, $0 \leq l \leq l^*$ avec $\Omega^0 = \Omega =]0; 1[\times]0; 1[$. Le rapport de raffinement est indépendant du niveau de raffinement et est égal à 3.

Nous avons représenté sur la Figure 4.16 une grille initiale G_0 munie de deux niveaux de raffinement $G_1 =]0.25; 0.75[\times]0.25; 0.75[$ et $G_2 =]0.375; 0.625[\times]0.375; 0.625[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$.

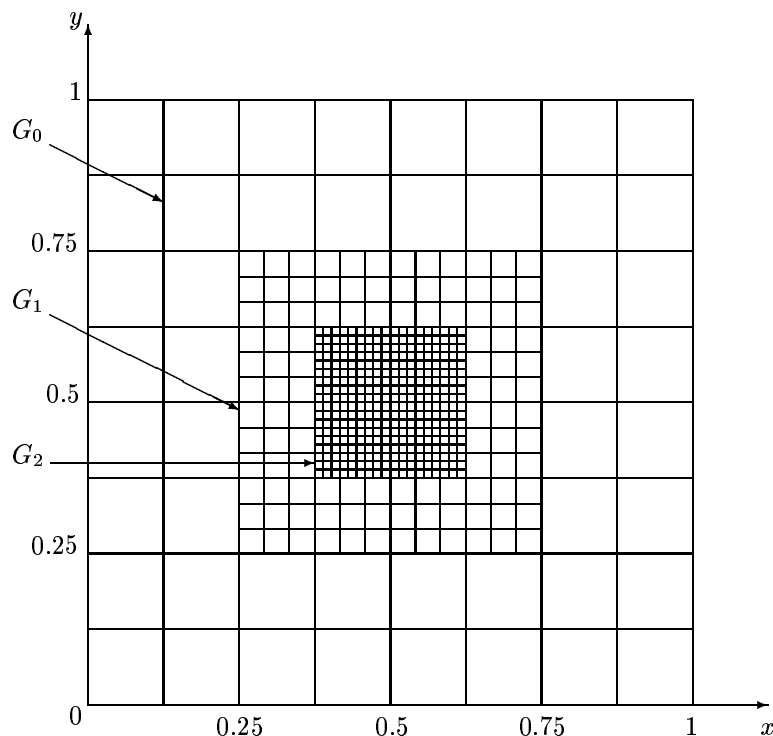


FIG. 4.16 – Grille initiale $G_0 =]0; 1[\times]0; 1[$ et grilles raffinées : $G_1 =]0.25; 0.75[\times]0.25; 0.75[$ et $G_2 =]0.375; 0.625[\times]0.375; 0.625[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$ pour le problème de burgers.

Le résidu de correction en flux de la méthode de raffinement local multi-niveaux porte sur les flux convectifs et diffusifs. Pour la première composante u du champ de vitesse, les flux convectifs sont $\mathcal{F}_c(u) = u \vec{v}$ tandis que les flux diffusifs sont $\mathcal{F}_d(u) = -\nabla u$.

Le résidu de correction en flux pour deux niveaux de grilles s'écrit pour chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ strictement intérieur à la zone de raffinement et centré autour du point $\vec{x} \in G_0$ comme :

$$r_0 (\mathcal{F}_c(u) + \mathcal{F}_d(u)) (\vec{x}) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0((u \vec{v} - \nabla u) \cdot \vec{n}_1)(\vec{x}) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} (u \vec{v} - \nabla u) \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

Les opérateurs de grilles utilisés dans le processus de raffinement local multi-niveaux sont définis pour une inconnue vectorielle au paragraphe I.2 du chapitre 3.

Enfin, l'algorithme de raffinement local multi-niveaux utilisé est l'algorithme II.1 décrit au chapitre 3, paragraphe II.2.

I.2.3 Résultats numériques

Estimation d'erreurs relatives. L'erreur discrète $e_l^k(\varphi)$, associée à une composante du champ de vitesse du problème, $\varphi = u$ ou $\varphi = v$, est définie, sur la grille G_l à l'itération k du cycle FIC, par :

$$e_l^k(\varphi) = T_l(\bar{\varphi}) - \varphi_l^k$$

où $\bar{\varphi}$ désigne la première (ou seconde) composante de la solution analytique, $T_l(\bar{\varphi})$ est la trace de $\bar{\varphi}$ sur G_l et φ_l^k est la première (ou seconde) composante de la solution discrète sur G_l .

Les normes des erreurs discrètes sont estimées pour les volumes de contrôle K_0 de la grille de référence G_0 par :

$$\|e_l^k(\varphi)\|_\infty := \max_{\vec{x} \in K_0} |T_l(\bar{\varphi})(\vec{x}) - \varphi_l^k(\vec{x})| \quad \text{pour la norme } L^\infty \text{ discrète,}$$

$$\|e_l^k(\varphi)\|_2 := \left(\sum_{\vec{x} \in K_0} \text{mes}(K_0) (T_l(\bar{\varphi})(\vec{x}) - \varphi_l^k(\vec{x}))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{pour la norme } L^2 \text{ discrète.}$$

μ	Maillage	Δt	$\ e_r(u)\ _2$	Rapport	$\ e_r(v)\ _2$	Rapport
1	7×7	$2 \cdot 10^{-2}$	0.02609780	–	0.01181630	–
	21×21	$66 \cdot 10^{-4}$	0.00868976	3.00	0.00496647	2.38
	63×63	$22 \cdot 10^{-4}$	0.00294582	2.95	0.00186275	2.67
	189×189	$74 \cdot 10^{-5}$	0.00099032	2.97	0.00064896	2.87
0.1	7×7	$5 \cdot 10^{-2}$	0.16288300	–	0.19217100	–
	21×21	$16 \cdot 10^{-3}$	0.04448140	3.66	0.05690430	3.38
	63×63	$55 \cdot 10^{-4}$	0.01808410	2.46	0.01821400	3.12
	189×189	$18 \cdot 10^{-4}$	0.00610212	2.96	0.00602679	3.02
0.01	7×7	10^{-1}	2.32822000	–	2.76736000	–
	21×21	$33 \cdot 10^{-3}$	0.31134600	7.48	0.32109300	8.62
	63×63	$11 \cdot 10^{-3}$	0.10376400	3.00	0.10669000	3.00
	189×189	$37 \cdot 10^{-4}$	0.03537490	2.93	0.03604770	2.96

TAB. 4.4 – Erreurs relatives en norme L^2 discrète entre la solution analytique et la solution numérique au temps $t = 0.5$ pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 pour trois viscosités $\mu = 1$, $\mu = 0.1$ et $\mu = 0.01$.

En particulier, pour le champ de vecteur $\vec{v} = (u, v)^T$, les normes L^∞ et L^2 discrètes de l'erreur s'écrivent :

$$\|e_l^k(\vec{v})\|_\infty := \max(\|e_l^k(u)\|_\infty, \|e_l^k(v)\|_\infty)$$

$$\|e_l^k(\vec{v})\|_2 := \sqrt{\|e_l^k(u)\|_2^2 + \|e_l^k(v)\|_2^2}$$

Les normes L^∞ ou L^2 discrètes des erreurs relatives associées à la première (ou seconde) composante φ de la solution analytique et calculées sur la grille de référence G_0 sont :

– Pour une grille sans zoom :

$$\|e_r(\varphi)\| = \frac{\|e_{l=0}(\varphi)\|}{\|T_{l=0}(\bar{\varphi})\|}$$

– Pour une grille avec zoom avec k^* cycles de raffinement :

$$\|e_r^{k=k^*}(\varphi)\| = \frac{\|e_{l=0}^{k=k^*}(\varphi)\|}{\|T_{l=0}(\bar{\varphi})\|}$$

Résultats numériques pour des maillages monogrilles. Le tableau 4.4 détaille les normes L^2 discrètes des erreurs relatives entre la trace de la solution analytique sur le maillage et la solution numérique calculée au temps $t = 0.5$ pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 pour les trois différentes valeurs de la viscosité $\mu = 1$, $\mu = 0.1$ et $\mu = 0.01$. Pour tous les maillages, la condition de stabilité est imposée à $CFL = 0.5$.

Nous pouvons interpréter les résultats du Tableau 4.4 comme suit :

- Pour une viscosité $\mu = 1$, et pour des CFL équivalents, on note que, pour chacun des maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 , les erreurs relatives sont faibles et la solution numérique représente donc correctement la solution analytique sur ces maillages. Par ailleurs, la décroissance des erreurs relatives suivant les maillages tendant vers 3, on en déduit que la précision de la méthode numérique de discrétisation en espace est environ d'ordre 1.
- Pour des CFL encore équivalents mais pour une viscosité $\mu = 0.1$, la décroissance des erreurs relatives tend encore vers 3, confirmant notre assertion. Toutefois, le maillage 7×7 ne capture plus correctement le tourbillon. Il est à noter cependant que la norme de la solution analytique décroît avec la viscosité μ et que l'erreur relative est le rapport entre la norme de l'erreur commise et la norme de la solution analytique. Avec cette viscosité, la norme L^2 discrète de la solution analytique au temps $t = 0.5$ est de l'ordre de 10^{-2} .

Maillage	$\ e(u)\ _\infty$	Rapport	$\ e(v)\ _\infty$	Rapport	$\ e(\vec{v})\ _\infty$	Rapport
7×7	0.3255130	—	0.5596550	—	0.5596550	—
21×21	0.1489950	2.18	0.1729780	3.25	0.1729780	3.25
63×63	0.0533683	2.79	0.0613349	2.82	0.0613349	2.82
189×189	0.0180820	2.95	0.0208626	2.94	0.0208626	2.94

TAB. 4.5 – Erreurs en norme L^∞ discrète entre la solution analytique et la solution numérique au temps $t = 0.5$ pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 pour une viscosité $\mu = 0.01$

Maillage	$\ e(u)\ _2$	Rapport	$\ e(v)\ _2$	Rapport	$\ e(\vec{v})\ _2$	Rapport
7×7	0.07413600	—	0.08811920	—	0.1151570	—
21×21	0.01951070	3.80	0.02012150	4.38	0.0280275	4.11
63×63	0.00650244	3.00	0.00668583	3.00	0.0093264	3.00
189×189	0.00221679	2.93	0.00225896	2.96	0.0031650	2.95

TAB. 4.6 – Erreurs en norme L^2 discrète entre la solution analytique et la solution numérique au temps $t = 0.5$ pour les maillages 7×7 , 21×21 , 63×63 et 189×189 pour une viscosité $\mu = 0.01$.

– Enfin, pour une viscosité $\mu = 0.01$, sur l'ensemble des maillages, les erreurs relatives ne sont plus véritablement significatives dans la mesure où la norme L^2 de la solution analytique est de l'ordre de $3 \cdot 10^{-2}$ au temps $t = 0.5$. En conséquence, les tableaux 4.5 et 4.6 donnent les erreurs en norme L^∞ et L^2 discrète entre la trace de la solution analytique et la solution numérique calculée sur les différents maillages.

Sur les Tableaux 4.5 et 4.6, on observe que l'erreur en norme L^∞ discrète et L^2 discrète du champ de vitesse diminue suivant le pas de maillage avec un rapport de l'ordre de 3. Clairement, le maillage 21×21 est insuffisamment fin pour représenter le tourbillon, solution de notre problème. Par ailleurs, le maillage 63×63 , avec une erreur $\|e(\vec{v})\|_2 = 0.0164986$, donne une bonne précision numérique. L'idée est d'obtenir une précision, pour le maillage 21×21 , équivalente au maillage 63×63 par un raffinement local de maillage.

Résultats numériques pour des maillages avec raffinement local multi-niveaux. Les différents niveaux de la zone de raffinement du maillage considérée sont données par la Figure 4.16. Le Tableau 4.7 détaille les erreurs en normes L^∞ et L^2 discrètes pour les composantes u et v du champ de vitesse au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$ pour le maillage 21×21 avec un pas de temps $\Delta t = 33 \cdot 10^{-3}$, pour le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement et un pas de temps $\Delta t = 11 \cdot 10^{-3}$, pour le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement et un pas de temps $\Delta t = 37 \cdot 10^{-4}$, pour le maillage 63×63 avec un pas de temps $\Delta t = 11 \cdot 10^{-3}$ et pour le maillage 189×189 avec un pas de temps $\Delta t = 37 \cdot 10^{-4}$. Nous avons conservé la même condition de stabilité CFL = 0.5 pour l'ensemble des résultats présentés.

Le Tableau 4.7 nous renseigne sur les améliorations de la précision numérique du raffinement local. En effet, un premier niveau de raffinement donne une précision numérique pour un maillage initial 21×21 équivalente au maillage global 63×63 . Il suffit de comparer les normes L^2 discrète de l'erreur entre la solution analytique et le champ de vitesse calculé : $\|e(\vec{v})\|_2 = 0.0101977$ pour le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement et $\|e(\vec{v})\|_2 = 0.0093264$ pour le maillage 63×63 . En prenant un niveau de raffinement maximum $l^* = 2$, la norme L^2 discrète de l'erreur entre la solution analytique et le champ de vitesse calculé est encore améliorée, passant à $\|e(\vec{v})\|_2 = 0.0055830$. Toutefois, si le rapport entre la norme L^2 discrète de l'erreur du maillage 21×21 et le même maillage avec un niveau de raffinement est de 2.75, il n'est que de 1.83 entre un niveau de raffinement et deux niveaux de raffinement pour le maillage 21×21 . Nous observons alors deux points importants : une diminution de l'erreur commise grâce au processus de raffinement local multi-niveaux et un seuil minimum d'erreur à maillage donné. Ce phénomène de saturation avait déjà été observé pour le problème elliptique avec singularité à l'origine au paragraphe I.1 de ce même chapitre.

	Δt	$\ e(u)\ _\infty$	$\ e(v)\ _\infty$	$\ e(u)\ _2$	$\ e(v)\ _2$	$\ e(\vec{v})\ _2$
21×21	$33 \cdot 10^{-3}$	0.1489950	0.1729780	0.01951070	0.02012150	0.0280275
$21 \times 21 / l^* = 1$	$11 \cdot 10^{-3}$	0.0584282	0.0554552	0.00729648	0.00712426	0.0101977
$21 \times 21 / l^* = 2$	$37 \cdot 10^{-4}$	0.0306394	0.0266354	0.00409597	0.00379386	0.0055830
63×63	$11 \cdot 10^{-3}$	0.0533683	0.0613349	0.00650244	0.00668583	0.0093264
189×189	$37 \cdot 10^{-4}$	0.0180820	0.0208626	0.00221679	0.00225896	0.0031650

TAB. 4.7 – Erreurs en normes L^∞ et L^2 discrètes au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$ entre la solution analytique et les deux composantes u et v de la solution numérique pour le maillage 21×21 , le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement, le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement, le maillage 63×63 et le maillage 189×189 .

Les Figures suivantes 4.18 à 4.24 représentent la distribution spatiale des erreurs en norme L^∞ pour la première composante u du champ de vitesse au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$ pour un maillage donné 21×21 , le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement local, le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement local et le maillage 63×63 .

FIG. 4.18 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante u pour le maillage 21×21 sans raffinement local au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(u)\|_\infty = 0.148995$.

FIG. 4.20 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante u pour le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement local au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(u)\|_\infty = 0.0584282$.

FIG. 4.22 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante u pour le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement local au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(u)\|_\infty = 0.0306394$.

FIG. 4.24 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante u pour le maillage 63×63 au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(u)\|_\infty = 0.0533683$.

D'après les Figures 4.18 à 4.24, nous observons que l'erreur maximale diminue avec le processus de raffinement. De plus, plus le niveau maximum est important, plus l'erreur commise est propagée dans le domaine de calcul.

Les Figures suivantes 4.26 à 4.32 représentent la distribution spatiale des erreurs en norme L^∞ pour la seconde composante v du champ de vitesse au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$ pour un maillage donné 21×21 , le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement local, le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement local et le maillage 63×63 .

Pour la seconde composante v , nous notons que l'erreur commise au temps $t = 0.5$ est localisée dans la zone où se situe le tourbillon, c'est ce que montre la Figure 4.26. Le processus de raffinement local diminue le maximum de l'erreur commise, comme observé pour la première composante du champ de vitesse. En diminuant cette erreur maximum, le processus de raffinement local transmet cette erreur dans une zone plus vaste du domaine de calcul.

En conclusion, nous constatons une bonne convergence au maillage dans le cas monogrille, pour

FIG. 4.26 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante v pour le maillage 21×21 sans raffinement local au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(v)\|_\infty = 0.172978$.

FIG. 4.28 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante v pour le maillage 21×21 avec un niveau de raffinement local au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(v)\|_\infty = 0.0554552$.

FIG. 4.30 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante v pour le maillage 21×21 avec deux niveaux de raffinement local au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(v)\|_\infty = 0.0266354$.

FIG. 4.32 – Erreur en norme L^∞ discrète pour la composante u pour le maillage 63×63 au temps $t = 0.5$ et pour une viscosité $\mu = 0.01$. $\|e(v)\|_\infty = 0.0613349$.

trois valeurs de la viscosité et à une condition de stabilité CFL donnée, $CFL = 0.5$. Dans le cas multi-niveaux, il est clair que le processus de raffinement local améliore la précision numérique dans les régions concernées. Nous l'avons observé avec la diminution du maximum de l'erreur commise pour la première composante du champ de vitesse, mais aussi pour la seconde composante. Cette diminution semble tendre vers un seuil minimal, dépendant du maillage initial. Enfin, la diminution du maximum de l'erreur commise s'accompagne d'une transmission de cette erreur dans le domaine de calcul.

Cet exemple valide donc la méthode de raffinement local multi-niveaux dans le cas d'une équation instationnaire de convection-diffusion d'une inconnue vectorielle. On note également que cet exemple illustre les opérateurs de grilles, et en particulier l'opérateur de prolongement à la frontière. En effet, dans cet exemple, les zones de raffinement sont strictement à l'intérieur du domaine de calcul.

Nous sommes alors en mesure d'étudier le comportement de la méthode de raffinement local multi-niveaux pour des problèmes plus complexes et en particulier dédiés au faible nombre de Mach, qui reste l'un des objets de notre étude.

II Validation de la méthode de raffinement local multi-niveaux pour des problèmes à faible nombre de Mach

II.1 Problème hydrodynamique instationnaire à masse volumique variable

Nous présentons dans ce paragraphe un problème hydrodynamique instationnaire à masse volumique variable. Ce problème a été proposé dans un cas stationnaire par De Lange et De Goey [18]. Nous avons construit son analogue instationnaire pour tester la précision en temps de la méthode de projection élaborée pour les écoulements à faible nombre de Mach et pour s'assurer de l'amélioration de la précision spatiale en utilisant la méthode de raffinement local multi-niveaux. Les résultats présentés ci-après ont fait l'objet d'une publication soumise à *Mathematics and Computers in Simulation* [17].

II.1.1 Position du problème

Géométrie et conditions aux limites. Supposons que la température $T(\vec{x}, t)$ soit donnée *a priori*. Le problème bidimensionnel (\mathcal{P}) à résoudre est le système d'équations de bilan de Navier-Stokes à faible nombre de Mach. Pour un fluide Newtonien, il s'écrit sur le domaine Ω dans l'intervalle de temps $[0; \tau]$:

Trouver (\vec{v}, P_1) de $\Omega \times [0; \tau]$ dans, respectivement, \mathbb{R}^2 et \mathbb{R} tels que :

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \\ \frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id} \right) \end{cases}$$

où \vec{v} est le champ de vitesse, P_1 est la pression dynamique, $\mu = \mu(\rho) > 0$ est la viscosité dynamique et γ est le rapport des chaleurs spécifiques.

De plus, si le domaine physique Ω est connecté à l'atmosphère, alors la masse volumique ρ est connue *a priori* : $\rho = \rho(\vec{x}, t) \geq \rho_0 > 0$.

Nous considérons la condition initiale suivante pour le champ de vitesse :

$$\vec{v}(\vec{x}, 0) = \vec{v}_0$$

Par ailleurs, la frontière du domaine physique $\partial\Omega$ est supposée être la réunion d'un nombre fini de parties, chacune des parties étant associée avec une condition aux limites d'un type donné *a priori* :

- injection : $\rho \vec{v} = (\rho \vec{v})_q$;
- éjection : $P_1 = 0, \vec{v} \cdot \vec{t} = 0$;
- symétrie : $\nabla (\vec{v} \cdot \vec{t}) \cdot \vec{n} = 0, \vec{v} \cdot \vec{n} = 0$.

où \vec{n} et \vec{t} représentent respectivement les vecteurs normal et tangent unitaires extérieurs.

On considère un domaine de calcul Ω_0 carré $[0; 0.1\text{m}] \times [0; 0.1\text{m}]$ et les conditions aux limites telles qu'elles sont présentées sur la Figure 4.33.

Paramètres numériques. La température $T(\vec{x}, t)$ est donnée en temps et en espace, et reproduit schématiquement les conditions d'un problème de combustion :

$$T(\vec{x}, t) = \begin{cases} 300(1 + 2 \exp(\kappa(r^2(t)/r_0^2 - 1))) & \text{si } r^2(t) \leq r_0^2, \\ 300(5 - 2 \exp(\kappa(1 - r^2(t)/r_0^2))) & \text{sinon.} \end{cases}$$

où $\kappa = 25$, $r_0 = 0.05$ m, $r^2(t) = x^2(t) + y^2$ avec :

$$x(t) = \begin{cases} 5x/2 & \text{si } 0 \leq t \leq 1, \\ 5x/(3t - 1) & \text{si } 1 \leq t \leq 2, \\ x & \text{sinon.} \end{cases}$$

La masse volumique ρ est alors donnée comme une fonction du temps et de l'espace selon la loi d'état des gaz parfaits :

$$\rho(\vec{x}, t) = \frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R}_u T(\vec{x}, t)}$$

FIG. 4.33 – Géométrie et conditions aux limites.

FIG. 4.34 – Evolution de la masse volumique au cours du temps au point $P(0.025 \text{ m}; 0.025 \text{ m})$.

Nous avons représenté sur la Figure 4.34 l'évolution de la masse volumique au cours du temps pour le point $P(0.025\text{m}; 0.025\text{m})$.

La viscosité dynamique μ suit la loi suivante :

$$\mu(\vec{x}, t) = \mu_{\text{ref}} \left(\frac{T(\vec{x}, t)}{1500} \right)^\gamma$$

où la viscosité de référence est donnée par $\mu_{\text{ref}} = 4.79 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}^{-1}$, et le rapport des chaleurs spécifiques est $\gamma = 0.77$.

La condition aux limites d'injection se traduit pour le champ de vitesse par :

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} 0.25(1 - y^2/0.0025) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

Le fluide est supposé être initialement au repos : $\vec{v}(\vec{x}, 0) = \vec{0}$.

II.1.2 Discrétisation numérique

Discrétisation temporelle et méthode des volumes finis. La discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach est réalisée par une méthode de projection. Dans une étape de prédiction, le champ de vitesse intermédiaire est calculé en résolvant l'équation de bilan de quantité de mouvement avec un schéma d'Euler implicite. Dans cette évaluation, nous tenons compte du gradient de pression dynamique conduisant ainsi à une méthode de projection incrémentale. Les flux convectifs sont traités explicitement en temps. Cette étape correspond alors à un système linéaire d'équations d'advection-diffusion. Cette estimation explicite des flux convectifs nous permet facilement d'utiliser une stratégie de limiteur de flux, nous assurant de fait qu'aucune oscillation non physique n'apparaît lors du calcul. Toutefois, nous devons satisfaire une condition de stabilité CFL. Dans l'étape de correction, nous projetons le champ de vitesse prédit sur l'espace des champs de vitesse vérifiant l'équation de bilan de masse. Cette étape est effectuée en résolvant une équation de Poisson pour obtenir la pression dynamique. La semi-discrétisation en temps s'écrit alors :

(i) **Advection-Diffusion du champ de vitesse (AD)**

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} - \rho^n \vec{v}^n) + \nabla \cdot (\rho^n \vec{v}^n \vec{v}^n) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1^n \\ \quad = \nabla \cdot \left(\mu^{n+1} (\nabla \tilde{v}^{n+1} + \nabla \tilde{v}^{n+1\text{T}}) - \frac{2}{3} \mu^{n+1} (\nabla \cdot \tilde{v}^{n+1}) \text{Id} \right) \quad , \text{ dans } \Omega \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} = (\rho \vec{v})_{\text{q}} ; \text{ éjection : } P_1^n = 0, \tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{t} = 0 ; \\ \text{symétrie : } \nabla(\tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{t}) \cdot \vec{n} = 0, \tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{n} = 0. \end{array} \right. \quad , \text{ sur } \partial\Omega$$

(ii) estimation de la Pression dynamique et Correction du champ de vitesse (PC)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t} (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} - \rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} (\nabla P_1^{n+1} - \nabla P_1^n) = 0 \\ \nabla \cdot (\rho^{n+1} \vec{v}^{n+1}) = \frac{-1}{\Delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n) \\ \text{injection : } \rho^{n+1} \vec{v}^{n+1} \cdot \vec{n} = \rho^{n+1} \tilde{v}^{n+1} \cdot \vec{n} ; \text{ éjection : } P_1^{n+1} = 0 ; \\ \text{symétrie : } \nabla P_1^{n+1} \cdot \vec{n} = 0. \end{array} \right. \begin{array}{l} , \text{ dans } \Omega \\ \\ , \text{ sur } \partial\Omega \end{array}$$

Une méthode de volumes finis sur maillage décalé de type MAC est utilisée pour la discrétisation spatiale. Les flux convectifs sont calculés avec un schéma de décentrement d'ordre 3 : le schéma QUICK développé par Hayase *et al.* [28], avec un limiteur de flux ULTRA introduit par Leonard [40]. Nous obtenons ainsi un schéma préservant la positivité et la monotonie, tel que l'a montré Huynh [30]. Enfin, un schéma centré d'ordre 2 est utilisé pour discrétiser en espace les flux diffusifs, e.g. [44].

Méthode de raffinement local multi-niveaux. Dans ce problème, nous cherchons à représenter plus précisément le phénomène d'injection de fluide et l'accélération du champ de vitesse au voisinage du gradient de température.

Toutes les grilles G_l que nous considérons sont définies par un maillage cartésien. Elles sont carrées, structurées et uniformes, de pas constant h_l identique dans chaque direction d'espace. Elles sont définies par leur domaine $\Omega^l =]0; x_0(l)[\times]0; y_0(l)[$, $0 \leq l \leq l^*$ avec $\Omega^0 =]0; 0.1 \text{ m}[\times]0; 0.1 \text{ m}[$. Le rapport de raffinement r est indépendant du niveau de raffinement et est égal à 3.

Nous avons représenté sur la Figure 4.35 une grille initiale G_0 munie d'un niveau de raffinement $G_1 =]0; 0.06 \text{ m}[\times]0; 0.06 \text{ m}[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$.

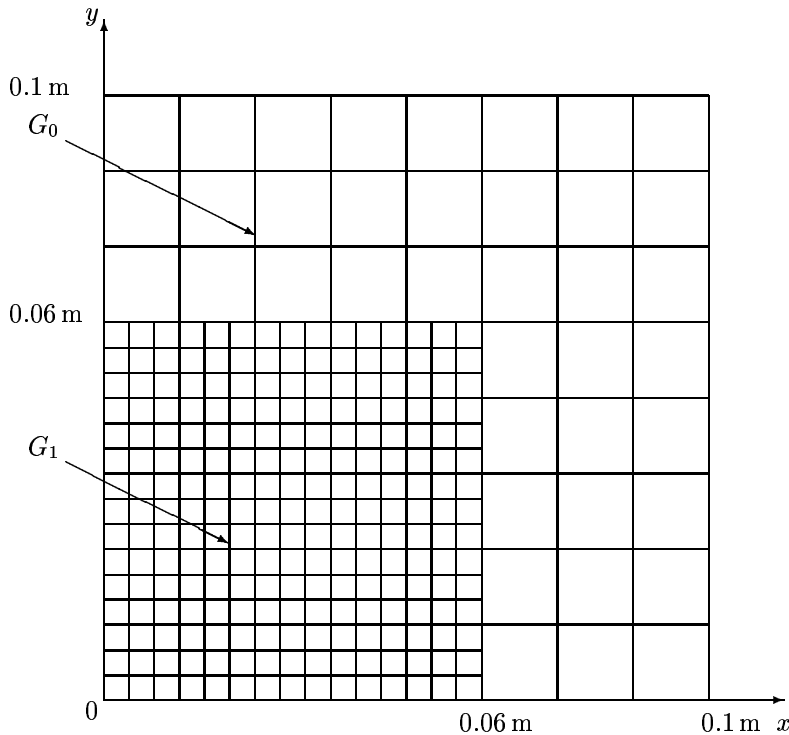


FIG. 4.35 – Grille initiale $G_0 =]0; 0.1 \text{ m}[\times]0; 0.1 \text{ m}[$ et grille raffinée $G_1 =]0; 0.06 \text{ m}[\times]0; 0.06 \text{ m}[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$ pour le problème hydrodynamique instationnaire avec masse volumique variable.

Si \mathcal{F} représente les flux convectifs et diffusifs de l'équation de bilan de quantité de mouvement, *i.e.*

$$\mathcal{F}(\vec{v}) = -\rho \vec{v} \vec{v} + \mu \left(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T \right) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id}$$

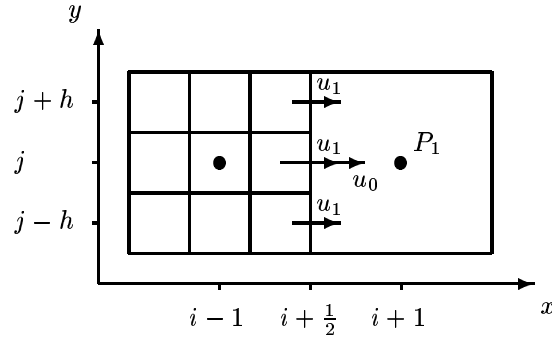


FIG. 4.37 – Grille décalée bidimensionnelle montrant les nœuds utilisés pour le calcul des opérateurs de grilles.

Opérateur de restriction. A l'étape de restriction, nous transmettons le champ de vitesse estimé sur la grille fine aux points grossiers $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ par :

$$(u_0)_{i+\frac{1}{2}, j} = \widehat{R}_1^0(u_1) := \frac{\sum_{\bar{j} \in \{j-h; j; j+h\}} |\Gamma_{1, \bar{j}}| (\rho_1)_{i+\frac{1}{2}, \bar{j}} (u_1)_{i+\frac{1}{2}, \bar{j}}}{|\Gamma_{0, j}| (\rho_0)_{i+\frac{1}{2}, j}}$$

où $|\Gamma_{0, j}|$ et $|\Gamma_{1, \bar{j}}|$ sont les mesures des faces des volumes de contrôle des grilles grossière et fine.

Contraintes sur les opérateurs de grilles. Tous les opérateurs utilisés sont construits de telle sorte qu'ils vérifient le bilan de masse après leur application. En effet, si nous vérifions que :

$\forall \vec{x} \in G_0$ tel que $K_0(\vec{x}) \in \Omega_0 \cap \Omega_1$:

$$\int_{K_0(\vec{x})} \rho = \sum_{K_1(\vec{x}) \subset K_0(\vec{x})} \int_{K_1(\vec{x})} \rho$$

$\forall \vec{x} \in G_0$ tel que $\Gamma_0(\vec{x}) \in \bar{\Omega}_0 \cap \bar{\Omega}_1$ avec $\Gamma_0(\vec{x}) \subset \partial K_0(\vec{x})$:

$$\oint_{\Gamma_0(\vec{x})} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} = \sum_{\gamma_1(\vec{x}) \subset \Gamma_0(\vec{x})} \oint_{\gamma_1(\vec{x})} \rho \vec{v} \cdot \vec{n}$$

Alors par définition des opérateurs de grille, nous sommes assurés que les bilans de masse sur la grille fine G_1 et sur la grille grossière G_0 sont vérifiés, *i.e.* pour tout $K_1(\vec{x}) \in \Omega_1$:

$$\int_{K_1(\vec{x})} \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \sum_{\gamma_1(\vec{x}) \subset \partial K_1(\vec{x})} \oint_{\gamma_1(\vec{x})} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{II.4})$$

et pour tout $K_0(\vec{x}) \in \Omega_0$:

$$\int_{K_0(\vec{x})} \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \sum_{\Gamma_0(\vec{x}) \subset \partial K_0(\vec{x})} \oint_{\Gamma_0(\vec{x})} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{II.5})$$

La première relation (II.4) est nécessaire pour qu'il existe une solution au problème de Poisson de la grille fine, puisque des conditions de Neumann homogène sont imposées sur toute la frontière de la grille fine. La seconde relation (II.5) assure que le bilan de masse est satisfait après la restriction.

II.1.3 Résultats numériques

Résultats numériques pour des maillages monogrilles. Les Figures 4.38 et 4.39 montrent respectivement le champ de vitesse à l'état stationnaire ($t = 3$ s) pour le maillage 21×21 et la pression dynamique à l'état stationnaire pour le maillage 63×63 .

La convergence au maillage pour la première composante du champ de vitesse à l'état stationnaire est réalisée pour les maillages 21×21 , 63×63 et le maillage de référence 189×189 , elle est présentée

FIG. 4.38 – Champ de vitesse à l'état stationnaire.

FIG. 4.39 – Pression dynamique à l'état stationnaire.

FIG. 4.40 – Profils de la composante horizontale du champ de vitesse à l'état stationnaire en $x = 0.025$ m pour les maillages : --- 21×21 , 63×63 , ——— 189×189 (référence).

sur les Figures 4.40 et 4.41. Les oscillations apparaissant sur le profil de la première composante du champ de vitesse pour le maillage 21×21 de la Figure 4.41 sont dues à une mauvaise représentation du champ de masse volumique.

La convergence au pas de temps, présentée sur la Figure 4.42, montre l'évolution de la première composante du champ de vitesse au cours du temps au point $P(0.025 \text{ m}; 0.025 \text{ m})$ pour le maillage 63×63 pour le pas de temps $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ s.

Résultats numériques pour des maillages avec raffinement local multi-niveaux. Sur la Figure 4.43, les profils de la première composante du champ de vitesse à l'état stationnaire en $x = 0.025$ m et $x = 0.075$ m sont présentés pour les différents maillages de cette étude. La solution grossière du maillage 21×21 est plus proche de la solution de référence pour les deux coupes considérées. Dans la zone de raffinement, la solution fine du maillage 21×21 et la solution de référence sont superposées.

En conclusion, la discrétisation numérique proposée pour le système d'équations de Navier-Stokes (méthode de projection incrémentale et méthode de volumes finis) est robuste et précise. La précision de la solution numérique est grandement améliorée à l'aide de la méthode de raffinement local multi-niveaux. Dans ce problème, nous avons développé des opérateurs de grilles qui vérifient l'équation de bilan de masse. Cette propriété est souhaitable quand, par exemple, une équation de bilan d'un scalaire passif est traitée en plus du problème hydrodynamique. Nous signalons les deux points importants relatifs à l'étude de la méthode numérique pour le problème hydrodynamique

FIG. 4.41 – Profils de la composante horizontale du champ de vitesse à l'état stationnaire en $x = 0.075$ m pour les maillages : --- 21×21 , 63×63 , ——— 189×189 (référence).

FIG. 4.42 – Evolution de la première composante du champ de vitesse au cours du temps au point $P(0.025 \text{ m}; 0.025 \text{ m})$ pour le maillage 63×63 pour les pas de temps $\Delta t = 10^{-3}$ s et $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ s.

(a) En $x = 0.025$ m

(b) En $x = 0.075$ m

FIG. 4.43 – Profils de la première composante du champ de vitesse à l'état stationnaire pour les maillages : --- 21×21 , - - - solution grossière du maillage raffiné 21×21 , ——— 189×189 , solution fine du maillage raffiné 21×21 (uniquement pour $x = 0.025$ m).

instationnaire à masse volumique variable :

- dans les zones de raffinement, la précision de la solution grossière du maillage raffiné est améliorée en comparaison du maillage de référence. De plus, la solution fine du maillage raffiné et la solution de référence sont superposées ;
- en dehors des zones de raffinement, la technique de correction en flux et la restriction de la solution fine sur le maillage grossier de la méthode de raffinement local multi-niveaux améliorent notablement la précision de la solution grossière du maillage raffiné en comparaison du maillage de référence.

II.2 Problème de la convection naturelle à faible nombre de Mach

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons au problème de la convection naturelle à faible nombre de Mach. Nous comparons tout d'abord les résultats du modèle à faible nombre de Mach avec ceux d'un modèle incompressible avec une approximation de Boussinesq [19, 20], quand la différence de température entre la paroi chaude et la paroi froide est faible. Puis, pour de plus grandes variations de température où l'approximation de Boussinesq n'est plus valable (voir Gray et Giorgini [23]), nous comparons les résultats obtenus avec ceux récemment proposés avec le même modèle par Paillère et Le Quéré [43].

II.2.1 Position du problème

Géométrie et conditions aux limites. Le problème de la convection naturelle représente l'écoulement d'un fluide, similaire à de l'air, induit par une différence de température entre deux parois verticales chaude et froide dans une cavité carrée. La force motrice de ce problème est la gravité $\rho \vec{g}$.

Le problème bidimensionnel (\mathcal{P}) correspond au système d'équations de bilan de la masse volumique, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec la loi d'état des gaz parfaits, établi au paragraphe VII du chapitre 1. Pour un fluide Newtonien, le problème (\mathcal{P}) s'écrit sur le domaine $\Omega = [0; 1] \times [0; 1]$ dans l'intervalle de temps $[0; \tau]$:

Trouver $(\rho, \vec{v}, P_1, T, P_0)$ de $\Omega \times [0; \tau]$ dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ tels que :

$$(\mathcal{P}) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \\ \frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left((\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id} \right) + \frac{1}{\text{Fr}^2} (\rho - \rho_0) \vec{g} \\ \frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho T \vec{v}) = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \frac{dP_0}{dt} + \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T \\ P_0 = \rho T \end{array} \right.$$

où ρ est la masse volumique, \vec{v} le champ de vitesse, P_1 la pression dynamique, T la température, P_0 la pression thermodynamique, ρ_0 la masse volumique moyenne sur le domaine Ω , $\rho \vec{g}$ représente la force de gravité, γ est le rapport des chaleurs spécifiques, Re est le nombre de Reynolds, Fr le nombre de Froude et Pr le nombre de Prandtl.

La pression thermodynamique $P_0(t)$ obéit à une équation différentielle ordinaire, issue de l'équation de bilan de masse volumique, d'énergie et de la loi d'état, tel que montré au paragraphe V.2 du chapitre 1 :

$$\frac{1}{\gamma} \frac{dP_0}{dt} + P_0 \nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 T$$

Toutefois, il s'avère qu'estimer numériquement la pression thermodynamique avec cette équation ne garantit pas la conservation de la masse.

Pour remédier à cette difficulté, nous substituons cette équation par une contrainte traduisant la stricte conservation de la masse :

$$P_0 = \frac{m_0}{\int_{\Omega} \frac{1}{T}} \quad (\text{II.6})$$

où m_0 est la masse initiale contenue dans la cavité. Cette équation est simplement l'intégrale de la loi d'état sur tout le domaine Ω .

Nous supposons que le fluide est initialement au repos et à la température $T_{\text{ref}} = 600 \text{ K}$.

Les conditions aux limites sont les suivantes :

- une condition de non-adhérence à la paroi est imposée sur toute la frontière de la cavité : $\vec{v}|_{\Gamma} = \vec{0}$;
- les deux parois verticales sont différentiellement chauffées : la paroi de gauche est à la température $T_c = T_{\text{ref}}(1 + \varepsilon)$ et la paroi de droite est à la température $T_f = T_{\text{ref}}(1 - \varepsilon)$. La différence de température entre les deux parois est donc de $\Delta T = 2\varepsilon T_{\text{ref}}$;

- les deux parois horizontales sont considérées adiabatiques : $\frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0$, avec \vec{n} le vecteur directeur unitaire de la normale extérieure.

Sur la Figure 4.44 sont rappelées la géométrie du problème et les conditions aux limites.

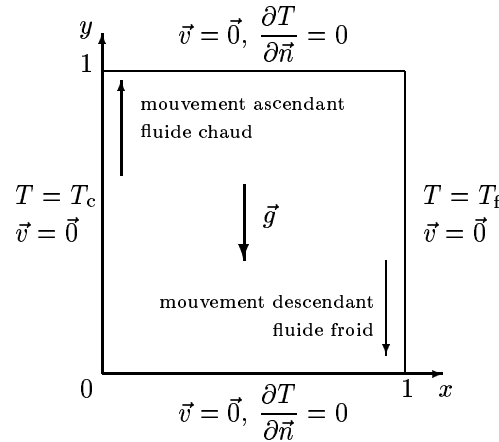


FIG. 4.44 – Géométrie et conditions aux limites.

Ordres de grandeur et paramètres numériques. Les nombres sans dimension apparaissant dans le problème (\mathcal{P}) sont les suivants :

- $\text{Re} = \frac{\rho_{\text{ref}} \|\vec{v}_{\text{ref}}\| L_{\text{ref}}}{\mu_{\text{ref}}}$ est le nombre de Reynolds ;
- $\text{Pr} = \frac{\mu_{\text{ref}} c_{p,\text{ref}}}{\lambda_{\text{ref}}}$ est le nombre de Prandtl ;
- $\text{Fr} = \frac{\|\vec{v}_{\text{ref}}\|}{\sqrt{L_{\text{ref}} \|\vec{g}_{\text{ref}}\|}}$ est le nombre de Froude.

Dans ce problème, le nombre sans dimension qui caractérise l'écoulement est le nombre de Rayleigh, qui pour un fluide compressible s'écrit :

$$\text{Ra} = \text{Pr} \frac{\|\vec{g}_{\text{ref}}\| \rho_{\text{ref}}^2 (T_c - T_f) L_{\text{ref}}^3}{T_{\text{ref}} \mu_{\text{ref}}^2} \quad (\text{II.7})$$

Ce nombre compare les effets des forces de gravité, qui induisent le mouvement du fluide dû au gradient de température, aux effets dissipatifs (diffusion visqueuse et diffusion thermique), qui luttent contre ce mouvement.

Dans notre système d'équations de bilan, ce nombre n'apparaît pas. De plus, aucune vitesse de référence n'est disponible. Suivant le procédé de Paillère et Le Quéré [43], nous relierons les nombres de Reynolds et de Rayleigh de la façon suivante :

$$\text{Re} = \text{Ra}^{\frac{1}{2}}$$

De ce fait, nous choisissons pour vitesse de référence :

$$\|\vec{v}_{\text{ref}}\| = \text{Ra}^{\frac{1}{2}} \frac{\mu_{\text{ref}}}{\rho_{\text{ref}} L_{\text{ref}}}$$

Le fluide est initialement au repos dans une cavité à pression atmosphérique $P_0 = 101325 \text{ Pa}$ et à la température $T_{\text{ref}} = 600 \text{ K}$. Par conséquent, la loi d'état des gaz parfaits nous donne une masse volumique de référence $\rho_{\text{ref}} = 0.588 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, avec la constante des gaz parfaits $\mathcal{R} = 287 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Comme précisé précédemment, nous considérons un fluide similaire à de l'air, ce qui se traduit par la valeur du nombre de Prandtl suivante : $\text{Pr} = 0.71$.

La viscosité dynamique de référence de l'air est $\mu_{\text{ref}} = 1.681 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, la chaleur spécifique à pression constante de référence est $c_{p,\text{ref}} = \gamma \mathcal{R} / (\gamma - 1) \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ où le rapport des chaleurs spécifiques est $\gamma = 1.4$.

De ce fait, nous obtenons une conductivité thermique de référence égale à $\lambda_{\text{ref}} = 2.38 \cdot 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.

Les forces de gravité sont $\vec{g} = (0, -10)^T$, de norme $\|\vec{g}\| = 10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$.

Pour notre validation numérique, nous avons choisi d'étudier un seul nombre de Rayleigh, $\text{Ra} = 10^6$, avec plusieurs différences de température entre les parois chaude et froide : $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$. À ε donné, nous associons une longueur de référence, estimée par la relation (II.7).

- pour $\varepsilon = 0.01$ ($T_c - T_f = 12 \text{ K}$) : $L_{\text{ref}} = 0.179 \text{ m}$;
- pour $\varepsilon = 0.2$ ($T_c - T_f = 240 \text{ K}$) : $L_{\text{ref}} = 0.066 \text{ m}$;
- pour $\varepsilon = 0.4$ ($T_c - T_f = 480 \text{ K}$) : $L_{\text{ref}} = 0.052 \text{ m}$.

II.2.2 Discrétisation numérique

Discrétisation temporelle et méthode des volumes finis. La discrétisation temporelle du système d'équations de bilan associé au problème (\mathcal{P}) est réalisée telle que présentée au paragraphe III.1 du chapitre 2 et est définie par l'algorithme III.1. Il s'agit de résoudre successivement l'équation de bilan d'énergie pour obtenir la température, d'estimer la pression thermodynamique par la relation (II.6), de calculer la masse volumique par la loi d'état puis de résoudre les équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach par la méthode de projection proposée au paragraphe II.2 du chapitre 2. Les flux convectifs de chacun des bilans sont traités de façon explicite, tandis que les flux diffusifs sont traités implicitement. La discrétisation spatiale est assurée par une méthode de volumes finis sur maillage décalé de type MAC, e.g. [27]. Les flux convectifs utilisent un schéma de décentrement d'ordre élevé associé à une stratégie de limiteur de pente, ULTRA-QUICK [28, 40]. Les flux diffusifs sont centrés en espace, e.g. [44].

Le domaine de calcul initial $\Omega_0 = [0; 1] \times [0; 1]$ est maillé par une grille uniforme en deux dimensions, de pas d'espace $\Delta x = \Delta y = h$ et l'intervalle de temps $[0; \tau]$ est divisé en pas de temps constants Δt . Pour nos applications, trois maillages initiaux sont utilisés : 21×21 de pas $h_0 = 1/21$, 63×63 de pas $h_0/3$ et 189×189 de pas $h_0/9$. Les pas de temps Δt doivent vérifier la condition de stabilité CFL, du fait du traitement explicite des flux convectifs. Nous avons choisi une constante de stabilité CFL = 0.5. La résolution des systèmes linéaires issus de la discrétisation en temps et en espace de l'équation de bilan d'énergie est réalisée par la méthode itérative de Krylov GMRES, préconditionnée par MILU(0), de même pour la première étape de la méthode de projection. La résolution des systèmes linéaires issus de la discrétisation en temps et en espace du problème de Poisson pour la pression dynamique, correspondant à la seconde étape de la méthode de projection est effectuée par la méthode du Gradient Conjugué, préconditionnée par MILU(0) avec un critère d'arrêt fixé à $\varepsilon = 10^{-8}$.

Méthode de raffinement local multi-niveaux Dans le problème étudié, l'épaisseur δ de la couche limite dynamique et thermique décroît comme l'inverse du nombre de Rayleigh à la puissance un quart : $\delta = \text{Ra}^{-\frac{1}{4}}$. Les couches limites sont donc de très faible épaisseur pour de grands nombres de Rayleigh. Pour mieux représenter les phénomènes physiques qui apparaissent au voisinage des parois verticales, une solution performante peut être d'utiliser un raffinement local de maillage.

Toutes les grilles G_l que nous considérons sont définies par un maillage cartésien. Elles sont structurées et uniformes de pas constant h_l identique dans chaque direction d'espace. Elles sont définies par leur domaine $\Omega^l = (]0; x_0(l)[\times]0; 1[) \times (]0; x_1(l)[\times]0; 1[)$, $0 \leq l \leq l^*$ avec $\Omega^0 =]0; 1[\times]0; 1[$. Le rapport de raffinement r est indépendant du niveau de raffinement et est égal à $r = 3$.

Nous avons représenté sur la Figure 4.45 une grille initiale G_0 munie d'un niveau de raffinement $G_1 = (]0; 0.25[\times]0; 1[) \times (]0.75; 1[\times]0; 1[)$ avec un rapport de raffinement $r = 3$.

Nous construisons deux résidus de correction en flux, associés respectivement à l'équation de bilan d'énergie et à l'équation de bilan de quantité de mouvement.

Détaillons le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan d'énergie. Les flux concernés sont les flux convectifs $\mathcal{F}_c^T(T) = \rho T \vec{v}$ et les flux diffusifs $\mathcal{F}_d^T(T) = \frac{-1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla T$.

Le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan d'énergie pour deux niveaux de grilles s'écrit pour chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ strictement intérieur à la zone de raffinement

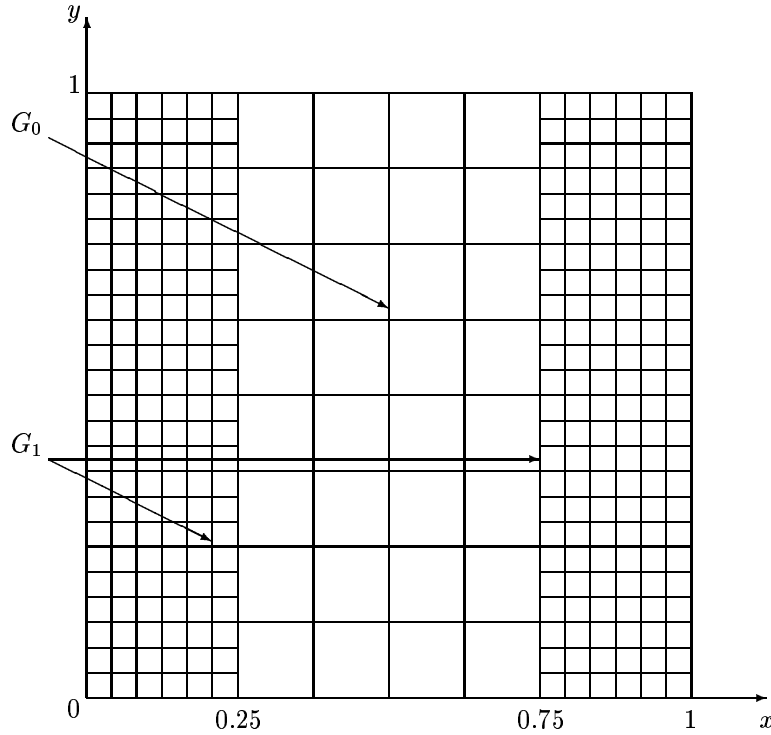


FIG. 4.45 – Grille initiale $G_0 =]0; 1[\times]0; 1[$ et grille raffinée $G_1 = (]0; 0.25[\times]0; 1[) \times (]0.75; 1[\times]0; 1[)$ avec un rapport de raffinement $r = 3$ pour le problème de la convection naturelle à faible nombre de Mach.

et centré autour du point $\vec{x} \in G_0$ comme :

$$r_0 (\mathcal{F}_c^T(T) + \mathcal{F}_d^T(T)) (K_0(\vec{x})) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0 \left(\rho T \vec{v} - \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla T \right) (K_0(\vec{x})) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \left(\rho T \vec{v} - \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla T \right) \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

Comme pour l'équation de bilan d'énergie, le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan de quantité de mouvement tient compte des flux convectifs $\mathcal{F}_c^{\vec{v}}(\vec{v}) = \rho \vec{v} \vec{v}$ et des flux diffusifs $\mathcal{F}_d^{\vec{v}}(\vec{v}) = \frac{1}{\text{Re}} \left\{ -(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id} \right\}$.

Le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan de quantité de mouvement pour deux niveaux de grilles s'écrit pour chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ strictement intérieur à la zone de raffinement et centré autour du point $\vec{x} \in G_0$ comme :

$$r_0 (\mathcal{F}_c^{\vec{v}}(\vec{v}) + \mathcal{F}_d^{\vec{v}}(\vec{v})) (K_0(\vec{x})) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0 \left(\rho \vec{v} \vec{v} - \frac{1}{\text{Re}} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \text{Id} \right) (K_0(\vec{x})) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \left(\rho \vec{v} \vec{v} - \frac{1}{\text{Re}} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \text{Id} \right) \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

L'opérateur de grille R_1^0 a été défini par l'équation (I.6) au chapitre 3 et prend la forme générique suivante :

$$R_1^0(\mathcal{F}(\varphi))(\vec{x}) = \oint_{\partial K_1(\vec{x}) \subset \partial K_0(\vec{x})} \mathcal{F}(\varphi) \cdot \vec{n}_1$$

avec $\mathcal{F}(\varphi)$ le flux de la quantité φ sur chacun des volumes de contrôle K_0 appartenant au domaine Ω_1 de frontière ∂K_0 . Chaque frontière ∂K_0 , de normale extérieure \vec{n}_0 , est décomposée en une union de frontière ∂K_1 avec \vec{n}_1 le vecteur directeur unitaire de la normale extérieure.

L'algorithme de la méthode de raffinement local pour deux niveaux, G_0 grille grossière et G_1 grille fine, peut se schématiser de manière séquentielle pour deux cycles de raffinement local, $\gamma(0) = 2$, comme le montre la Figure 4.46, où les notations utilisées sont :

- T représente une itération correspondant à la résolution de l'équation de bilan d'énergie ;
- P_0 représente une itération correspondant à la résolution de la relation (II.6) ;
- ρ représente une itération correspondant à la résolution de la l'équation d'état ;
- (\vec{v}, P_1) représente une itération correspondant à la résolution des équations de masse et de quantité de mouvement par la méthode de projection ;
- T^c représente une itération correspondant à la résolution de l'équation de bilan d'énergie avec correction en flux ;
- (\vec{v}^c, P_1) représente une itération correspondant à la résolution des équations de masse et de quantité de mouvement par la méthode de projection avec correction en flux.

Par ailleurs nous avons noté les opérateurs de grilles de la façon suivante :

- les opérateurs de prolongement dans la zone raffinée et à la frontière de la zone raffinée sont notés P_0^1 ;
- les opérateurs de correction en flux dans la zone raffinée sont notés R_0^1 , en précisant à quelle inconnue s'applique la correction en flux ;
- les opérateurs de restriction de la solution fine dans la zone raffinée sont notés $\widehat{R}_0^1(T)$ et $\widehat{R}_0^1(\rho)$ pour les inconnues scalaires T et ρ ;
- les opérateurs de restriction de la solution fine dans la zone raffinée sont notés $\widehat{R}_0^1(\vec{v})$ pour les inconnues vectorielles \vec{v} ;

Tous les opérateurs utilisés vérifient par construction le bilan de masse après leur application et sont définis au paragraphe I.2 du chapitre 3.

On note par ailleurs que le calcul de la pression thermodynamique ne s'effectue pas sur la grille fine. En effet, cette inconnue est une variable globale qui garantit que la masse est conservée sur le domaine de calcul et reste donc la même quel que soit le niveau de raffinement. Cette remarque est encore valable pour la masse volumique moyenne ρ_0 sur le domaine Ω_0 .

II.2.3 Résultats numériques

Nombres de Nusselt. Le nombre de Nusselt estime les transferts de chaleur à la paroi. Il fait intervenir un flux vectoriel $\vec{q}(T)$ qui s'écrit sous la forme :

$$\vec{q}(T) = -\lambda \nabla T + T \vec{v}$$

Nous définissons le nombre de Nusselt local $\text{Nu}(0, y)$ au point $(0, y)$ avec $y \in [0, 1]$ par :

$$\text{Nu}(0, y) = \frac{L_{\text{ref}}}{\lambda_0(T_c - T_f)} \lambda \frac{\partial T}{\partial x}(0, y)$$

Le nombre de Nusselt moyen $\overline{\text{Nu}}$ à la paroi verticale gauche $x = 0$ est défini comme :

$$\overline{\text{Nu}} = \frac{1}{L_{\text{ref}}} \int_{y=0}^{y=1} \text{Nu}(0, y)$$

Résultats numériques pour des maillages monogrilles. Pour un nombre de Rayleigh $\text{Ra} = 10^6$ et $\varepsilon = 0.01$, les résultats numériques sont comparés à ceux obtenus avec une approximation de Boussinesq et présentés par De Vahl Davis et Jones [19, 20] et Le Quéré [37]. Pour ce même nombre de Rayleigh avec $\varepsilon = 0.01$ et pour de plus grandes variations de température, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$, la comparaison est effectuée avec les résultats obtenus par Paillère et Le Quéré [43] pour le modèle à faible nombre de Mach.

Les comparaisons sont effectuées à l'état stationnaire sur les points suivants :

- le nombre de Nusselt moyen $\overline{\text{Nu}}$ sur la frontière gauche (chaude) de la cavité ;
- les minimum et maximum du nombre de Nusselt local sur la frontière gauche (Nu_{min} , Nu_{max}) ;
- la vitesse horizontale maximale u_{max} sur le demi-plan vertical de la cavité, et la vitesse verticale maximale v_{max} sur le demi-plan horizontal, avec leur emplacement $y_{u_{\text{max}}}$, $x_{v_{\text{max}}}$.

La Figure 4.47 montre pour un nombre de Rayleigh $\text{Ra} = 10^6$ le profil de la vitesse horizontale au milieu de la cavité, $x = 0.5$, pour différents maillages et différents gradients de température aux parois. La convergence spatiale est atteinte pour le maillage 21×21 à $\text{Ra} = 10^6$ quel que soit la différence de température imposée aux parois.

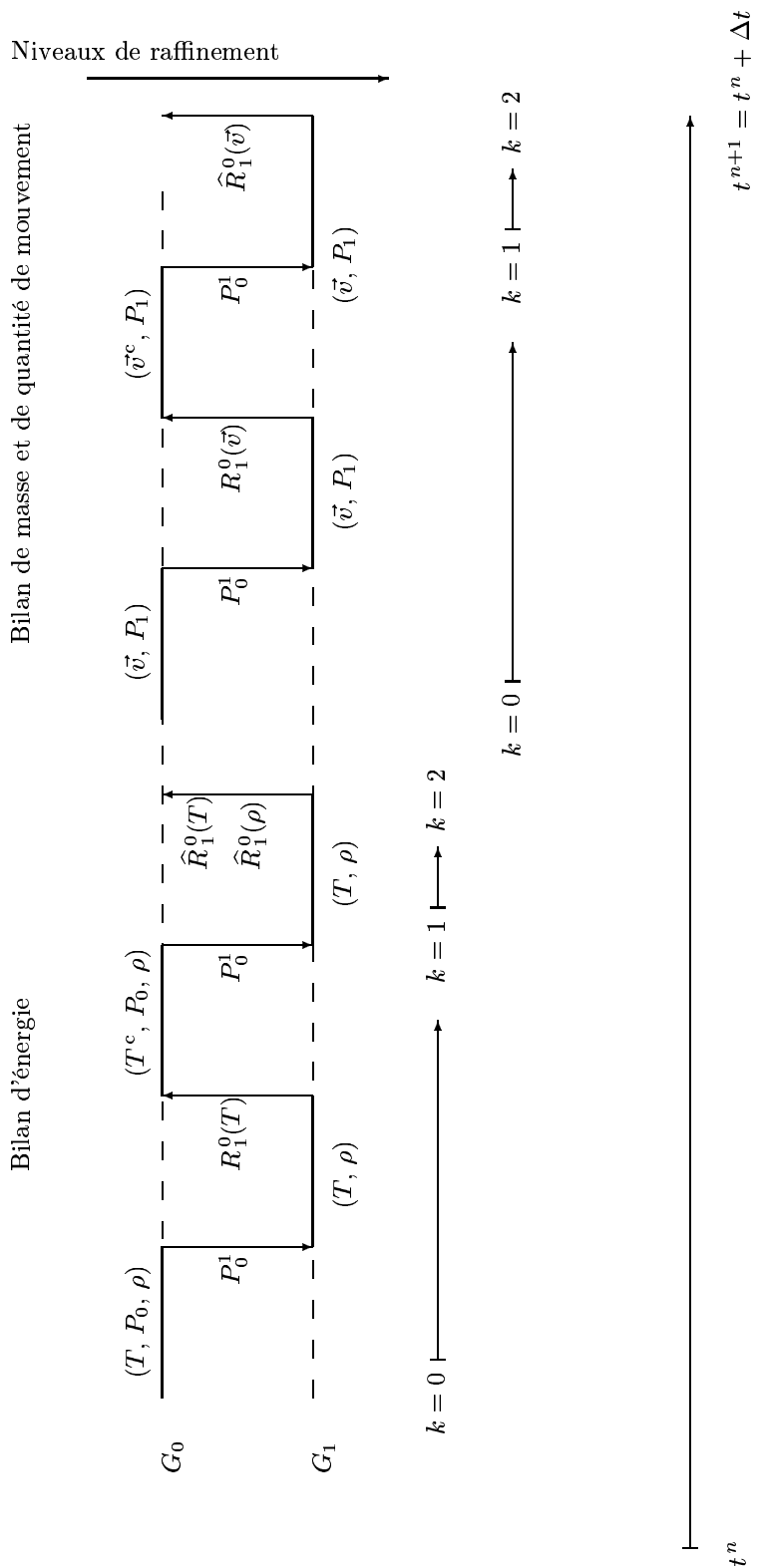


FIG. 4.46 – Schématisation de l’algorithme de raffinement local à deux niveaux G_0 et G_1 pour deux cycles $\gamma(0) = 2$ pour le problème de la convection naturelle à faible nombre de Mach.

La Figure 4.48 montre pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ le profil de la vitesse verticale au milieu de la cavité, $y = 0.5$, pour les maillages considérés et les différences de température aux

(a) $\varepsilon = 0.01$

(b) $\varepsilon = 0.2$

(c) $\varepsilon = 0.4$

FIG. 4.47 – Convergence au maillage : Vitesse horizontale ($\times 100$) suivant $x = 0.5$ pour des maillages $- - - 21 \times 21$; $\cdots \cdots \cdots 63 \times 63$; $\text{—} \text{—} \text{—} 189 \times 189$ pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

(a) $\varepsilon = 0.01$ (b) $\varepsilon = 0.2$ (c) $\varepsilon = 0.4$

FIG. 4.48 – Convergence au maillage : Vitesse verticale ($\times 10$) suivant $y = 0.5$ pour des maillages $- - - 21 \times 21$; $\cdots 63 \times 63$; $\text{—} 189 \times 189$ pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

parois proposées. La convergence spatiale est atteinte pour le maillage 21×21 à $Ra = 10^6$ quel que soit la différence de température imposée aux parois.

Le Tableau 4.8 compare les nombres de Nusselt moyen \overline{Nu} sur la frontière verticale en $x = 0$, les minimum et maximum des Nusselt locaux (Nu_{\min} , Nu_{\max}) et leur position $y_{Nu_{\min}}$ et $y_{Nu_{\max}}$ en $x = 0$, la vitesse horizontale maximale u_{\max} sur le demi-plan vertical de la cavité, et la vitesse verticale maximale v_{\max} sur le demi-plan horizontal, et leur emplacement $y_{v_{\max}}$, $x_{v_{\max}}$ avec les résultats obtenus dans la littérature citée précédemment.

Le Tableau 4.8 montre la convergence des quantité comparées vers les valeurs communément admises dans la littérature.

La Figure 4.49 présente le nombre de Nusselt le long de la paroi verticale chaude ($x = 0$) pour les maillages 21×21 , 63×63 et 189×189 pour le nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

Le champ de vitesse est présenté sur les Figures 4.50 pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ et les différences de température proposées, *i.e.* ($T_c - T_f = 12$ K), ($T_c - T_f = 240$ K) et ($T_c - T_f = 480$ K). La Figure 4.51 présente le champ de vitesse pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ et les différences

ε	Quantités	21×21	63×63	189×189	Références		
0.01	\overline{Nu}	10.31	9.059	8.851	[19]	[37]	[43]
	Nu_{\min}	0.888	0.969	0.992	8.817	8.825	8.825
	yNu_{\min}	0.976	0.992	0.995	0.989	0.979	0.981
	Nu_{\max}	19.38	19.19	17.78	1.000	1.000	-
	yNu_{\max}	0.024	0.024	0.037	0.038	0.039	-
	$u_{\max} \times 10^2$	6.564	6.695	6.616	17.92	17.53	17.57
	$y_{u_{\max}}$	0.833	0.849	0.847	6.463	6.480	-
	$v_{\max} \times 10$	2.379	2.223	2.191	0.850	0.850	-
	$x_{v_{\max}}$	0.024	0.039	0.042	2.194	2.206	-
0.2	\overline{Nu}	10.28	9.059	8.840	[43]		
	Nu_{\min}	0.778	1.004	1.018	8.830		
	yNu_{\min}	0.976	0.992	0.995	1.011		
	Nu_{\max}	20.28	19.71	18.24	-		
	yNu_{\max}	0.024	0.024	0.042	18.05		
	$u_{\max} \times 10^2$	4.229	4.387	4.314	-		
	$y_{u_{\max}}$	0.833	0.849	0.847	-		
	$v_{\max} \times 10$	1.498	1.412	1.371	-		
	$x_{v_{\max}}$	0.024	0.039	0.042	-		
0.4	\overline{Nu}	10.17	9.079	8.861	[43]		
	Nu_{\min}	0.759	1.042	1.048	8.843		
	yNu_{\min}	0.977	0.992	0.995	1.042		
	Nu_{\max}	21.23	20.45	18.92	-		
	yNu_{\max}	0.024	0.024	0.042	18.705		
	$u_{\max} \times 10^2$	5.845	6.159	6.055	-		
	$y_{u_{\max}}$	0.833	0.849	0.852	-		
	$v_{\max} \times 10$	1.957	1.863	1.834	-		
	$x_{v_{\max}}$	0.024	0.039	0.048	-		

TAB. 4.8 – Comparaisons des nombres de Nusselt, des vitesses maximales et leurs positions avec les résultats de références pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ et différents gradients de température aux parois.

(a) $\varepsilon = 0.01$

(b) $\varepsilon = 0.2$

(c) $\varepsilon = 0.4$

FIG. 4.49 – Convergence aux maillages : nombre de Nusselt le long de la paroi verticale chaude ($x = 0$) pour des maillages $- - - 21 \times 21$; $----- 63 \times 63$; $———— 189 \times 189$ pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

(a) $\varepsilon = 0.01$

(b) $\varepsilon = 0.2$

(c) $\varepsilon = 0.4$

FIG. 4.50 – Champ de vitesses à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

Quantités	21 × 21	21 × 21 / $l^* = 1$	21 × 21 / $l^* = 1$	63 × 63	Référence [43]
		solution grossière	solution fine		
\overline{Nu}	10.28	9.076	9.363	9.059	8.830
Nu_{\min}	0.778	1.237	1.167	1.004	1.011
$y_{Nu_{\min}}$	0.976	0.976	0.992	0.992	-
Nu_{\max}	20.28	17.18	19.37	19.71	18.05
$y_{Nu_{\max}}$	0.024	0.024	0.039	0.024	-
u_{\max}	4.229	5.161	-	4.387	-
$y_{u_{\max}}$	0.833	0.881	-	0.849	-
v_{\max}	1.498	1.164	-	1.412	-
$x_{v_{\max}}$	0.024	0.024	-	0.039	-

TAB. 4.9 – Comparaisons des nombres de Nusselt, des vitesses maximales et leurs positions pour les maillages 21×21 , 21×21 avec un niveau de raffinement (solution grossière), 21×21 avec un niveau de raffinement (solution fine) et le maillage 63×63 pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.2$.

de température : ($T_c - T_f = 12$ K), ($T_c - T_f = 240$ K) et ($T_c - T_f = 480$ K).

Le champ de température et ses isovaleurs sont donnés sur les Figures 4.52 à 4.54 pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

Résultats numériques pour des maillages avec raffinement local multi-niveaux. Nous avons testé dans nos applications les zones de raffinement proposées précédemment dans le cas d'un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ et pour $\varepsilon = 0.2$, ce qui correspond à une différence de température entre la paroi chaude et la paroi froide de $T_c - T_f = 240$ K.

Le Tableau 4.9 compare pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec $\varepsilon = 0.2$ les nombres de Nusselt moyen \overline{Nu} sur la frontière verticale en $x = 0$, les minimum et maximum des Nusselt locaux (Nu_{\min} , Nu_{\max}) avec leur position $y_{Nu_{\min}}$ et $y_{Nu_{\max}}$ en $x = 0$, la vitesse horizontale maximale u_{\max} sur le demi-plan vertical de la cavité, et la vitesse verticale maximale v_{\max} sur le demi-plan horizontal, avec leur emplacement $y_{u_{\max}}$, $x_{v_{\max}}$ pour les maillages 21×21 , 21×21 avec un niveau de raffinement (solution grossière), 21×21 avec un niveau de raffinement (solution fine) et le maillage 63×63 (équivalent au maillage 21×21 entièrement raffiné).

D'après le Tableau 4.9, nous notons que la méthode de raffinement local avec deux niveaux de grilles améliore considérablement les nombres de Nusselt de la solution numérique obtenue pour un maillage initial 21×21 avec un niveau de raffinement pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ et une différence de température aux parois : ($T_c - T_f = 240$ K). Cependant, le champ de vitesse est moins bien représenté dans la mesure où nous cherchons la valeur maximale des deux composantes du champ de vitesse sur les plans de coupes $x = 0.5$ et $y = 0.5$, plans de coupe qui n'appartiennent pas ou pas entièrement à la zone de raffinement.

Sur la Figure 4.55 sont représentés les coupes verticales des nombres de Nusselt à la paroi chaude pour les maillages 21×21 , 21×21 avec un niveau de raffinement (solution grossière), 21×21 avec un niveau de raffinement (solution fine) et le maillage 63×63 pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.2$.

(a) $\varepsilon = 0.01$

(b) $\varepsilon = 0.2$

(c) $\varepsilon = 0.4$

FIG. 4.51 – Champ de vitesses à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.2$ et $\varepsilon = 0.4$.

FIG. 4.52 – Température à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.01$.

FIG. 4.53 – Température à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.2$.

FIG. 4.54 – Température à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.4$.

FIG. 4.55 – Coupe verticale du nombre de Nusselt pour les maillages : - - - 21 × 21, ----- solution grossière du maillage raffiné 21 × 21, ----- solution fine du maillage raffiné 21 × 21, --- 63 × 63 et ——— 189 × 189.

(a) Champ de température

(b) Champ de vitesse

FIG. 4.56 – Solution fine à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.2$.

Sur les Figures 4.56(a) et 4.56(b) sont présentées les champ de température et de vitesse fins pour le maillage 21×21 raffiné pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.2$.

Les Figures 4.57 présente les profils horizontaux de la seconde composante du champ de vitesse et de la température au milieu de la cavité, $y = 0.5$, pour différents maillages : 21×21 , 21×21 avec un niveau de raffinement (solution grossière) et le maillage 63×63 pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.2$.

En conclusion, la discrétisation numérique adoptée pour résoudre le système d'équations associé aux écoulements à faible nombre de Mach est robuste, la convergence au maillage est atteinte pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ dès le maillage 63×63 , quelle que soit la différence de température imposée entre la paroi chaude et la paroi froide : ($T_c - T_f = 12$ K), ($T_c - T_f = 240$ K) ou ($T_c - T_f = 480$ K). Les résultats numériques obtenus sont en accord avec ceux de la littérature.

La méthode de raffinement local permet de grandement améliorer la précision de la solution numérique. Dans les zones de raffinement choisies, la solution fine du maillage raffiné est "très proche" de la solution d'un maillage équivalent à un raffinement de l'ensemble du domaine de calcul. Nous le notons en particulier pour le nombre de Nusselt à la paroi chaude.

(a) Profil horizontal de la seconde composante du champ de vitesse

(b) Zoom du profil horizontal de la seconde composante du champ de vitesse

(c) Profil horizontal de la température

(d) Zoom du profil horizontal de la température

FIG. 4.57 – Profils horizontaux de la seconde composante du champ de vitesse ($\times 10$) et de la température en $y = 0.5$ pour $Ra = 10^6$ et $\varepsilon = 0.2$ et les maillages : — — — 21×21 , — — — — solution grossière du maillage raffiné 21×21 , — — — — — solution fine du maillage raffiné 21×21 , — — — — — 63×63 et — — — — — 189×189 .

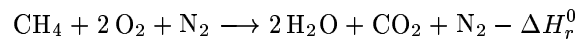
II.3 Problème d'une flamme de diffusion laminaire

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons au problème d'une flamme de diffusion laminaire. Nous comparons les résultats numériques du modèle à faible nombre de Mach avec ceux donnés par la solution analytique d'un modèle simplifié (cf. Annexe C).

II.3.1 Position du problème

Hypothèses.

- (H1) La géométrie du problème est bidimensionnelle, avec un plan de symétrie ;
 (H2) Seules trois espèces chimiques réactives sont en présence : le combustible $\mathcal{M}_F = \text{CH}_4$, l'oxydant $\mathcal{M}_{Ox} = \text{O}_2$, et les produits brûlés $\mathcal{M}_P = 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$. On suppose de plus la présence d'un inerte $\mathcal{M}_I = \text{N}_2$. Nous supposons que ces corps réagissent suivant l'unique réaction chimique :



avec $-\Delta H_r^0$ la chaleur de réaction définie par :

$$-\Delta H_r^0 = 2W_{\text{H}_2\text{O}} h_{f,\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}_2} h_{f,\text{CO}_2} - W_{\text{CH}_4} h_{f,\text{CH}_4}^0 - 2W_{\text{O}_2} h_{f,\text{O}_2}^0$$

avec W_{CH_4} la masse molaire du méthane d'enthalpie de formation h_{f,CH_4}^0 , W_{O_2} la masse molaire de l'oxygène d'enthalpie de formation h_{f,O_2}^0 , nulle par convention, $W_{2\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2}$ la masse molaire des produits brûlés (eau et dioxyde de carbone) d'enthalpie de formation $h_{f,2\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2}^0$;

- (H3) Les réactions chimiques sont tellement rapides que l'oxydant et le combustible ne peuvent coexister dans la même particule fluide sans donner immédiatement des produits brûlés. La réaction chimique est localisée à la stœchiométrie du mélange, notée flamme où $Y_{\text{CH}_4} = Y_{\text{O}_2} = 0$. De plus, il n'y a pas d'oxydant dans le jet combustible et il n'y a pas de combustible dans le jet oxydant : $(Y_{\text{O}_2})_{\text{CH}_4}^0 = 0$, $(Y_{\text{CH}_4})_{\text{O}_2+\text{N}_2}^0 = 0$;
 (H4) Le jet de combustible et d'air ont le même débit unitaire ;
 (H5) La diffusion moléculaire suit la loi de Fick. De plus, les coefficients de diffusion de chaque espèce sont égaux : $D_{\text{O}_2} = D_{\text{N}_2} = D_{\text{CH}_4} = D_{2\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2} = D$;
 (H6) Les forces à distance sont nulles : $\vec{g} = \vec{0}$;
 (H8) Chaleur et espèces diffusent à la même vitesse, *i.e.* le nombre de Lewis $\text{Le} = \lambda / (\rho c_p D)$ est égal à l'unité ;
 (H7) Le nombre de Schmidt $\text{Sc} = \mu / (\rho D)$ est égal à l'unité ;
 (H8) La pression thermodynamique reste constante dans la flamme : $P_0 = P_{\text{atm}}$.

Géométrie et conditions aux limites. Le problème bidimensionnel (\mathcal{P}) est le système d'équations de conservation de la masse du mélange, de la quantité de mouvement et de la fraction de mélange avec la loi des gaz parfaits. Il est résumé au paragraphe VII du chapitre 1. Pour un fluide Newtonien, le problème (\mathcal{P}) s'écrit sur le domaine $\Omega = [0; R] \times [0; H]$ dans l'intervalle de temps $[0; \tau]$:

Trouver $(\vec{v}, P_1, Z, \rho, T, P_0)$ de $\Omega \times [0; \tau]$ dans $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ tels que :

$$(\mathcal{P}) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \\ \frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id} \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho Z) + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 Z \\ P_0 = \rho \mathcal{R}_u \left(\sum_{s \in \{\text{CH}_4, \text{O}_2, 2\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2, \text{N}_2\}} \frac{Y_s}{W_s} \right) T \end{array} \right.$$

où ρ est la masse volumique, \vec{v} le champ de vitesse, P_1 la pression dynamique, Z la fraction de mélange, P_0 la pression thermodynamique, \mathcal{R}_U la constante des gaz parfaits, Y_s (resp. W_s) sont les fractions massiques (resp. les masses molaires) des espèces combustible $\mathcal{M}_F = \text{CH}_4$, oxydant $\mathcal{M}_{Ox} = \text{O}_2$, inerte $\mathcal{M}_I = \text{N}_2$ et produits $\mathcal{M}_P = 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$, T est la température du mélange, γ le rapport des chaleurs spécifiques, Re le nombre de Reynolds et Sc le nombre de Schmidt.

En ce qui concerne la pression thermodynamique, l'hypothèse (H8) nous assure qu'elle reste constante en temps et est égale initialement à la pression atmosphérique :

$$P_0 = P_{\text{atm}}.$$

En définissant Q^0 la chaleur de réaction par unité de masse de combustible consommé comme :

$$Q^0 = \frac{-\Delta H_r^0}{W_{\text{CH}_4}} = h_{f,\text{CH}_4}^0 - 2 \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}}{W_{\text{CH}_4}} h_{f,\text{H}_2\text{O}} + \frac{W_{\text{CO}_2}}{W_{\text{CH}_4}} h_{f,\text{CO}_2} + \frac{W_{\text{O}_2}}{W_{\text{CH}_4}} \underbrace{h_{f,\text{O}_2}^0}_{=0},$$

nous avons par l'hypothèse (H3) de chimie infiniment rapide les relations suivantes :

$$\text{Pour } Z \leq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_{\text{CH}_4} = 0 \\ Y_{\text{O}_2} = Y_{\text{O}_2}^0 [1 - (\varphi + 1)Z] \\ Y_{2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2} = Y_{\text{O}_2}^0 \frac{(1+s)}{s} \varphi Z \\ Y_{\text{N}_2} = 1 - Y_{\text{O}_2} - Y_{2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2} \\ T = T_{\text{O}_2}^0 + (T_{\text{CH}_4}^0 - T_{\text{O}_2}^0)Z + \frac{Q^0 Y_{\text{CH}_4}^0}{c_p} Z \end{array} \right.$$

$$\text{Pour } Z \geq Z_c \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_{\text{CH}_4} = Y_{\text{CH}_4}^0 \frac{(1+\varphi)Z - 1}{\varphi} \\ Y_{\text{O}_2} = 0 \\ Y_{2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2} = Y_{\text{CH}_4}^0 \frac{(1+s)(1-Z)}{\varphi} \\ Y_{\text{N}_2} = 1 - Y_{\text{CH}_4} - Y_{2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2} \\ T = T_{\text{O}_2}^0 + (T_{\text{CH}_4}^0 - T_{\text{O}_2}^0)Z + \frac{Q^0 Y_{\text{CH}_4}^0}{c_p} \frac{1-Z}{\varphi} \end{array} \right.$$

où s est le facteur stœchiométrique, défini par :

$$s = \frac{2 W_{\text{O}_2}}{W_{\text{CH}_4}},$$

φ est la richesse équivalente, définie par :

$$\varphi = s \frac{Y_{\text{CH}_4}^0}{Y_{\text{O}_2}^0},$$

Z_c est la fraction de mélange stœchiométrique, définie par :

$$Z_c = \frac{1}{1 + \varphi}.$$

Nous pouvons alors calculer la température adiabatique de flamme T_c , qui est la température maximale. Elle est atteinte pour la valeur stœchiométrique de la fraction de mélange, ce qui nous donne :

$$T_c = T_{\text{O}_2}^0 + (T_{\text{CH}_4}^0 - T_{\text{O}_2}^0)Z_c + \frac{Q^0 Y_{\text{CH}_4}^0}{c_p} Z_c$$

Ces relations nous permettent alors d'estimer à partir de la fraction de mélange les masses volumiques des espèces et la température du mélange, donc la masse volumique du mélange par la loi d'état des gaz parfaits.

Pour nos applications numériques, nous nous plaçons dans le cas d'une flamme de diffusion sur-ventilée. D'après l'Annexe C, il s'agit de choisir un rayon d'injection d'oxydant suffisamment grand devant le rayon d'injection du combustible, de telle sorte que la réaction chimique soit complète. La géométrie du problème étudié et les conditions aux limites sont présentées sur la Figure 4.58.

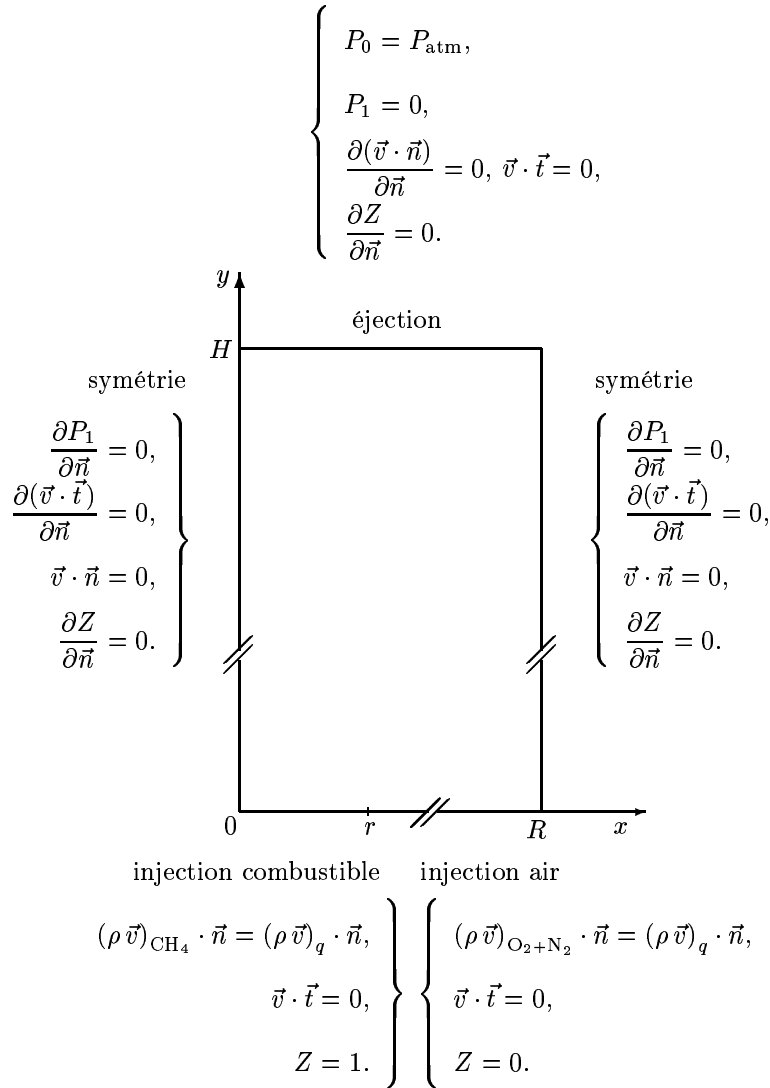


FIG. 4.58 – Géométrie et conditions aux limites pour le problème de la flamme de diffusion laminaire sur-ventilée.

Les conditions aux limites sont les suivantes :

– deux conditions d'injection :

– injection de combustible :

$$\text{pour } 0 < x \leq r, y = 0 : Z = 1, (\rho \vec{v})_{\text{CH}_4} \cdot \vec{n} = (\rho \vec{v})_q \cdot \vec{n}, \vec{v} \cdot \vec{t} = 0 ;$$

– injection d'air :

$$\text{pour } r < x \leq R, y = 0 : Z = 0, (\rho \vec{v})_{\text{O}_2+\text{N}_2} \cdot \vec{n} = (\rho \vec{v})_q \cdot \vec{n}, \vec{v} \cdot \vec{t} = 0 ;$$

– une condition d'éjection :

$$\text{pour } y = H : P_1 = 0, \frac{\partial(\vec{v} \cdot \vec{n})}{\partial \vec{n}} = 0, \vec{v} \cdot \vec{t} = 0, \frac{\partial Z}{\partial \vec{n}} = 0 ;$$

– deux conditions de symétrie :

$$\text{pour } x = 0 \text{ et } x = R : \frac{\partial P_1}{\partial \vec{n}} = 0, \frac{\partial(\vec{v} \cdot \vec{t})}{\partial \vec{n}} = 0, \vec{v} \cdot \vec{n} = 0, \frac{\partial Z}{\partial \vec{n}} = 0.$$

Nous considérons qu'initialement le domaine est rempli d'air au repos.

Ordres de grandeur et paramètres numériques. Le domaine est rempli d'air dans les conditions thermodynamiques standards : $P_0 = 101325 \text{ Pa}$, $T = 298 \text{ K}$.

Les masses molaires des espèces sont :

- $W_{\text{CH}_4} = 16 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ pour le méthane ;
- $W_{\text{O}_2} = 32 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ pour l'oxygène ;
- $W_{\text{N}_2} = 28 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ pour l'azote ;
- $W_{2\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2} = 84 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ pour les produits brûlés (eau et dioxyde de carbone).

Par conséquent, avec la constante universelle molaire des gaz parfaits $\mathcal{R}_u = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, la masse volumique de référence est $\rho_{\text{ref}} = 1.18 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ (masse volumique de l'air).

Nous choisissons une vitesse d'injection du combustible égale à : $\vec{v}_{\text{CH}_4} = 0.02 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Cette vitesse sert de vitesse de référence. Puisque d'après l'hypothèse (H4), nous supposons que les débits d'injection de combustible et de l'air sont égaux et que le rapport des masses volumiques du combustible et de l'air est 1/2, nous en déduisons la vitesse d'injection de l'air : $\vec{v}_{\text{O}_2+\text{N}_2} = 0.01 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

La longueur de référence L_{ref} est la largeur du canal d'injection du combustible, que nous prenons égale à $r = 1 \text{ mm}$. Nous considérons une largeur d'injection d'air égale à $R = 21 \text{ mm}$. La hauteur du domaine de calcul est $H = 150 \text{ mm}$.

Enfin, la viscosité dynamique de référence est la viscosité de l'air. Elle est donnée par : $\mu_{\text{ref}} = 1.681 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Avec ces quantités, nous pouvons estimer le nombre de Reynolds :

$$\text{Re} = \frac{\rho_{\text{ref}} \|\vec{v}_{\text{ref}}\| L_{\text{ref}}}{\mu_{\text{ref}}} = 1.4$$

Le rapport des chaleurs spécifiques est $\gamma = 1.4$, et la chaleur spécifique à pression constante est définie par : $c_p = \gamma \mathcal{R} / (\gamma - 1)$ avec $\mathcal{R} = 288.3 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Les hypothèses (H7)-(H8) nous donnent un nombre de Prandtl égal à l'unité. Par conséquent, la conductivité thermique de référence est : $\lambda_{\text{ref}} = 1.696 \cdot 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.

Enfin, par l'hypothèse (H8), le nombre de Lewis étant égal à l'unité, nous déduisons que le coefficient de diffusion D_{ref} est donné par : $D_{\text{ref}} = 1.425 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

Nous considérons la composition des jets d'injection suivante :

- dans le jet de combustible : $Y_{\text{CH}_4}^0 = 1$, $Y_{\text{O}_2}^0 = 0$ et $Y_{\text{N}_2}^0 = 0$;
- dans le jet d'oxydant : $Y_{\text{CH}_4}^0 = 0$, $Y_{\text{O}_2}^0 = 0.232$ et $Y_{\text{N}_2}^0 = 0.768$.

Cette composition détermine la valeur stœchiométrique de la fraction de mélange, qui est alors :

$$Z_c = 0.05482$$

pour un facteur stœchiométrique $s = 4$ et une richesse équivalente $\varphi = 17.24$.

Nous vérifions à l'aide de l'Annexe C que, pour cette valeur stœchiométrique de la fraction de mélange, les dimensions du domaine de calcul conduisent à une flamme de diffusion laminaire sur-ventilée. En effet, nous satisfaisons la relation suivante pour la largeur d'injection de l'air :

$$R = 21 \text{ mm} > \frac{r}{Z_c} = 18 \text{ mm}$$

Toujours à l'aide de l'Annexe C, nous estimons que la hauteur de flamme H_f , calculée à l'aide de la solution analytique, est :

$$H_f = 74 \text{ mm}$$

Enfin, les enthalpies de formation des espèces sont les suivantes :

- pour le méthane : $h_{f,\text{CH}_4}^0 = -74.4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$;

– pour les produits (eau et dioxyde de carbone) : $h_{f,2H_2O+CO_2}^0 = -877.1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Nous en déduisons que la chaleur de réaction dégagée par unité de masse de combustible consommé est égale à :

$$Q^0 = 5 \cdot 10^4 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$$

De ce fait, la température adiabatique de flamme est :

$$T_c = 3023 \text{ K}$$

II.3.2 Discrétisation numérique

Discrétisation temporelle et méthode des volumes finis. La discrétisation temporelle du système d'équations de bilan associé au problème (\mathcal{P}) est définie par l'algorithme III.2, tel que présentée au paragraphe III.2 du chapitre 2. Il s'agit de résoudre successivement l'équation de bilan de fraction de mélange, d'estimer les fractions massiques des espèces et la température par les relations (II.3.1), de calculer la masse volumique par la loi d'état puis de résoudre les équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach par la méthode de projection proposée au paragraphe II.2 du chapitre 2. Les flux convectifs de chacun des bilans sont traités de façon explicite, tandis que les flux diffusifs sont traités implicitement. La discrétisation spatiale est assurée par une méthode de volumes finis sur maillage décalé de type MAC, e.g. [27]. Les flux convectifs utilisent un schéma de décentrement d'ordre élevé associé à une stratégie de limiteur de pente, ULTRA-QUICK [28, 40]. Les flux diffusifs sont centrés en espace, e.g. [44].

Le domaine de calcul initial $\Omega_0 = [0; 21] \times [0; 150]$ est maillé par une grille de pas d'espace Δx dans la direction (Ox) et Δy dans la direction (Oy). L'intervalle de temps $[0; \tau]$ est divisé en pas de temps constants Δt . Pour nos applications, deux maillages initiaux sont utilisés : 21×63 de pas $\Delta x_0 = 1$ et $\Delta y_0 = 150/63$ et 63×189 de pas $\Delta x_0/3$ et $\Delta y_0/3$. Les pas de temps Δt doivent vérifier la condition de stabilité CFL issue du traitement explicite des flux convectifs. Nous avons choisi une constante de stabilité CFL = 0.5. La résolution des systèmes linéaires issus de la discrétisation en temps et en espace de l'équation de bilan de fraction de mélange est réalisée par la méthode itérative de Krylov GMRES, préconditionnée par MILU(0), de même pour la première étape de la méthode de projection. La résolution des systèmes linéaires issus de la discrétisation en temps et en espace du problème de Poisson pour la pression dynamique correspondant à la seconde étape de la méthode de projection est effectuée par la méthode du Gradient Conjugué, préconditionnée par MILU(0), avec un critère d'arrêt fixé à $\varepsilon = 10^{-8}$.

Méthode de raffinement local multi-niveaux. Dans le problème étudié, nous cherchons à représenter de façon plus précise l'injection de combustible dans le domaine et donc d'obtenir une représentation plus précise de la flamme de diffusion laminaire.

Toutes les grilles G_l que nous considérons sont définies par un maillage cartésien. Elles sont structurées et de pas constant dans chacune des directions de l'espace ($\Delta x_l, \Delta y_l$). Elles sont définies par leur domaine $\Omega^l =]0; x_0(l)[\times]0; y_0(l)[$, $0 \leq l \leq l^*$ avec $\Omega^0 =]0; 21[\times]0; 150[$. Le rapport de raffinement r est égal à $r = 3$.

Nous avons représenté sur la Figure 4.59 une grille initiale G_0 munie d'un niveau de raffinement $G_1 =]0; 21[\times]0; 70[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$.

Nous construisons deux résidus de correction en flux, associés respectivement à l'équation de bilan de fraction de mélange et à l'équation de bilan de quantité de mouvement.

Détaillons le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan de fraction de mélange. Les flux concernés sont les flux convectifs $\mathcal{F}_c^Z(Z) = \rho Z \vec{v}$ et les flux diffusifs $\mathcal{F}_d^Z(Z) = \frac{-1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla Z$.

Le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan de fraction de mélange pour deux niveaux de grilles s'écrit pour chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ strictement intérieur à la zone de raffinement et centré autour du point $\vec{x} \in G_0$ comme :

$$r_0 (\mathcal{F}_c^Z(Z) + \mathcal{F}_d^Z(Z)) (K_0(\vec{x})) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0 \left(\rho Z \vec{v} - \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla Z \right) (K_0(\vec{x})) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \left(\rho Z \vec{v} - \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla Z \right) \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

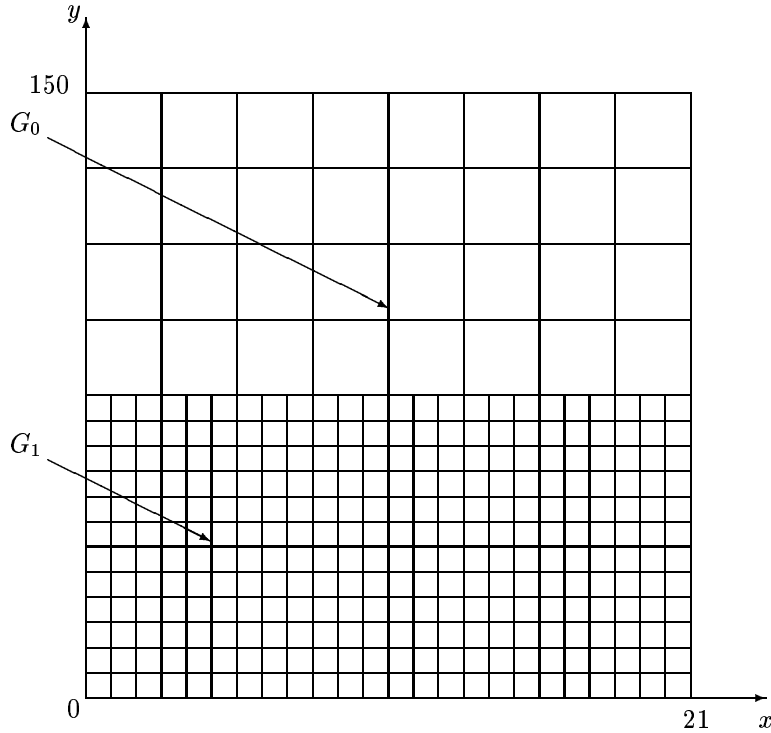


FIG. 4.59 – Grille initiale $G_0 =]0; 21[\times]0; 150[$ et grille raffinée $G_1 =]0; 21[\times]0; 70[$ avec un rapport de raffinement $r = 3$ pour le problème de la flamme de diffusion laminaire.

Comme pour l'équation de bilan de fraction de mélange, le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan de quantité de mouvement tient compte des flux convectifs $\mathcal{F}_c^{\vec{v}}(\vec{v}) = \rho \vec{v} \vec{v}$ et des flux diffusifs $\mathcal{F}_d^{\vec{v}}(\vec{v}) = \frac{1}{\text{Re}} \left\{ -(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \text{Id} \right\}$.

Le résidu de correction en flux associé à l'équation de bilan de quantité de mouvement pour deux niveaux de grilles s'écrit pour chaque volume de contrôle grossier $K_0(\vec{x})$ strictement intérieur à la zone de raffinement et centré autour du point $\vec{x} \in G_0$ comme :

$$r_0 (\mathcal{F}_c^{\vec{v}}(\vec{v}) + \mathcal{F}_d^{\vec{v}}(\vec{v})) (K_0(\vec{x})) = \frac{1}{|K_0(\vec{x})|} \left\{ R_1^0 \left(\rho \vec{v} \vec{v} - \frac{1}{\text{Re}} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \text{Id} \right) (K_0(\vec{x})) - \oint_{\partial K_0(\vec{x})} \left(\rho \vec{v} \vec{v} - \frac{1}{\text{Re}} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \text{Id} \right) \cdot \vec{n}_0 \right\}$$

L'opérateur de grille R_1^0 a été défini par l'équation (I.6) au chapitre 3 et prend la forme générique suivante :

$$R_1^0(\mathcal{F}(\varphi))(\vec{x}) = \oint_{\partial K_1(\vec{x}) \subset \partial K_0(\vec{x})} \mathcal{F}(\varphi) \cdot \vec{n}_1$$

avec $\mathcal{F}(\varphi)$ le flux de la quantité φ sur chacun des volumes de contrôle K_0 appartenant au domaine Ω_1 de frontière ∂K_0 . Chaque frontière ∂K_0 , de normale extérieure \vec{n}_0 , est décomposée en une union de frontière ∂K_1 avec \vec{n}_1 le vecteur directeur unitaire de la normale extérieure.

L'algorithme de la méthode de raffinement local pour deux niveaux, G_0 grille grossière et G_1 grille fine, peut se schématiser de manière séquentielle pour deux cycles de raffinement local, $\gamma(0) = 2$, comme le montre la Figure 4.60, où les notations utilisées sont :

- Z représente une itération correspondant à la résolution de l'équation de bilan de fraction de mélange ;
- (Y_s, T) représentent la résolution de la relation (II.3.1) ;
- ρ représente une itération correspondant à la résolution de la loi d'état ;
- (\vec{v}, P_1) représente une itération correspondant à la résolution de la méthode de projection ;

-
- Z^c représente une itération correspondant à la résolution de l'équation de bilan de fraction de mélange avec correction en flux ;
 - (\vec{v}^c, P_1) représente une itération correspondant à la résolution de la méthode de projection avec correction en flux ;

Par ailleurs nous avons noté les opérateurs de grilles de la façon suivante :

- les opérateurs de prolongement dans la zone raffinée et à la frontière de la zone raffinée sont notés P_0^1 ;
- les opérateurs de correction en flux dans la zone raffinée sont notés R_0^1 , en précisant à quelle inconnue s'applique la correction en flux ;
- les opérateurs de restriction de la solution fine dans la zone raffinée sont notés $\widehat{R}_0^1(Z)$ et $\widehat{R}_0^1(\rho)$ pour les inconnues scalaires Z et ρ ;
- les opérateurs de restriction de la solution fine dans la zone raffinée sont notés $\widehat{R}_0^1(\vec{v})$ pour l'inconnue vectorielle \vec{v} ;

Tous les opérateurs utilisés sont construits tels qu'ils vérifient le bilan de masse après leur application et sont définis au paragraphe I.2 du chapitre 3.

II.3.3 Résultats numériques

Résultats numériques pour des maillages monogrilles. Sur les Figures 4.61 sont représentées la coupe verticale en $x = 0.5$ mm et la coupe horizontale en $y = 10$ mm de la fraction de mélange pour les maillages 21×63 et 63×189 et la fraction de mélange approchée évaluée par la relation (III.2) de l'Annexe C.

Les Figures 4.61 nous assurent de la convergence au maillage pour la fraction de mélange. La courbe de la fraction de mélange approchée est distincte des courbes des maillages 21×63 et 63×189 car, pour évaluer la solution analytique, nous supposons que la convection dans le sens perpendiculaire à l'écoulement est nulle. Cette hypothèse n'est pas vérifiée pour le modèle à faible nombre de Mach choisi. Toutefois, nous notons que nos résultats numériques sont du même ordre, ce qui confirme leur validité.

Nous montrons sur la Figure 4.62 la convergence au maillage pour la première composante du champ de vitesse avec les coupes verticales en $x = 0.5$ mm et en $x = 15.5$ mm pour les maillages 21×63 et 63×189 .

Les Figures 4.62(a) et 4.62(b) confirment que la première composante du champ de vitesse est non nulle. C'est pourquoi sur les profils de la fraction de mélange de la Figure 4.61, les solutions obtenues avec les maillages 21×63 et 63×189 sont décalées par rapport à la solution approchée. La convergence au maillage pour la seconde composante du champ de vitesse est atteinte comme montrent les Figures 4.63(a) et 4.63(b), qui présentent les coupes horizontales de la seconde composante du champ de vitesse en $y = 10$ mm et en $y = 70$ mm pour les maillages 21×63 et 63×189 . Les coupes horizontales de la fraction massique des espèces (combustible, oxydant, inerte et produits) en $y = 10$ mm pour les maillages 21×63 et 63×189 et la fraction massique approchée correspondante sont données sur les Figures 4.64(a)-4.64(d).

Sur la Figure 4.64(a), nous notons que pour les maillages 21×63 et 63×189 , la fraction massique de combustible calculée est supérieure à celle de la solution approchée. Toutefois, l'évaluation de la fraction massique de combustible approchée suppose que la diffusion dans le sens de l'écoulement est nulle ; cette hypothèse n'est pas vérifiée dans notre modèle.

La Figure 4.65 présente la coupe horizontale de la température en $y = 10$ mm pour les maillages 21×63 et 63×189 et la température approchée. La Figure 4.66 donne le champ de vitesse pour le maillage 21×63 à l'état stationnaire.

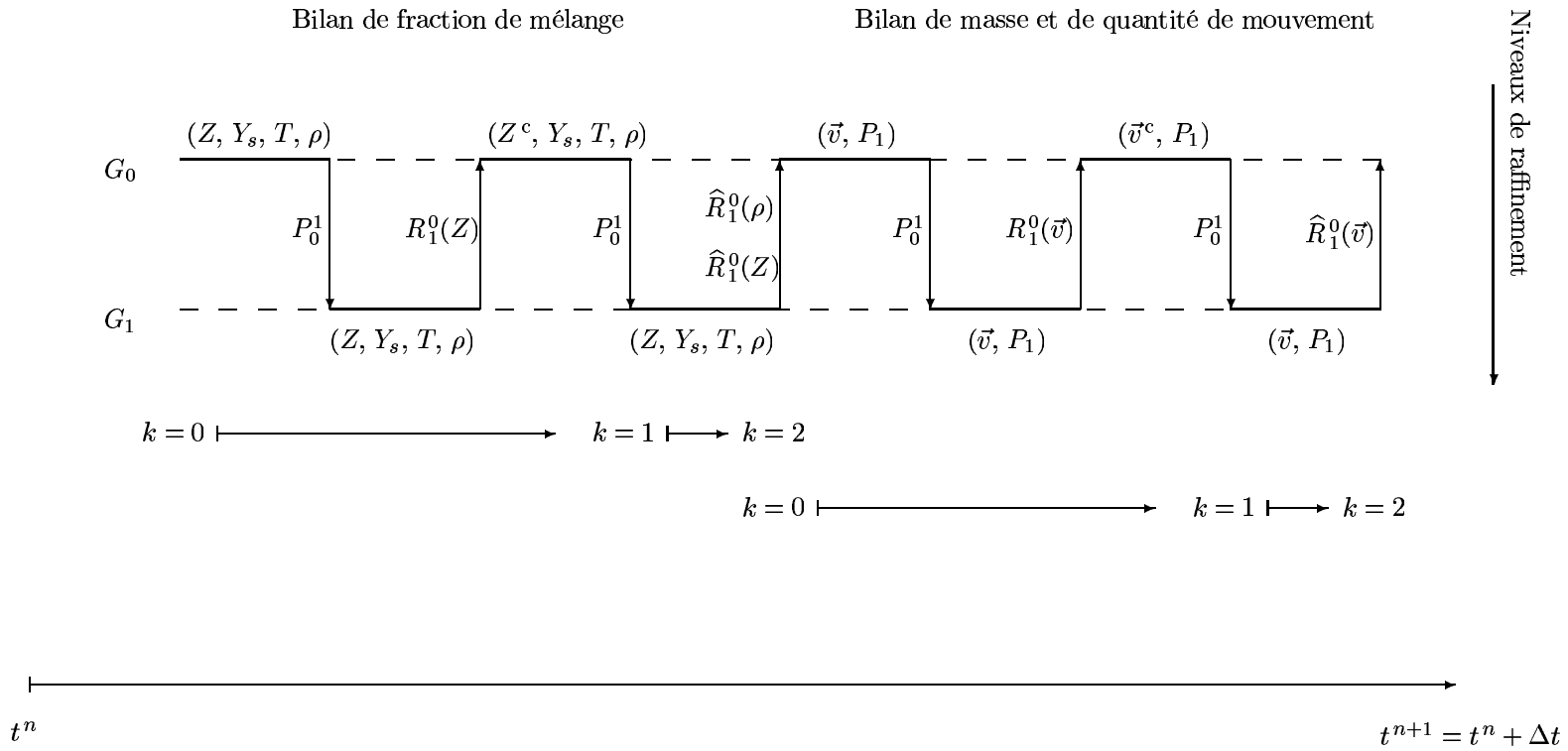
Sur la Figure 4.67 est représentée la fraction de mélange à l'état stationnaire pour le maillage 63×189 , tandis que la Figure 4.68 présente le champ de température à l'état stationnaire pour le maillage 63×189 .

Les hauteurs de flamme obtenues sont :

- $H_f = 108$ mm pour le maillage 21×63 ;
- $H_f = 120$ mm pour le maillage 63×189 .

Ces hauteurs de flamme sont au-delà de la hauteur de flamme calculée avec la solution analytique puisque nous ne vérifions pas que la diffusion est négligeable dans le sens de l'écoulement ni que la convection est négligeable dans le sens perpendiculaire à l'écoulement. De plus, la valeur stœchiométrique de la fraction de mélange est égale à $Z_c = 0.05482$, qui est une valeur très petite donc difficile à capturer précisément.

Fig. 4.60 – Schematisation de l'algorithme de raffinement local à deux niveaux G_0 et G_1 pour deux cycles $\gamma(0) = 2$ pour le problème de la flamme de diffusion laminaire.



(a) Coupe verticale en $x = 0.5$ mm

(b) Coupe verticale en $x = 15.5$ mm

(c) Coupe horizontale en $y = 10$ mm

(d) Coupe horizontale en $y = 70$ mm

FIG. 4.61 – Coupes de la fraction de mélange pour les maillages : $- - -$ 21×63 , $-$ 63×189 et $—$ la fraction de mélange approchée.

(a) En $x = 0.5$ mm

(b) En $x = 15.5$ mm

FIG. 4.62 – Coupes verticales de la première composante du champ de vitesse pour les maillages :
- - - 21×63 et - 63×189 .

(a) En $y = 10$ mm

(b) En $y = 70$ mm

FIG. 4.63 – Coupes horizontales de la seconde composante du champ de vitesse pour les maillages :
- - - 21×63 et - 63×189 .

(a) Fraction massique de combustible

(b) Fraction massique d'oxydant

(c) Fraction massique des produits

(d) Fraction massique d'inerte

FIG. 4.64 – Coupes horizontales en $y = 10$ mm pour les maillages : $-\ - -$ 21×63 et $-$ 63×189 et $—$ les fractions massiques approchées.

FIG. 4.65 – Coupe horizontale en $y = 10$ mm de la température pour les maillages : — — — 21×63 et - 63×189 et — la température approchée.

FIG. 4.66 – Champ de vitesse à l'état stationnaire.

FIG. 4.67 – Fraction de mélange à l'état stationnaire.

FIG. 4.68 – Température à l'état stationnaire.

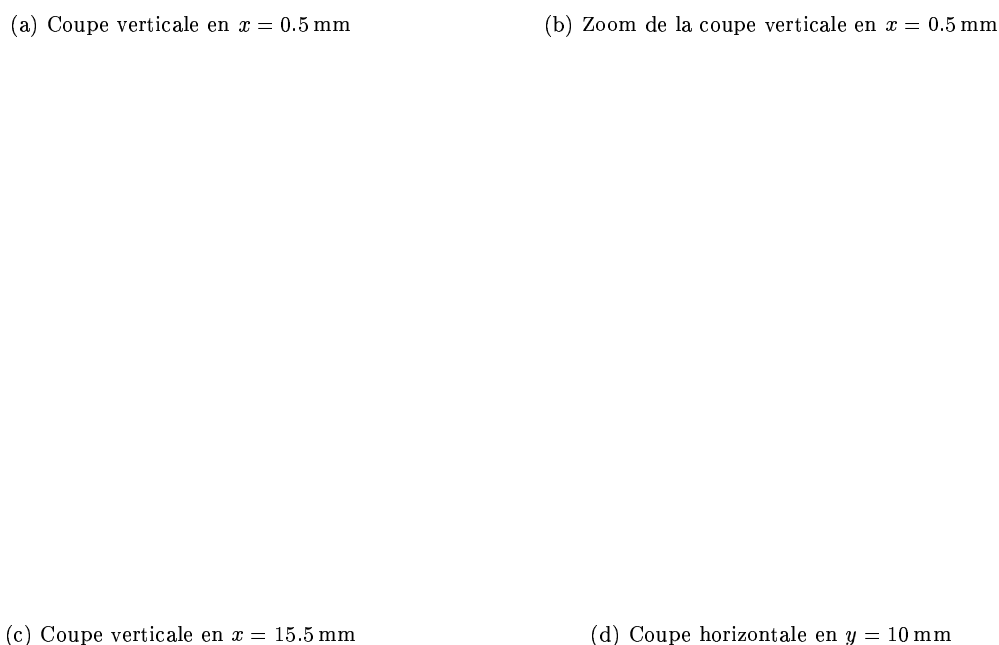


FIG. 4.69 – Coupes de la fraction de mélange pour les maillages : - - - 21×63 , — solution grossière du maillage raffiné 21×63 , solution fine du maillage raffiné 21×63 , - 63×189 et — la fraction de mélange approchée.

Résultats numériques pour des maillages avec raffinement local multi-niveaux. Sur les Figures 4.69 sont représentées les coupes verticales en $x = 0.5$ mm et les coupes horizontales en $y = 10$ mm de la fraction de mélange pour les maillages 21×63 , 21×63 avec un niveau de raffinement, 63×189 et la fraction de mélange approchée.

D'après les Figures 4.69(a)-4.69(d), nous observons que les solutions fine et grossière du maillage raffiné et la solution du maillage 63×189 sont superposées. Nous notons donc une amélioration de la précision des solutions numériques à l'aide de la méthode de raffinement local multi-niveaux.

Sur les Figures 4.70 sont représentées la coupe verticale en $x = 0.5$ mm de la première composante du champ de vitesse et la coupe horizontale de la seconde composante du champ de vitesse en $y = 10$ mm pour les maillages 21×63 , 21×63 avec un niveau de raffinement, 63×189 .

La Figure 4.70(a) nous renseigne sur le gain en précision de la méthode de raffinement local pour la première composante du champ de vitesse. La solution du maillage 63×189 et la solution fine du maillage 21×63 raffiné sont superposées. Ce gain est confirmé par la Figure 4.70(b) qui présente la coupe horizontale de la seconde composante du champ de vitesse en $y = 10$ mm.

Sur la Figure 4.71(a) est représentée la fraction de mélange à l'état stationnaire dans la zone

(a) Coupe verticale de la première composante du champ de vitesse en $x = 0.5$ mm (b) Coupe horizontale de la seconde composante du champ de vitesse en $y = 10$ mm

FIG. 4.70 – Coupes pour les maillages : - - - 21×63 , - - - - solution grossière du maillage raffiné 21×63 , - - - - - solution fine du maillage raffiné 21×63 , - 63×189 .

(a) Fraction de mélange à l'état stationnaire

(b) Champ de vitesse à l'état stationnaire

FIG. 4.71 – Solutions fines du maillage raffiné 21×63 .

raffinée. La Figure 4.71(b) présente le champ de vitesse à l'état stationnaire dans la zone raffinée. En conclusion, nous avons vu que deux hypothèses sont nécessaires pour le calcul de la solution analytique au problème d'une flamme de diffusion laminaire (voir Annexe C). Il s'agit de :

- les diffusions massique, de quantité de mouvement et thermique sont négligeables dans le sens de l'écoulement ;
- la convection est négligeable dans le sens perpendiculaire à l'écoulement.

Ces deux hypothèses ne sont pas vérifiées dans le système d'équations de bilan du modèle réactif à faible nombre de Mach, qui est plus général. En conséquence, nous notons un écart significatif entre les valeurs des quantités estimées par notre méthode numérique et celles données par le calcul de la solution analytique aux points discrets considérés. Cependant, nos résultats numériques sont du même ordre, ce qui confirme la validité des méthodes numériques proposées.

Nous observons que la convergence au maillage est atteinte pour toutes les quantités calculées. De plus, nous avons observé que la technique de raffinement local multi-niveaux améliore de façon considérable la précision obtenue, en particulier pour le champ de vitesse.

Conclusion

Cette étude présente le développement et l'analyse de méthodes numériques multi-niveaux appliquées à la résolution de problèmes d'écoulements réactifs à faible nombre de Mach. Plusieurs résultats sont à souligner :

- Nous avons construit une méthode de projection incrémentale adaptée à la résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach. Cette technique s'appuie sur une étape de projection qui permet de satisfaire une contrainte divergentielle pour le champ de vitesse. Dans notre cas, l'étape de projection utilise la forme originale de l'équation de bilan de masse, *i.e.* $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$. Par conséquent, nous avons élaboré une méthode de projection pour les écoulements à masse volumique variable, susceptible donc de s'appliquer à la résolution d'équations de bilan caractérisant une large gamme de phénomènes physiques.
- Une méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux a été développée pour les écoulements réactifs à faible nombre de Mach. En s'inspirant de la méthode originellement proposée par Angot *et al.* [2, 31], nous avons utilisé la technique de correction en flux à l'interface pour résoudre des problèmes de combustion. Des opérateurs de grilles, qui transmettent les informations d'un niveau grossier donné à un niveau plus fin et inversement, ont été construits tels qu'ils vérifient l'équation de bilan de masse sur chacun des niveaux de grilles après leur application. La construction de ces opérateurs est intimement liée à notre méthode de projection en raison de la résolution, à l'étape de projection, d'un problème de Poisson avec des conditions aux limites de type Neumann homogène.
- La solution numérique ainsi construite a été analysée pour trois problèmes dédiés à la représentation des écoulements à faible nombre de Mach. Le premier problème concerne un écoulement instationnaire à masse volumique variable, où seules les inconnues hydrodynamiques sont calculées. Un problème de convection naturelle avec de grandes différences de température est le second cas-test qui nous a permis de tester notre méthode numérique. Enfin, le troisième problème concerne une flamme de diffusion laminaire. Pour chacun de ces problèmes, nous avons étudié la robustesse de la méthode numérique et nous avons analysé le gain en précision de la méthode de raffinement local multi-niveaux.

En conclusion, le modèle physique et les méthodes numériques proposés sont bien adaptés à chacun de ces problèmes. De plus, la méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux améliore la précision des résultats numériques obtenus.

Le prolongement naturel de cette étude serait l'utilisation d'indicateurs d'erreurs pour sélectionner de façon automatique les régions du domaine de calcul où les variations des quantités physiques sont grandes, par exemple les variations de la masse volumique. Nous pensons notamment à un indicateur d'erreur portant sur la quantité $\vec{v} \cdot \nabla \rho$, reliant la variation de la masse volumique et le champ de vitesse, caractéristique d'une flamme par exemple. De plus, la comparaison des temps de calcul à précision donnée serait alors plus significative.

Il reste par ailleurs à effectuer une étude théorique des propriétés numériques de la méthode de projection proposée, et notamment de préciser l'ordre en temps du schéma.

Enfin, à l'aide de la technique de raffinement de maillage, il est possible de considérer plusieurs échelles spatiales : l'échelle de la grille initiale et les échelles des grilles raffinées. Alors que l'on peut résoudre un modèle physico-numérique donné sur l'échelle de la grille initiale (par exemple, un chimie simple dans le cas de la flamme de diffusion, ou encore les équations de conservation de la mécanique des fluides pour un mélange gazeux), il est possible de résoudre un modèle physique plus fin, "microscopique", sur les grilles raffinées (par exemple, une chimie complexe dans le cas de la flamme de diffusion, ou encore les résultats de la théorie cinétique des gaz) ou encore des méthodes numériques différentes. La difficulté réside alors dans les changements d'échelles, où l'on doit s'assurer de la cohérence des conditions aux limites, des inconnues considérées sur chacune

des échelles spatiales (prises de moyenne).

Annexe A

Etablissement des équations de bilan pour les écoulements réactifs laminaires en phase gazeuse à faible nombre de Mach avec une chimie simple et infiniment rapide

I Fonctions β_s pour les équations de bilan de la masse des espèces

Hypothèse I.1 Chimie simple

Nous considérons que les réactions chimiques sont simples, dans le sens où le combustible (\mathcal{M}_F) et l'oxydant (\mathcal{M}_{Ox}) réagissent dans une unique réaction irréversible pour donner des produits brûlés (\mathcal{M}_P). Seules deux espèces réactives ($\mathcal{M}_F, \mathcal{M}_{Ox}$) sont présentes. Nous supposons de plus la présence d'un inerte, noté \mathcal{M}_I . Nous écrivons :



où $\hat{\nu}_s$ (respectivement $\tilde{\nu}_s$) est le coefficient stœchiométrique molaire relatif à une espèce \mathcal{M}_s réactive (respectivement produite) dans la réaction.

La première idée est de simplifier les équations de bilan de la masse des espèces en se basant sur l'hypothèse de chimie simple.

Nous rappelons que pour chaque espèce $\mathcal{M}_s, \forall s \in \{1; N_s\}$:

$$\dot{\rho}_s = (\tilde{\nu}_s - \hat{\nu}_s) W_s \dot{\omega}$$

Le taux d'avancement de la réaction est en effet le même pour toutes les espèces :

$$\dot{\omega} = \frac{\dot{\rho}_s}{(\tilde{\nu}_s - \hat{\nu}_s) W_s}, \quad \forall s \in \{1; N_s\}$$

Nous définissons alors des fonctions $\alpha_s, \forall s \in \{1; N_s\}$, telles que :

$$\alpha_s = \frac{Y_s}{W_s (\tilde{\nu}_s - \hat{\nu}_s)} \quad (\text{I.2})$$

En particulier, pour le combustible et l'oxydant, ces fonctions (I.2) se mettent sous la forme :

$$\alpha_F = -\frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F}, \quad \alpha_{Ox} = -\frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}$$

Pour éliminer les termes source de réaction chimique dans les équations de bilan de la masse des espèces (V.26) (sauf une), on définit la fonction couplée β_s , $\forall s \in \{1; N_s - 1\}$, telle que :

$$\beta_s = \alpha_s - \alpha_F$$

En utilisant cette définition, on peut simplifier les équations de bilan pour les espèces combustible et oxydant en utilisant la fonction $\beta_{Ox} = \alpha_{Ox} - \alpha_F$ de la manière suivante :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_F) + \nabla \cdot (\rho Y_F \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_F) + \dot{\rho}_F \right] \times \frac{1}{\hat{\nu}_F W_F}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_{Ox}) + \nabla \cdot (\rho Y_{Ox} \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{Ox}) + \dot{\rho}_{Ox} \right] \times \frac{1}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}$$

Ce qui nous donne en soustrayant les deux équations précédentes :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} - \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(\frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} - \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \right) \vec{v} \right]$$

$$= \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} - \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \right) \right]$$

D'où, d'après l'hypothèse de chimie simple, nous obtenons l'équation de bilan pour la fonction couplée β_s sous la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \beta_s) + \nabla \cdot (\rho \beta_s \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla \beta_s) \quad (\text{I.3})$$

Les conditions initiales et les conditions aux limites sont directement issues de celles associées aux fractions massiques des espèces

II Fonction β_T pour l'équation de bilan d'énergie

De la même manière, nous voudrions simplifier l'équation de bilan d'énergie. C'est possible sous l'hypothèse de faible variation de la pression thermodynamique, qui permet l'approximation :

$$\frac{dP_0}{dt} \approx 0$$

ou encore, si l'on suppose que le domaine physique est ouvert, impliquant de ce fait l'uniformité en espace (toujours vraie), mais aussi en temps :

$$P_0 = P_{\text{atm}}$$

C'est le cas que nous considérons :

Hypothèse II.1 Domaine Ω ouvert

Nous supposons que le domaine d'étude Ω est relié à l'atmosphère. De ce fait,

$$P_0 = P_{\text{atm}} \Rightarrow \frac{dP_0}{dt} = 0$$

Sous l'hypothèse II.1 énoncée précédemment, l'équation de bilan de l'énergie se simplifie en :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho c_p T \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \Delta H_r^0 \frac{\dot{\rho}_F}{\hat{\nu}_F W_F} \quad (\text{II.4})$$

où $-\Delta H_r^0$ est la chaleur de réaction à la température de référence T^0 définie par :

$$-\Delta H_r^0 = \hat{\nu}_F W_F h_{f,F}^0 + \hat{\nu}_{Ox} W_{Ox} h_{f,Ox}^0 - \hat{\nu}_P W_P h_{f,P}^0$$

Il est clair que l'équation aux dérivées partielles (II.4) possède la même forme que celles associées aux bilans de la masse des espèces (équation de convection-diffusion avec un terme source de réaction chimique) si et seulement si $Pr = Sc$. Nous considérons alors l'hypothèse suivante :

Hypothèse II.2 $Le = 1$

Les espèces et la chaleur diffusent à la même vitesse, *i.e.*

$$Le = 1 \Rightarrow Pr = Sc$$

Sous cette hypothèse II.2, nous considérerons la fonction α_T telle que :

$$\alpha_T = \frac{c_p(T - T_{Ox}^0)}{\Delta H_r^0}$$

A cette fonction, nous associons la fonction couplée $\beta_T = \alpha_T - \alpha_{Ox}$, s'écrivant :

$$\beta_T = \frac{c_p(T - T_{Ox}^0)}{\Delta H_r^0} + \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}$$

Nous modifions l'équation de bilan de la masse volumique de l'espèce oxydant \mathcal{M}_{Ox} en :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}) + \nabla \cdot \left(\rho \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \vec{v} \right) &= \frac{1}{Re \cdot Sc} \nabla \cdot (\rho D \nabla \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}) + \frac{\dot{\rho}_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha_{Ox}) + \nabla \cdot (\rho \alpha_{Ox} \vec{v}) &= \frac{1}{Re \cdot Sc} \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_{Ox}) + \frac{\dot{\rho}_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \end{aligned}$$

Et l'équation de bilan d'énergie du mélange (II.4) se modifie en :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho c_p T \vec{v}) = \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \Delta H_r^0 \frac{\dot{\rho}_F}{\hat{\nu}_F W_F} \quad \text{avec } c_p T = \Delta H_r^0 \alpha_T + c_p T_{Ox}^0$$

$$\begin{aligned} \Delta H_r^0 \left\{ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha_T) + \nabla \cdot (\rho \alpha_T \vec{v}) \right\} &= \\ \Delta H_r^0 \left\{ \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot \left(\lambda \nabla \frac{\alpha_T}{c_p} \right) + \frac{\dot{\rho}_F}{\hat{\nu}_F W_F} \right\} &+ c_p T_{Ox}^0 \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) \right\} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha_T) + \nabla \cdot (\rho \alpha_T \vec{v}) = \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot \left(\lambda \nabla \frac{\alpha_T}{c_p} \right) + \frac{\dot{\rho}_F}{\hat{\nu}_F W_F}$$

D'où, en soustrayant les deux équations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha_{Ox}) + \nabla \cdot (\rho \alpha_{Ox} \vec{v}) &= \frac{1}{Re \cdot Sc} \nabla \cdot (\rho D \nabla \alpha_{Ox}) + \frac{\dot{\rho}_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha_T) + \nabla \cdot (\rho \alpha_T \vec{v}) &= \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla \alpha_T \right) + \frac{\dot{\rho}_F}{\hat{\nu}_F W_F} \quad \text{car } c_p \text{ constante} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \beta_T) + \nabla \cdot (\rho \beta_T \vec{v}) = \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot (\rho D \nabla \beta_T) \quad (II.5)$$

Les équations (I.3) et (II.5) sont les équations de bilan de la masse des espèces et de la température de Shvab-Zel'dovich. Elle se mettent sous la forme générique suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) + \nabla \cdot (\rho \varphi \vec{v}) = \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot (\rho D \nabla \varphi) \quad (II.6)$$

avec $\varphi = \beta_s$ ou β_T . Les conditions initiales et les conditions aux limites sont directement issues de celles associées aux fractions massiques des espèces et à la température.

L'établissement de ces équations ne suppose pas l'uniformité des coefficients de transport (viscosité dynamique μ , conductivité thermique λ , *etc.*) ou de la chaleur spécifique c_p du mélange, ni l'égalité de toutes les chaleurs spécifiques $c_{p,s}$ des espèces.

Pour les équations de bilan de la conservation de la masse des espèces, les équations (I.3) se dérivent sans les hypothèses de faible nombre de Mach et du nombre de Lewis égal à l'unité. En fait, seules les hypothèses d'égalité des coefficients de diffusion D_s des espèces dans le mélange, de non-considération des effets Soret et de baro-diffusion et d'une chimie simple et infiniment rapide sont prises en compte. Par conséquent, cette formulation possède un champ d'application raisonnablement large pour traiter la conservation de la masse des espèces.

Bien que l'hypothèse de chimie simple soit satisfaisante dans de nombreux problèmes de combustion, il est parfois important, dans les investigations précises, de remplacer l'équation chimique (II.3) par un schéma cinétique plus complexe de la forme (II.2). Dans ce cas, les fonctions couplées vérifient aussi une équation du type (II.6).

Pour obtenir l'équation de bilan de conservation de l'énergie sous une forme simplifiée, nous avons fait les hypothèses d'absence des effets Dufour, d'un nombre de Lewis égal à 1, et de variations de la pression thermodynamique négligeables. De ce fait, la formulation du bilan énergétique est moins générale que celle de la conservation de la masse des espèces. Toutefois, une autre équation de type (II.5), portant sur l'enthalpie totale H , peut être obtenue moyennant des hypothèses moins restrictives, voir Borghi et Champion [11].

III La fraction de mélange Z

Considérons deux jets ayant des propriétés uniformes sur une portion de la frontière : un jet de combustible (d'indice F , d'exposant 0 pour l'état de référence), et un jet d'oxydant (d'indice Ox , d'exposant 0 pour l'état de référence).

Supposons qu'il n'y a pas d'oxydant dans le jet de combustible, c'est à dire :

$$(Y_{Ox}^0)_F = 0$$

et qu'il n'y a pas de combustible dans le jet d'oxydant, *i.e.*

$$(Y_F^0)_{Ox} = 0$$

Pour une chimie simple, une équation chimique du type (I.1) peut être adoptée. On définit alors la fraction de mélange Z , en termes de fonctions couplées β pour le combustible et l'oxydant, sous la forme :

$$Z = \frac{\beta_{Ox} - (\beta_{Ox})_{Ox}^0}{(\beta_{Ox})_F^0 - (\beta_{Ox})_{Ox}^0} \quad (\text{III.7})$$

avec la fonction couplée β_{Ox} définie par :

$$\beta_{Ox} = \alpha_{Ox} - \alpha_F = -\frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} + \frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} \quad (\text{III.8})$$

Cette formulation par la fraction de mélange est plus intéressante que celle par les fonctions couplées β dans la mesure où elle caractérise le mélange. En effet, $Z = 1$ dans le jet de combustible, et $Z = 0$ dans le jet d'oxydant. Par ailleurs, il est toujours possible de définir la fraction de mélange dans le cas de schémas chimiques plus complexes, voir Williams [58].

Proposition III.1

La fraction de mélange vérifie l'équation de bilan suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \nabla \cdot (\rho Z \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (\text{III.9})$$

Le terme source de réaction chimique n'apparaît pas dans l'équation (III.9) car la fraction de mélange Z est un scalaire conservé, une quantité scalaire qui n'est jamais créée ni détruite par les réactions chimiques.

Démonstration

Par définition, on a :

$$Z = \frac{\beta_{Ox} - (\beta_{Ox})_{Ox}^0}{(\beta_{Ox})_F^0 - (\beta_{Ox})_{Ox}^0}$$

D'où

$$\beta_{Ox} = \left((\beta_{Ox})_F^0 - (\beta_{Ox})_{Ox}^0 \right) Z + (\beta_{Ox})_{Ox}^0$$

Comme $(\beta_{Ox})_{Ox}^0$ et $(\beta_{Ox})_F^0$ sont des constantes et que la fonction β_s vérifie l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \beta_{Ox}) + \nabla \cdot (\rho \beta_{Ox} \vec{v}) = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla \beta_{Ox})$$

Nous pouvons conclure que la fraction de mélange satisfait l'équation aux dérivées partielles (III.9).

□

La conséquence principale de la formulation en fraction de mélange est l'expression explicite des fractions massiques Y_s de toutes les espèces \mathcal{M}_s , $\forall s \in \{1; N_s\}$, en terme de fraction de mélange Z et de fraction massique de combustible Y_F . En effet, nous obtenons :

$$Y_s = (Y_s)_{Ox}^0 + \left((Y_s)_F^0 - (Y_s)_{Ox}^0 \right) Z - \frac{\nu_s W_s}{\hat{\nu}_F W_F} (Y_F - Y_F^0 Z), \quad \forall s \in \{1; N_s - 2\} \quad (\text{III.10})$$

où ν_s est le coefficient stoechiométrique relatif à l'espèce \mathcal{M}_s soit comme réactant ($\hat{\nu}_s$) soit comme produits ($\check{\nu}_s$).

En particulier, la fraction massique d'oxydant s'écrit :

$$Y_{Ox} = Y_{Ox}^0 (1 - Z) + \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F} (Y_F - Y_F^0 Z) \quad (\text{III.11})$$

Démonstration

Tout d'abord, nous avons :

$$Z = \frac{\beta_s - (\beta_s)_{Ox}^0}{(\beta_s)_F^0 - (\beta_s)_{Ox}^0}$$

avec la fonction β_s telle que :

$$\beta_s = \frac{Y_s}{\nu_s W_s} + \frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F}$$

Par conséquent, on obtient que

$$\begin{aligned} (\beta_s)_{Ox}^0 &= \left(\frac{Y_s}{\nu_s W_s} + \frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} \right)_{Ox}^0 \\ &= \frac{(Y_s)_{Ox}^0}{\nu_s W_s} \end{aligned}$$

car $(Y_F)_{Ox}^0 = 0$. De plus,

$$\begin{aligned} (\beta_s)_F^0 &= \left(\frac{Y_s}{\nu_s W_s} + \frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} \right)_F^0 \\ &= \frac{(Y_s)_F^0}{\nu_s W_s} + \frac{Y_F^0}{\hat{\nu}_F W_F} \end{aligned}$$

D'où

$$\frac{Y_s}{\nu_s W_s} + \frac{Y_F}{\hat{\nu}_F W_F} = \left[\left(\frac{(Y_s)_F^0}{\nu_s W_s} + \frac{Y_F^0}{\hat{\nu}_F W_F} \right) - \frac{(Y_s)_{Ox}^0}{\nu_s W_s} \right] Z + \frac{(Y_s)_{Ox}^0}{\nu_s W_s}$$

$$Y_s = -Y_F \frac{\nu_s W_s}{\hat{\nu}_F W_F} + \left((Y_s)_F^0 - (Y_s)_{Ox}^0 + Y_F^0 \frac{\nu_s W_s}{\hat{\nu}_F W_F} \right) Z + (Y_s)_{Ox}^0$$

Donc

$$Y_s = (Y_s)_{Ox}^0 + \left((Y_s)_F^0 - (Y_s)_{Ox}^0 \right) Z - \frac{\nu_s W_s}{\hat{\nu}_F W_F} (Y_F - Y_F^0 Z)$$

En particulier, la fraction massique d'oxydant s'écrit sous la forme :

$$Y_{Ox} = Y_{Ox}^0 (1 - Z) + \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F} (Y_F - Y_F^0 Z)$$

□

Par ailleurs, la fraction de mélange permet d'obtenir la température du mélange en la définissant sous la forme :

$$Z = \frac{\beta_T - (\beta_T)_{\text{Ox}}^0}{(\beta_T)_{\text{F}}^0 - (\beta_T)_{\text{Ox}}^0} \quad (\text{III.12})$$

où la fonction couplée β_T est définie par :

$$\beta_T = \alpha_T - \alpha_{\text{Ox}} = \frac{c_p(T - T_{\text{Ox}}^0)}{\Delta H_r^0} + \frac{Y_{\text{Ox}}}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \quad (\text{III.13})$$

Sous l'hypothèse II.1 que les variations de pression thermodynamique sont négligeables, cette forme (III.12) de la fraction de mélange vérifie la même équation aux dérivées partielles (III.9) si les conditions initiales et les conditions aux limites sont identiques. Elle permet d'obtenir la température du mélange en notant que :

$$T = T_{\text{Ox}}^0 + (T_{\text{F}}^0 - T_{\text{Ox}}^0)Z + \frac{Q^0}{c_p}(Y_{\text{F}} - Y_{\text{F}}^0 Z) \quad (\text{III.14})$$

où Q^0 est la chaleur de réaction à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, définie par :

$$Q^0 = \frac{-\Delta H_r^0}{\hat{\nu}_{\text{F}}W_{\text{F}}} = h_{\text{f,F}}^0 + \frac{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}}{\hat{\nu}_{\text{F}}W_{\text{F}}} h_{\text{f,Ox}}^0 - \frac{\hat{\nu}_{\text{P}}W_{\text{P}}}{\hat{\nu}_{\text{F}}W_{\text{F}}} h_{\text{f,P}}^0$$

Démonstration

Par définition, nous savons que :

$$Z = \frac{\beta_T - (\beta_T)_{\text{Ox}}^0}{(\beta_T)_{\text{F}}^0 - (\beta_T)_{\text{Ox}}^0}$$

avec la fonction β_T telle que :

$$\beta_T = \frac{c_p(T - T_{\text{Ox}}^0)}{\Delta H_r^0} + \frac{Y_{\text{Ox}}}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}}$$

Ce qui est encore équivalent à :

$$T = \frac{\Delta H_r^0}{c_p} \left(\beta_T - \frac{Y_{\text{Ox}}}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \right) + T_{\text{Ox}}^0$$

De plus,

$$\begin{aligned} (\beta_T)_{\text{Ox}}^0 &= \left(\frac{c_p(T - T_{\text{Ox}}^0)}{\Delta H_r^0} + \frac{Y_{\text{Ox}}}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \right)_{\text{Ox}}^0 \\ &= \frac{Y_{\text{Ox}}^0}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} (\beta_T)_{\text{F}}^0 &= \left(\frac{c_p(T - T_{\text{Ox}}^0)}{\Delta H_r^0} + \frac{Y_{\text{Ox}}}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \right)_{\text{F}}^0 \\ &= \frac{c_p(T_{\text{F}}^0 - T_{\text{Ox}}^0)}{\Delta H_r^0} \end{aligned}$$

Donc la fonction β_T se met sous la forme :

$$\begin{aligned} \beta_T &= \left((\beta_T)_{\text{F}}^0 - (\beta_T)_{\text{Ox}}^0 \right) Z + (\beta_T)_{\text{Ox}}^0 \\ &= \left(\frac{c_p(T_{\text{F}}^0 - T_{\text{Ox}}^0)}{\Delta H_r^0} - \frac{Y_{\text{Ox}}^0}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \right) Z + \frac{Y_{\text{Ox}}^0}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} \\ &= \frac{c_p}{\Delta H_r^0} (T_{\text{F}}^0 - T_{\text{Ox}}^0) Z + \frac{Y_{\text{Ox}}^0}{\hat{\nu}_{\text{Ox}}W_{\text{Ox}}} (1 - Z) \end{aligned}$$

D'où la température du mélange est :

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{\Delta H_r^0}{c_p} \left(\frac{c_p}{\Delta H_r^0} (T_F^0 - T_{Ox}^0) Z + \frac{Y_{Ox}^0}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} (1 - Z) - \frac{Y_{Ox}}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \right) + T_{Ox}^0 \\
 &= T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0) Z - \frac{\Delta H_r^0 / c_p}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} (Y_{Ox}^0 (1 - Z) - Y_{Ox}) \\
 &= T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0) Z - \frac{\Delta H_r^0 / c_p}{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}} \left(Y_{Ox}^0 (1 - Z) - \left(Y_{Ox}^0 (1 - Z) + \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F} (Y_F - Y_F^0 Z) \right) \right)
 \end{aligned}$$

En utilisant la définition de la chaleur de réaction Q^0 à la température de référence T^0 par unité de masse de combustible consommé, la température du mélange est exprimée en fonction de la fraction massique de combustible Y_F et de la fraction de mélange Z sous la forme :

$$T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0) Z + \frac{Q^0}{c_p} (Y_F - Y_F^0 Z)$$

□

Si nous supposons de plus :

Hypothèse III.1 Chimie infiniment rapide

Cette hypothèse concerne le temps de réaction chimique. On suppose qu'il est infiniment rapide. Plus particulièrement, les réactions chimiques sont tellement rapides que le combustible (\mathcal{M}_F) et l'oxydant (\mathcal{M}_{Ox}) ne peuvent coexister dans la même particule fluide sans donner immédiatement des produits brûlés (\mathcal{M}_P). La réaction chimique est localisée à la stœchiométrie du mélange, notée flamme, qui constitue alors une surface infiniment mince.

Alors au niveau de la flamme, nous avons $Y_F = Y_{Ox} = 0$ et toutes les fractions massiques des espèces et la température sont alors exprimées en terme de fraction de mélange.

Si nous introduisons le facteur stœchiométrique s et la richesse équivalente φ par :

$$s = \frac{\hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}{\hat{\nu}_F W_F}, \quad \varphi = s \frac{Y_F^0}{Y_{Ox}^0}$$

Alors, la fraction de mélange correspondante est la fraction de mélange stœchiométrique, définie par :

$$Z_c = \frac{1}{1 + \varphi} = \frac{Y_{Ox}^0 \hat{\nu}_F W_F}{Y_{Ox}^0 \nu_F W_F + Y_F^0 \nu_{Ox} W_{Ox}} \quad (\text{III.15})$$

Par conséquent, nous déterminons les différents profils des fractions massiques des espèces et de la température en fonction de cette valeur stœchiométrique à l'aide des équations (III.10), (III.11) et

(III.14). Nous obtenons :

$$\text{Pour } Z \leq Z_c \left\{ \begin{array}{l} Y_F = 0 \\ Y_{Ox} = Y_{Ox}^0 [1 - (\varphi + 1)Z] \\ Y_P = Y_{Ox}^0 \frac{(1+s)}{s} \varphi Z \\ Y_I = 1 - Y_{Ox} - Y_P \\ T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z \end{array} \right.$$

$$\text{Pour } Z \geq Z_c \left\{ \begin{array}{l} Y_F = Y_F^0 \frac{(1+\varphi)Z - 1}{\varphi} \\ Y_{Ox} = 0 \\ Y_P = Y_F^0 \frac{(1+s)(1-Z)}{\varphi} \\ Y_I = 1 - Y_F - Y_P \\ T = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} \frac{1-Z}{\varphi} \end{array} \right.$$

De plus, nous pouvons définir la température adiabatique de flamme. C'est la température maximale, atteinte pour la valeur stœchiométrique de la fraction de mélange. Elle est :

$$T_c = T_{Ox}^0 + (T_F^0 - T_{Ox}^0)Z_c + \frac{Q^0 Y_F^0}{c_p} Z_c$$

$$T_c = \frac{Y_{Ox}^0 \hat{\nu}_F W_F T_F^0 + Y_F^0 \hat{\nu}_{Ox} W_{Ox} T_{Ox}^0 + Y_{Ox}^0 Y_F^0 Q^0 / c_p}{Y_{Ox}^0 \hat{\nu}_F W_F + Y_F^0 \hat{\nu}_{Ox} W_{Ox}}$$

Annexe B

Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante ou variable

I Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique constante

Les écoulements incompressibles à masse volumique constante sont représentés par les équations de Navier-Stokes, qui sont l'équation de conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{I.1})$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho_0 \left\{ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right\} + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \nabla \cdot \tau \quad (\text{I.2})$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$.

Les équations (I.1) et (I.2) sont fondamentalement différentes de celles d'un écoulement compressible. Les équations de conservation d'un écoulement compressible sont des équations d'évolution pour la masse volumique ρ , la vitesse \vec{v} et la pression totale P . Pour des conditions initiales données, ces équations forment un problème de Cauchy bien posé. Dans le cas d'un écoulement incompressible, les équations de Navier-Stokes sont la combinaison d'une équation d'évolution (I.2) et d'une contrainte (I.1) sur le champ de vitesse, indépendante du temps. De plus, il n'y a aucune équation évidente pour la pression P_1 .

Ces équations (I.1) et (I.2) peuvent être reformulées en introduisant le concept de projection. Ce concept est basé sur la décomposition de Hodge qui sépare un champ de vecteurs arbitraire en deux composantes orthogonales : une à divergence nulle et l'autre exprimée comme le gradient d'un champ scalaire. Considérons un domaine Ω ouvert de \mathbb{R}^n , de frontière $\partial\Omega$ suffisamment régulière, et de vecteur normal \vec{n} . Soit un vecteur \vec{w} quelconque de Ω , tel que \vec{w} soit suffisamment régulier sur la frontière $\partial\Omega$ de Ω .

Alors la décomposition de Hodge du vecteur \vec{w} s'écrit sous la forme :

$$\vec{w} = \vec{w}_d + \nabla \phi \quad (\text{I.3})$$

où \vec{w}_d est solution du problème aux limites suivant :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{w}_d = 0 & \text{sur } \Omega, \\ \vec{w}_d \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

et ϕ est solution de l'équation elliptique :

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi = \nabla \cdot \vec{w} & \text{sur } \Omega, \\ \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{w} \cdot \vec{n} & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (\text{I.5})$$

Cette décomposition est orthogonale au sens du produit scalaire suivant :

$$\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \vec{v} \, d\Omega \quad (\text{I.6})$$

Avec cette décomposition, nous pouvons alors définir l'opérateur de projection orthogonal \mathbf{P} comme l'opérateur qui projete un champ de vecteurs \vec{w} sur l'espace des champs de vecteurs à divergence nulle, *i.e.*

$$\mathbf{P}(\vec{w}) = \vec{w}_d \quad (\text{I.7})$$

et la relation entre l'opérateur de projection \mathbf{P} et la composante gradient $\nabla\phi$ s'écrit :

$$\mathbf{Q}(\vec{w}) = (\mathbf{Id} - \mathbf{P})(\vec{w}) = \nabla\phi \quad (\text{I.8})$$

Notons que l'opérateur \mathbf{P} opérant sur un gradient donne zéro, *i.e.* $\mathbf{P}(\nabla\phi) = 0$, tandis qu'il laisse un champ de vecteur à divergence nulle inchangé, *i.e.* $\mathbf{P}(\vec{w}_d) = \vec{w}_d$. Nous avons alors $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$.

L'opérateur de projection \mathbf{P} s'applique aux équations de Navier-Stokes (I.1) et (I.2) en choisissant le vecteur comme :

$$\vec{w} = -(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho_0} \nabla \cdot \tau$$

Nous obtenons la formulation suivante :

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \mathbf{P} \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho_0} \nabla \cdot \tau \right) \quad (\text{I.9})$$

Cette formulation modifie les équations de Navier-Stokes en une unique équation d'évolution pour la vitesse, pour laquelle la contrainte (I.1) est automatiquement vérifiée si $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ au temps $t = 0$. Avec des conditions initiales qui vérifient la contrainte (I.1), l'équation (I.9) est un problème de Cauchy bien posé. Par ailleurs, la formulation par l'opérateur de projection \mathbf{P} nous permet de mieux comprendre le rôle du gradient de pression, qui vérifie l'équation :

$$\frac{1}{\rho_0 \gamma} \nabla P_1 = (\mathbf{Id} - \mathbf{P}) \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho_0} \nabla \cdot \tau \right) \quad (\text{I.10})$$

Alors, ∇P_1 est la composante gradient de la décomposition de Hodge, qui est éliminée lorsque l'opérateur de projection est appliqué pour satisfaire la contrainte divergentielle (I.1).

II Méthodes de projection pour les équations de Navier-Stokes des écoulements incompressibles à masse volumique variable

Dans le cas des écoulements incompressibles à masse volumique variable, les équations de conservation sont l'équation de conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{II.11})$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \left\{ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right\} + \frac{1}{\gamma} \nabla P_1 = \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \tau \quad (\text{II.12})$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, défini par $\tau = \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$.

De manière analogue au cas des écoulements incompressibles à masse volumique constante, la décomposition de Hodge d'un champ de vecteur \vec{w} sur un domaine Ω ouvert de \mathbb{R}^n , de frontière $\partial\Omega$ suffisamment régulière, et de vecteur normal \vec{n} s'écrit :

$$\vec{w} = \vec{w}_d + \frac{1}{\rho} \nabla \phi \quad (\text{II.13})$$

où \vec{w}_d est solution du problème aux limites :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{w}_d = 0 & \text{sur } \Omega, \\ \vec{w}_d \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

et ϕ est solution de l'équation elliptique :

$$\begin{cases} \mathcal{L}_\rho(\phi) = \nabla \cdot \vec{w} & \text{sur } \Omega, \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{w} \cdot \vec{n} & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{II.15})$$

avec l'opérateur elliptique du second ordre \mathcal{L}_ρ :

$$\mathcal{L}_\rho(\phi) = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \phi \right). \quad (\text{II.16})$$

Définissons le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sur Ω par :

$$\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \vec{v} \rho \, d\Omega \quad (\text{II.17})$$

Muni de ce produit scalaire, les vecteurs \vec{w}_d et $\frac{1}{\rho} \nabla \phi$ sont orthogonaux :

$$\langle \vec{w}_d, \frac{1}{\rho} \nabla \phi \rangle_H = \int_{\Omega} \vec{w}_d \cdot \nabla \phi \, d\Omega = 0 \quad (\text{II.18})$$

Nous pouvons alors définir l'opérateur de projection orthogonal \mathbf{P}_ρ comme l'opérateur qui projete un champ de vecteurs \vec{w} sur l'espace des champs de vecteurs à divergence nulle, *i.e.*

$$\mathbf{P}_\rho(\vec{w}) = \vec{w}_d \quad (\text{II.19})$$

et la relation entre l'opérateur de projection \mathbf{P}_ρ et la composante gradient $\nabla \phi$ s'écrit :

$$\mathbf{Q}_\rho(\vec{w}) = (\mathbf{Id} - \mathbf{P}_\rho)(\vec{w}) = \frac{1}{\rho} \nabla \phi \quad (\text{II.20})$$

Comme précédemment, l'opérateur \mathbf{P}_ρ opérant sur un gradient donne zéro, *i.e.* $\mathbf{P}_\rho(\nabla \phi) = 0$, tandis qu'il laisse un champ de vecteur à divergence nulle inchangé, *i.e.* $\mathbf{P}_\rho(\vec{w}_d) = \vec{w}_d$. Nous avons alors $\mathbf{P}_\rho^2 = \mathbf{P}_\rho$.

En appliquant l'opérateur de projection \mathbf{P}_ρ aux équations de Navier-Stokes (II.11) et (II.12) avec $\vec{w} = -(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau$, nous obtenons la formulation par projection suivante :

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \mathbf{P}_\rho \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau \right) \quad (\text{II.21})$$

Nous avons alors modifié une équation d'évolution et une contrainte divergentielle en une unique équation d'évolution pour le champ de vitesse. Le gradient de pression pour les écoulements incompressibles à masse volumique variable est donné par :

$$\frac{1}{\rho} \nabla P_1 = (\mathbf{Id} - \mathbf{P}_\rho) \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau \right) \quad (\text{II.22})$$

Par ailleurs, si nous possédons une estimation du champ de pression P_1 , noté P_1^e , alors l'équation (II.22) pour le gradient de pression peut s'écrire sous la forme équivalente :

$$\frac{1}{\rho} \nabla \delta = (\mathbf{Id} - \mathbf{P}_\rho) \left(-(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau - \frac{1}{\rho} \nabla P_1^e \right) \quad (\text{II.23})$$

où δ satisfait $P_1 = \delta + P_1^e$. Cette formulation conduit aux méthodes de projection incrémentales.

Annexe C

Solutions analytiques pour le problème de la flamme de diffusion laminaire

I Hypothèses

- (H1) La géométrie du problème est bidimensionnelle, avec un plan de symétrie ;
(H2) Les réactions chimiques sont tellement rapides que l'oxydant et le combustible ne peuvent coexister dans la même particule fluide sans donner immédiatement des produits brûlés. La réaction chimique est localisée à la stœchiométrie du mélange, notée flamme où $Y_F = Y_{O_x} = 0$. De plus, il n'y a pas d'oxydant dans le jet fuel et il n'y a pas de fuel dans le jet oxydant : $(Y_{O_x})_F^0 = 0$, $(Y_F)_{O_x}^0 = 0$;
(H3) Seules trois espèces chimiques réactives sont en présence, le combustible \mathcal{M}_F , l'oxydant \mathcal{M}_{O_x} et les produits brûlés \mathcal{M}_P . Nous supposons que ces corps réagissent suivant la réaction unique :



où ν_{O_x} est le coefficient stœchiométrique molaire relatif à l'oxydant \mathcal{M}_{O_x} dans la réaction et les taux d'avancement de la réaction vérifient :

$$\frac{\dot{\rho}_F}{\nu_F W_F} = -\frac{\dot{\rho}_{O_x}}{\nu_{O_x} W_{O_x}} = \frac{\dot{\rho}_P}{\nu_P W_P} = \omega$$

avec W_F , W_{O_x} et W_P les masses molaires des espèces combustible \mathcal{M}_F , oxydant \mathcal{M}_{O_x} et produits \mathcal{M}_P ;

- (H4) Le jet de gaz et de l'air ont le même débit unitaire : $\rho v = f_0$;
(H5) La diffusion moléculaire suit la loi de Fick. De plus, les coefficients de diffusion de chaque espèce sont égaux : $D_{O_x} \equiv D_F \equiv D_P \equiv D$;
(H6) Les forces à distance sont nulles : $\vec{g} = \vec{0}$;
(H7) Chaleur et espèces diffusent à la même vitesse, *i.e.* le nombre de Lewis $Le = \lambda / (\rho c_p D)$ est égal à l'unité : $Le = 1$;
(H8) Le nombre de Schmidt $Sc = \mu / (\rho D)$ est égal à l'unité. De plus, d'après l'hypothèse (H8), le nombre de Prandtl est égal à l'unité : $Pr = (\mu c_p) / \lambda = 1$;
(H9) La pression thermodynamique reste constante dans la flamme : $P_0 = P_{atm}$.

Nous ajoutons les hypothèses suivantes :

- (H10) La vitesse de l'écoulement \vec{v} , en tout point, est toujours dirigée parallèlement au plan de symétrie, $\vec{v} = (0; v)^T$;
(H11) Le régime est permanent : $\partial \phi / \partial t = 0$, $\forall \phi$;
(H12) Les flux de diffusion (de masse, d'énergie et de quantité de mouvement) sont négligeables dans le sens de l'écoulement, en supposant que la convection est prédominante dans ce sens.

II Position du problème

Avec les hypothèses énoncées précédemment, la fraction de mélange Z vérifie l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial Z}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\rho D}{\rho v} = \frac{\lambda}{\rho v c_p} \quad (\text{II.1})$$

avec les conditions aux limites :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{en } y = 0 \\ \text{en } x = \pm R \\ \text{en } y \rightarrow \infty \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \text{si } -r \leq x \leq r, \quad Z = 1 \\ \text{si } r < x < R, \quad Z = 0 \\ \text{si } -R < x < -r, \quad Z = 0 \end{array} \right. \\ \frac{\partial Z}{\partial x} = 0 \\ Z = 0 \end{array} \right.$$

Nous définissons la fraction de mélange stoechiométrique par l'équation suivante :

$$Z_c := \{ Z \in [0; 1]; Y_F = Y_{O_x} = 0 \}$$

Grâce à l'hypothèse (H2), la fraction de mélange stoechiométrique est alors donnée par la relation (III.15) de l'annexe A :

$$Z_c = \frac{Y_{O_x}^0 \nu_F W_F}{Y_{O_x}^0 \nu_F W_F + Y_F^0 \nu_{O_x} W_{O_x}}$$

On distingue plusieurs types de flammes de diffusion laminaires : les flammes **sur-ventilées** ou **sous-ventilées**. Elles sont représentées sur la Figure C.1. Grossièrement, les flammes sur-ventilées correspondent au cas où le jet de combustible est dans un écoulement d'air de largeur infinie : il y a suffisamment d'oxydant en présence pour que tout le combustible soit brûlé. Toutefois, une flamme peut avoir le profil sur-ventilé pour un écoulement d'air de largeur finie mais suffisamment grande pour que le processus complet de combustion s'effectue. Le second cas correspond alors à un jet de combustible dans un écoulement d'air de largeur finie, mais trop petite pour apporter assez d'oxydant, et ainsi obtenir une réaction chimique complète. Enfin, il y a le cas limite où la flamme est infinie et qui correspond à un débit d'air exactement égal à ce qui est demandé pour brûler le combustible suivant la réaction unique (alors fautive) choisie. A noter que cette réaction ne s'applique plus dans ce cas, au bout d'une certaine longueur, car il y a très peu de combustible et de comburant, et l'hypothèse de chimie infiniment rapide n'est plus valide.

III Solutions analytiques pour les flammes sur-ventilées

Dans le cas des flammes sur-ventilées, il y a suffisamment d'oxydant pour que la réaction chimique s'effectue complètement. Dans ce cas, on considère que le jet d'air est de largeur infinie ($R \rightarrow \infty$), hypothèse traduite dans les conditions aux limites (par $x \rightarrow \infty, Z = 0$). On obtient le problème (\mathcal{P}) :

$$(\mathcal{P}) \left\{ \begin{array}{l} \text{(EDP)} \quad \frac{\partial Z}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\rho D}{\rho v} = \frac{\lambda}{\rho v c_p} \\ \text{(CL)} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{en } y = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{si } -r \leq x \leq r, \quad Z = 1 \\ \text{si } x > r \text{ ou } x < -r, \quad Z = 0 \end{array} \right. \\ \text{en } x \rightarrow +\infty \quad Z = 0 \\ \text{en } y \rightarrow \infty \quad Z = 0 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Ce problème possède une solution analytique, que l'on peut établir en utilisant la transformation de Fourier.

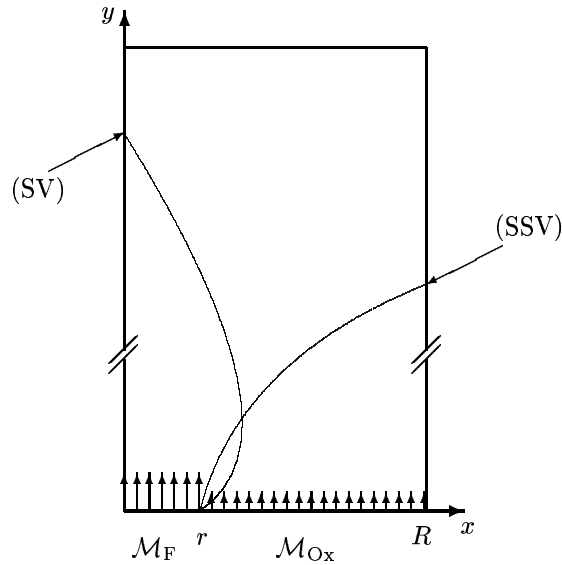


FIG. C.1 – Schématisation de la flamme de diffusion laminaire sur-ventilée (SV) et sous-ventilée (SSV).

Transformation de Fourier. Soit la fonction $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, telle qu'elle soit absolument convergente :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x, y)| dx < \infty$$

Alors, sa transformée de Fourier, suivant la variable x , est définie par :

$$\mathcal{F} : \begin{cases} \mathbb{R}^2 & \rightarrow \mathbb{R}^2 \\ (x, y) & \mapsto \mathcal{F}(p, y) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \exp^{-ipx} dx \end{cases}$$

Etape 1 : Transformation du problème (P). On considère la transformation de Fourier, définie précédemment, pour la fraction de mélange $Z \in [0; 1]$ (donc absolument convergente). Tout d'abord, on applique cette transformée à l'équation aux dérivées partielles (EDP). Cela donne :

$$\mathcal{F} \left(\frac{\partial Z}{\partial y} \right) = \frac{\partial \mathcal{F}(Z)}{\partial y}(p, y)$$

De plus,

$$\mathcal{F} \left(\frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} \right) = -p^2 \mathcal{F}(Z)(p, y)$$

D'où le problème (EDP)' :

$$\frac{d\mathcal{F}(Z)}{dy} = -\alpha p^2 \mathcal{F}(Z)$$

Et les conditions aux limites sont :

$$\mathcal{F}(Z(x, 0)) := Z(p, 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\sin(pr)}{p} \right)$$

Etape 2 : Résolution du problème auxiliaire. Ce problème (EDP)' admet une solution simple de la forme :

$$\mathcal{F}(Z)(p, y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\sin(pr)}{p} \right) \exp(-\alpha p^2 y)$$

Etape 3 : Inversion de la transformation de Fourier. Pour trouver la solution $Z(x, y)$, on

doit calculer :

$$\begin{aligned} Z(x, y) &= \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(Z)(p, y)) = \mathcal{F}^{-1}\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\sin(pr)}{p}\right)\exp(-\alpha p^2 y)\right) \\ &= \mathcal{F}^{-1}\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\sin(pr)}{p}\right)\right) \star \mathcal{F}^{-1}(\exp(-\alpha p^2 y)) = Z(x, 0) \star \left[\frac{1}{\sqrt{2\alpha y}}\exp\left(\frac{-x^2}{4\alpha y}\right)\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\alpha\pi y}} \int_{-\infty}^{+\infty} Z(\xi, 0) \exp\left(\frac{-(x-\xi)^2}{4\alpha y}\right) d\xi \end{aligned}$$

Donc, la solution du problème (EDP), associée aux conditions aux limites (CL), est de la forme :

$$Z(x, y) = \frac{1}{\sqrt{4\alpha\pi y}} \int_{-\infty}^{+\infty} Z(\xi, 0) \exp\left(\frac{-(x-\xi)^2}{4\alpha y}\right) d\xi$$

Hypothèse III.1

La largeur $2r$ du canal d'injection de combustible est très petite devant la dimension caractéristique de la flamme.

On obtient alors :

$$Z(\xi, 0) \approx \delta(\xi)2r \text{ avec } \int_{-\infty}^{+\infty} Z(\xi, 0) d\xi = 2r$$

D'où la fraction de mélange Z , solution du problème (P), se met sous la forme :

$$Z(x, y) = \frac{r}{\sqrt{\alpha\pi y}} \exp\left(\frac{-x^2}{4\alpha y}\right) \quad (\text{III.2})$$

IV Solutions analytiques pour les flammes sous-ventilées

Dans ce cas, le jet d'air est de largeur finie donnée R et on conserve la condition aux limites telle quelle. On obtient alors le problème (P) suivant :

$$(\mathcal{P}) \left\{ \begin{array}{l} \text{(EDP)} \quad \frac{\partial Z}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} \quad \text{avec } \alpha = \frac{\rho D}{\rho v} = \frac{\lambda}{\rho v c_p} \\ \text{(CL)} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{(i) en } y = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{si } -r \leq x \leq r, \quad Z = 1 \\ \text{si } x > r \text{ ou } x < -r, \quad Z = 0 \end{array} \right. \\ \text{(ii) en } x = \pm R \quad \frac{\partial Z}{\partial x} = 0 \\ \text{(iii) en } y \rightarrow \infty \quad Z = 0 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Ce problème (P) possède lui-aussi une solution analytique que l'on calcule *via* la méthode de séparation de variables et la transformation de Fourier discrète.

Séparation de variables. On cherche un solution $Z(x, y)$ de la forme :

$$Z(x, y) = f(x) \cdot g(y)$$

où

$$f : \left\{ \begin{array}{l} [-R, R] \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto f(x) \end{array} \right. \quad g : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R} \\ y \mapsto g(y) \end{array} \right.$$

telles que :

$$Z : \left\{ \begin{array}{l} [-R, R] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) \mapsto Z(x, y) = f(x) \cdot g(y) \end{array} \right.$$

Idée générale : Il est possible de trouver un nombre infini de solutions à l'équation aux dérivées partielles (EDP), qui satisfassent les conditions aux limites (CL). Ces fonctions $Z_n(x, y) = f_n(x) \cdot g_n(y)$ sont des **solutions fondamentales**. La solution $Z(x, y)$ du problème (EDP)-(CL) est de la forme :

$$Z(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n f_n(x) \cdot g_n(y)$$

Étape 1 : Trouver les solutions fondamentales de (EDP). On remplace la fonction $Z(x, y)$ par sa décomposition $f(x) \cdot g(y)$ dans (EDP). Cela donne :

$$f(x) \cdot g'(y) = \alpha f''(x) \cdot g(y)$$

D'où

$$\frac{g'(y)}{\alpha g(y)} = \frac{f''(x)}{f(x)}$$

On obtient donc des variables séparées, *i.e.* le membre de gauche ne dépend que de la variable y tandis que le membre de droite de l'équation ne dépend que de la variable x . De plus, les variables x et y sont indépendantes. Par conséquent, chaque membre de l'équation est fixé à une constante de séparation k .

$$\frac{g'(y)}{\alpha g(y)} = \frac{f''(x)}{f(x)} = k$$

ou

$$\begin{cases} f''(x) - kf(x) = 0 \\ g'(y) - k\alpha g(y) = 0 \end{cases}$$

On a donc modifier une équation aux dérivées partielles d'ordre 2 en deux équations différentielles ordinaires. De plus, la constante de séparation k doit être négative, sinon $g(y) \not\rightarrow 0$ pour $y \rightarrow 0$. Posons $k = -\lambda^2$. On a :

$$\begin{cases} f''(x) + \lambda^2 f(x) = 0 \\ g'(y) \lambda^2 \alpha g(y) = 0 \end{cases}$$

de solutions :

$$\begin{cases} f(x) = A \cos(\lambda x) + B \sin(\lambda x) \\ g(y) = C \exp(-\lambda^2 \alpha y) \end{cases}$$

et donc toute fonction :

$$Z_n(x, y) = C_n \exp(-\lambda_n^2 \alpha y) [A_n \cos(\lambda_n x) + B_n \sin(\lambda_n x)]$$

(avec A_n, B_n, C_n et λ_n arbitraires) vérifiera (PDE), et en particulier la fonction :

$$Z(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \exp(-\lambda_n^2 \alpha y) [A_n \cos(\lambda_n x) + B_n \sin(\lambda_n x)]$$

Étape 2 : Transformation de Fourier discrète. Cette étape consiste à déterminer les constantes A_n, B_n, C_n et λ_n par les conditions aux limites. Tout d'abord, on modifie la condition aux limites (i) par la transformation de Fourier discrète. On rappelle que pour une fonction f périodique de période $2R$, la transformation de Fourier discrète est :

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{R}\right) \right]$$

avec, $\forall n \in \mathbb{N}$:

$$a_n = \frac{1}{R} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right)$$

$$b_n = \frac{1}{R} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{R}\right)$$

Par conséquent, pour la condition aux limites (i), $Z(x, 0)$ peut être décomposée sur la base des fonctions $\left\{ \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right), \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \right\}_{n \in \mathbb{N}}$ comme une fonction périodique de période $2R$, définie par $Z(x, 0) = \mathbb{1}_{[-r, r]}$ où $\mathbb{1}$ est la fonction indicatrice de l'intervalle $[-r, r]$. Sa transformation de Fourier discrète est :

$$Z(x, 0) = \frac{r}{R} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right)$$

Par ailleurs, on a par l'étape 1 :

$$Z(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} [A_n \cos(\lambda_n x) + B_n \sin(\lambda_n x)]$$

On en conclue que, $\forall n$:

$$A_0 = \frac{r}{R}, \quad A_n = \frac{2}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right), \quad B_n = 0$$

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{R}$$

Et donc

$$Z(x, y) = \frac{r}{R} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right) \exp\left(-\left(\frac{n\pi}{R}\right)^2 \alpha y\right)$$

De plus, la condition aux limites (ii) donne :

$$\frac{\partial Z}{\partial x}(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[-\frac{2}{R} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{R}\right) \right] \exp\left(-\left(\frac{n\pi}{R}\right)^2 \alpha y\right)$$

Donc

$$\frac{\partial Z}{\partial x}(R, y) = -\frac{\partial Z}{\partial x}(-R, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[-\frac{2}{R} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \underbrace{\sin(n\pi)}_{=0, \forall n} \right] \exp\left(-\left(\frac{n\pi}{R}\right)^2 \alpha y\right) = 0$$

Enfin, la condition aux limites (iii) est trivialement vérifiée.

On peut alors conclure que la fraction de mélange Z , solution du problème (\mathcal{P}), se met sous la forme :

$$Z(x, y) = \frac{r}{R} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{R}\right) \exp\left(-\left(\frac{n\pi}{R}\right)^2 \alpha y\right) \quad (\text{IV.3})$$

V Surface et longueur de flamme

La surface de la flamme est définie comme étant le lieu des points où la fraction de mélange est à la valeur stœchiométrique Z_c , *i.e.*

$$S_f := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; Z(x, y) = Z_c\}$$

La longueur de flamme H_f est définie comme :

$$H_f := \{y \in \mathbb{R}^*; Z(0, y) = Z_c\}$$

V.1 Flamme sur-ventilée

La solution (III.2) de la fraction de mélange permet alors de calculer les caractéristiques de la flamme sur-ventilée. En particulier, l'équation de la surface de flamme :

$$Z_c = \frac{r}{\sqrt{\alpha \pi y}} \exp\left(\frac{-x^2}{4\alpha y}\right)$$

Donc, l'équation de la surface de la flamme est :

$$S_f = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R} \times [0; H_f] ; x = \pm 2\sqrt{\alpha y} \sqrt{-\ln \left(Z_c \frac{\sqrt{\pi \alpha y}}{r} \right)} \right\} \quad (\text{V.4})$$

où H_f est la longueur de flamme, définie comme :

$$H_f = \frac{r^2}{\pi \alpha Z_c^2} \quad (\text{V.5})$$

Par définition de la fraction de mélange stœchiométrique, la longueur de flamme H_f est alors :

$$H_f = \frac{\left(1 + \frac{Y_F^0 \nu_{Ox} W_{Ox}}{Y_{Ox}^0 \nu_F W_F} \right)^2 r^2 f_0}{\pi \left(\frac{\lambda}{c_p} \right)}$$

Par conséquent, on trouve que [11] :

- La longueur de flamme est inversement proportionnelle à λ/c_p : plus la diffusion de la chaleur est forte (et aussi celle de la masse car $Le = 1$), plus la flamme est courte ; elle est proportionnelle au débit $f_0 = (\rho v)_F$, donc en particulier à la vitesse de l'écoulement : plus le débit est grand, plus la flamme est longue.
- Z_c est une constante dépendante de la réaction considérée et de la composition des deux jets : plus le quotient $(\nu_{Ox} W_{Ox})/(\nu_F W_F)$ est élevé, plus Z_c est petit et donc plus la flamme est longue ; la flamme est d'autant plus longue que Y_F^0 est grand ($Y_F^0 \leq 1$), et d'autant plus courte que Y_{Ox}^0 est grand.
- La chimie n'intervient qu'à travers le quotient $(\nu_{Ox} W_{Ox})/(\nu_F W_F)$; c'est la conséquence de l'hypothèse faite d'une réaction infiniment rapide (et donc aucun temps caractéristique de réaction n'apparaît).

V.2 Flamme sous-ventilée

La solution analytique (IV.3) de la fraction de mélange pour les flammes sous-ventilées peut s'approcher par :

$$Z(x, y) = \frac{r}{R} + \frac{2}{\pi} \sin \left(\frac{\pi r}{R} \right) \cos \left(\frac{\pi x}{R} \right) \exp \left(- \left(\frac{\pi}{R} \right)^2 \alpha y \right)$$

De ce fait, l'équation de la surface de flamme s'écrit :

$$Z_c = \frac{r}{R} + \frac{2}{\pi} \sin \left(\frac{\pi r}{R} \right) \cos \left(\frac{\pi x}{R} \right) \exp \left(- \left(\frac{\pi}{R} \right)^2 \alpha y \right)$$

De plus, la hauteur de flamme H_f est la valeur de $y > 0$ telle que $x = 0$, on a :

$$\begin{aligned} x = 0 &\implies Z_c = \frac{r}{R} + \frac{2}{\pi} \sin \left(\frac{\pi r}{R} \right) \exp \left(- \left(\frac{\pi}{R} \right)^2 \alpha y \right) \\ &\implies y = - \frac{R^2}{\alpha \pi^2} \ln \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{Z_c - r/R}{\sin \left(\frac{\pi r}{R} \right)} \right) \right] \end{aligned}$$

Donc, on en conclue que :

- si $r < R < \frac{r}{Z_c}$, alors y n'est pas défini et la flamme est sous-ventilée ;
- si $R > \frac{r}{Z_c}$, alors y est bien défini et la flamme est sur-ventilée ;
- si $R = \frac{r}{Z_c}$, alors y n'est pas défini et la flamme est de longueur infinie.

Bibliographie

- [1] A. S. Almgren, J. B. Bell, Ph. Colella, L. H. Howell, and M. L. Welcome. A conservative adaptative projection method for the variable density incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 142 :1–46, 1998.
- [2] Ph. Angot, J. P. Caltagirone, and K. Khadra. Une méthode adaptative de raffinement local : la Correction de Flux à l'Interface. *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences de Paris*, 315(1) :739–745, 1992.
- [3] J. B. Bell, P. Colella, and H. M. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85 :257–283, 1989.
- [4] J. B. Bell and D. L. Marcus. A second-order projection method for variable-density flows. *Journal of Computational Physics*, 101 :334–348, 1992.
- [5] F. Benkhaldoun and B. Larrouturou. Explicit adaptative calculations of wrinkled flame propagation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 7 :1147–1158, 1987.
- [6] H. Berestycki and B. Larrouturou. La modélisation et les mathématiques de la combustion. In H. Berestycki, C.-M. Brauner, P. Clavin, and C. Schmidt-Lainé, editors, *Modélisation de la combustion - Images des Mathématiques.*, pages 9–26. Centre National de la Recherche Scientifique, 1996.
- [7] M. J. Berger and J. Olinger. Adaptative mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 53 :484–512, 1984.
- [8] H. Bijl and P. Wesseling. A numerical method for the computation of compressible viscous flows with low Mach number regions. In *Proceedings of the Third ECCOMAS CFD Conference*, pages 206–212, Paris, France, September 1996. John Wiley & Sons.
- [9] H. Bijl and P. Wesseling. A unified method for computing incompressible and compressible flows in boundary-fitted coordinates. *Journal of Computational Physics*, 141 :153–173, 1998.
- [10] J. Blair Perot. On the analysis of the fractional step method. *Journal of Computational Physics*, 108 :51–58, 1993.
- [11] R. Borghi and M. Champion. *Modélisation et Théorie des Flammes*. Technip, 2000.
- [12] R. Borghi and M. Destriau. *La combustion et les flammes*. Technip, 1995.
- [13] R. W. Briley. Numerical method for predicting three-dimensional steady viscous flow in ducts. *Journal of Computational Physics*, 14 :8, 1974.
- [14] Y-H. Choi and C. L. Merkle. The application of preconditioning in viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 105 :207–223, 1993.
- [15] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2 :12–26, 1967.
- [16] A. J. Chorin. Numerical solutions of the Navier-Stokes equations. *Math. Comp.*, 22 :745–762, 1968.
- [17] X. Coré, P. Angot, and J.-C. Latché. A multilevel local mesh refinement projection method for low Mach number flows. Submitted to *Mathematics and Computers in Simulation*, September 2001.
- [18] H. C. De Lange and P. H. De Goey. Numerical flow modelling in a locally refined grid. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37 :497–515, 1994.
- [19] G. De Vahl Davis. Natural convection of air in a square cavity : a benchmark numerical solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3 :249–264, 1983.
- [20] G. De Vahl Davis and I.P. Jones. Natural convection of air in a square cavity : a comparison exercise. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3 :227–248, 1983.

- [21] J. Fröhlich. *Résolution numérique des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach par méthode spectrale*. PhD thesis, Université de Nice - Sophia-Antipolis, 1990.
- [22] P. H. Gaskell and A. K. C. Lau. Curvature-compensated convective transport : SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8 :617–641, 1988.
- [23] D. Gray and A. Giorgini. The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15 :545–551, 1976.
- [24] J.-L. Guermond. Some implementations of projection methods for Navier-Stokes equations. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 30(5) :637–667, 1996.
- [25] H. Guillard and B. Larrouturou. Modélisation numérique en combustion subsonique. In H. Berestycki, C.-M. Brauner, P. Clavin, and C. Schmidt-Lainé, editors, *Modélisation de la combustion - Images des Mathématiques.*, pages 77–88. Centre National de la Recherche Scientifique, 1996.
- [26] H. N. Hajm, P. S. Wyckoff, and O. M. Knio. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow - I. stiff chemistry. *Journal of Computational Physics*, 143 :381–402, 1998.
- [27] F. H. Harlow and J. E. Welsh. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with free surface. *Physics of Fluids*, 8(12) :2182–2185, 1965.
- [28] T. Hayase, J. A. C. Humphrey, and R. Greif. A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures. *Journal of Computational Physics*, 98 :108–118, 1992.
- [29] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows - Fundamentals of Numerical Discretization*, volume 1. John Wiley & Sons Interscience, 1992.
- [30] H. T. Huynh. Accurate monotonic cubic interpolation. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 30(1) :57–100, February 1993.
- [31] K. Khadra, Ph. Angot, J. P. Caltagirone, and P. Morel. Concept de zoom adaptatif en architecture multigrille locale ; Etude comparative des méthodes LDC, FAC et FIC. *Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 30(1) :39–82, 1996.
- [32] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59 :308–323, 1985.
- [33] R. Klein. Numerics in combustion. In *Vervisch, L. and Veynante, D., editors. Introduction to Turbulent Combustion*, Lecture Serie in Computational Fluid Dynamics, Rhode-Saint-Genèse, Belgium, March 1999. Von Karman Institute.
- [34] S. Kortas and Ph. Angot. Parallel preconditioners for a fourth order discretization of the viscous bürgers equation. In *P. E. Bøjrstad, M. Espedal and D. Keyes, editors. Proceedings of the Ninth International Conference on Domain Decomposition Methods*. John Wiley & Sons Ltd., 1998.
- [35] G. D. C. Kuiken. *Thermodynamics of irreversible processes. Applications to Diffusion and Rheology*. Theoretical Chemistry. John Wiley & Sons, 1994.
- [36] M. F. Lai. *A Projection Method for Reacting Flow in the Zero Mach Number Limit*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 1993.
- [37] P. Le Quéré. Accurate solutions to the square thermally driven cavity at high Rayleigh number. *Computers Fluids*, 20(1) :29–41, 1991.
- [38] B. P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer Methods Applied in Mechanical Engineering*, 19 :59–98, 1979.
- [39] B. P. Leonard and J. E. Drummond. Why you should not use 'hybrid', 'power-law' or related exponential schemes for convective modeling - there are much better alternatives. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20 :421–442, 1995.
- [40] B. P. Leonard and S. Mokthari. Beyond first-order upwinding : The ULTRA-SHARP alternative for non-oscillatory steady-state simulation of convection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30 :729–766, 1990.
- [41] A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. *Combustion Science and Techniques*, 42 :185–205, 1985.

-
- [42] M. L. Minion. A projection method for locally refined grids. *Journal of Computational Physics*, 127 :158–178, 1996.
- [43] H. Paillere and P. Le Quéré. Modelling and simulation of natural convection flows with large temperature differences : A benchmark for low Mach number solvers. In *Proceedings of the Twelfth CFD Conference.*, Paris, France, January 2000. CEA/DRN - INSTN.
- [44] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences. Mac Graw Hill, 1980.
- [45] R. B. Pember, L. H. Howell, J. B. Bell, P. Colella, W. Y. Crutchfield, W. A. Fiveland, and J. P. Jessee. An adaptative projection method for unsteady, low-Mach number combustion. *Combust. Sci. and Tech.*, 140 :123–168, 1998.
- [46] C. Pozrikidis. A note on the regularization of the discrete Poisson-Neumann problem. *Journal of Computational Physics*, 172 :917–923, 2001.
- [47] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS Publishing Company, 1996.
- [48] J. Shen. On error estimates of projection methods for Navier-Stokes equations : First-order schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29(1) :57–77, 1992.
- [49] J. Shen. On error estimates of projection methods for Navier-Stokes equations : Second-order schemes. *Mathematics of Computation*, 65(215) :1039–1065, July 1996.
- [50] E. Turkel. Review of preconditioning methods for fluid dynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 12 :257–284, 1993.
- [51] E. Turkel, H. N. Vatsa, and R. Radespiel. Preconditioning methods for low-speed flows. Technical Report 96-2460, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1996.
- [52] J. Van Kan. A second-order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, 7(3) :870–891, 1986.
- [53] B. Van Leer, W. T. Lee, and P. L. Roe. Characteristic time-stepping or local preconditioning of the Euler equations. Technical Report 91-1552-CP, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1991. Computational Fluid Dynamics Conference.
- [54] A. Varonos and G. Bergeles. Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal For Numerical Methods In Fluid*, 26 :1–16, 1998.
- [55] S. Venkateswaran and L. Merkle. Analysis of preconditioning methods for the Euler and Navier-Stokes equations. In *Proceedings of the Thirtieth Computational Fluid Dynamics*, Lecture Serie in Computational Fluid Dynamics, Rhode-Saint-Genèse, Belgium, 1999. Von Karman Institute.
- [56] P. Wesseling. Unified methods for computing incompressible and compressible flows. In *Proceedings of the Thirtieth Computational Fluid Dynamics*, Lecture Serie in Computational Fluid Dynamics, Rhode-Saint-Genèse, Belgium, 1999. Von Karman Institute.
- [57] B. R. Wetton. Error analysis of pressure increment schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38(1) :160–169, 2000.
- [58] F. A. Williams. *Combustion Theory - The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. Combustion Science and Engineering Series. Perseus Books, 1985.
- [59] J. Zhu. The second-order projection method for the backward-facing step flow. *Journal of Computational Physics*, 117 :318–331, 1995.

Méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux pour le calcul d'écoulements réactifs à faible nombre de Mach

Résumé. L'approximation isobare du système d'équations de bilan de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et des espèces chimiques est une approximation appropriée pour représenter les écoulements réactifs à faible nombre de Mach. Dans cette approximation, qui néglige les phénomènes acoustiques, le mélange est hydrodynamiquement incompressible et les effets thermodynamiques conduisent à une compression uniforme du système.

Nous présentons une nouvelle méthode numérique pour cette approximation. Une méthode de projection incrémentale, qui utilise la forme originale du bilan de masse, assure la discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes. La discrétisation spatiale est réalisée avec une méthode de volumes finis sur maillage décalé de type MAC. Un schéma de décentrement d'ordre élevé est utilisé pour l'estimation des flux convectifs. Nous associons à cette discrétisation, une méthode de raffinement local multi-niveaux, basée sur l'approche de Correction en Flux à l'Interface.

Une première application concerne un écoulement forcé avec masse volumique variable donnée, imitant un problème de combustion. La deuxième application est le problème de convection naturelle, tout d'abord pour de faibles variations de température puis au-delà de la limite de validité de l'approximation de Boussinesq. Enfin, la troisième application est une flamme de diffusion laminaire. Pour chacun de ces cas-test, nous montrons la robustesse de la méthode numérique proposée, notamment vis à vis des variations de la masse volumique. Et nous analysons le gain en précision obtenu par la méthode de raffinement local multi-niveaux.

Mots-clés. Ecoulements réactifs à faible nombre de Mach, méthode de projection incrémentale, méthode de volumes finis, méthode de raffinement local multi-niveaux.

A multilevel local mesh projection method for low Mach number reactive flows

Abstract. The isobar approximation for the system of the balance equations of mass, momentum, energy and chemical species is a suitable approximation to represent low Mach number reactive flows. In this approximation, which neglects acoustics phenomena, the mixture is hydrodynamically incompressible and the thermodynamic effects lead to an uniform compression of the system.

We present a novel numerical scheme for this approximation. An incremental projection method, which uses the original form of mass balance equation, discretizes in time the Navier-Stokes equations. Spatial discretization is achieved through a finite volume approach on MAC-type staggered mesh. A higher order decentered scheme is used to compute the convective fluxes. We associate to this discretization a local mesh refinement method, based on Flux Interface Correction technique. A first application concerns a forced flow with variable density which mimics a combustion problem. The second application is natural convection with first small temperature variations and then beyond the limit of validity of the Boussinesq approximation. Finally, we treat a third application which is a laminar diffusion flame. For each of this test problems, we demonstrate the robustness of the proposed numerical scheme, notably for the density spatial variations. We analyse the gain in accuracy obtained with the local mesh refinement method.

Key words. Low Mach number reactive flows, incremental projection method, finite volume method, local mesh refinement method.