

C. SCHMIDT-LAINE

A. BEN TAÏB

Sur un algorithme en volumes finis non structurés pour la simulation des flammes turbulentes en chimie infiniment rapide

M2AN - Modélisation mathématique et analyse numérique, tome 32, n° 6 (1998), p. 681-697

http://www.numdam.org/item?id=M2AN_1998__32_6_681_0

© SMAI, EDP Sciences, 1998, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « M2AN - Modélisation mathématique et analyse numérique » (<http://www.esaim-m2an.org/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

SUR UN ALGORITHME EN VOLUMES FINIS NON STRUCTURÉS POUR LA SIMULATION DES FLAMMES TURBULENTES EN CHIMIE INFINIMENT RAPIDE (*)

C. SCHMIDT-LAINE ⁽¹⁾, A. BEN TAIB ⁽²⁾

Résumé — Nous présentons dans ce travail une méthode de résolution du système de Navier-Stokes couplé au modèle k -epsilon, pour la turbulence, et MIL, pour la combustion turbulente. Cette méthode utilise une approximation décentrée pour les flux convectifs de type volumes finis et une approximation en éléments finis P_1 pour les termes de diffusion. Pour les termes sources chimiques et de turbulence, nous utilisons une implication en tenant compte de leurs signes. L'algorithme généré est très robuste. Des résultats des expériences numériques sur des cas académiques sont présentés. © Elsevier, Paris

Abstract — We present here a numerical algorithm based on a non structured finite element volume method. The algorithm resolves the Navier-Stokes equations coupled to the K -epsilon model, for the turbulence modelling, and the MIL model, for the turbulent combustion modelling. We approximate the convection terms by upwind schemes. We use a P_1 finite element for the approximation of the diffusion and the source terms. A semi implicit robust algorithm has been obtained. Some numerical illustrations are presented in the last paragraph. © Elsevier, Paris

1. INTRODUCTION

La modélisation des phénomènes de combustion turbulente représente un intérêt capital pour la conception de brûleurs et de moteurs à combustion interne. Avec les progrès remarquables qu'ont connu les domaines de l'analyse numérique et de l'informatique, les physiciens et ingénieurs peuvent envisager la *simulation directe* de ces phénomènes dans des configurations simples et par suite disposent de précieuses informations pour traiter les cas complexes.

La plupart des modèles de turbulence utilisés dans l'industrie reposent sur une approche statistique et sur l'hypothèse de transport par gradient pour la *fermeture du système*. Le plus répandu parmi eux est le modèle d'énergie-dissipation k -epsilon.

Du fait de la forte non linéarité des fonctions taux de réaction (type Arrhénius), la fermeture « complète » du système décrivant un écoulement réactif dans un milieu turbulent, nécessite la modélisation de l'interaction entre la chimie et la turbulence. Cette modélisation peut se faire de différentes manières. Pour notre part, nous utilisons le Modèle Intermittent Lagrangien (MIL) développé par Borghi [BO]. Le système obtenu est constitué des équations de Navier-Stokes moyennées couplées aux modèles k -epsilon pour la turbulence et MIL de la combustion turbulente. Le modèle k -epsilon donne des résultats satisfaisants pour les applications à caractère industriel. Mais son instabilité impose des nombres de CFL trop petits et par suite une convergence très lente.

Plusieurs algorithmes ont été proposés pour surmonter ce handicap en utilisant des méthodes de discrétisation différentes [GEY], ou en implicitant les termes de production et de dissipation de l'énergie cinétique k et de son taux de dissipation ε , ou encore en proposant des variantes plus stables du modèle k -epsilon telle que $k - \theta$ ou $\theta - \varphi$ [MO].

Il est bien connu que l'utilisation des schémas TVD (à variation totale décroissante) supprime, sinon atténue, les oscillations « parasites » dans les solutions des équations de Navier-Stokes. Leur extension au modèle

(*) Manuscript revised April 14, 1997

⁽¹⁾ UMR 128, École Normale Supérieure de Lyon, 46 Allée d'Italie, 69364 Lyon cedex 07

⁽²⁾ Direction de la recherche de Gaz de France, Département Génie Informatique et Mathématiques Appliquées BP 33, 93211 La plaine Saint-Denis

L'auteur est inscrit en thèse d'état à la faculté des sciences de Fès, Maroc

k -epsilon a amélioré le calcul pour des tests aussi complexes que l'écoulement transsonique derrière des obstacles [CH]. D'autre part, les schémas TVD ont été utilisés avec succès pour la simulation des flammes laminares dans des configurations complexes en utilisant des formulations élément-volume finis avec des maillages non structurés [BL] [AB]. Dans ce travail, nous utilisons les schémas TVD pour traiter des écoulements qui sont à la fois turbulents et réactifs. Ces schémas sont utilisés dans le cadre d'une méthode de volumes-éléments finis avec des maillages non structurés. On applique ces schémas au système formé par les équations de Navier-Stokes couplées aux modèles k -epsilon de Launder-Sharma pour la turbulence et le modèle MIL, développé par Borghi [BO], pour la combustion turbulente. Un traitement spécial est réservé aux termes sources chimiques et de turbulence. Le schéma, ainsi obtenu, s'est avéré très robuste et bien adapté pour la simulation des flammes turbulentes dans des configurations complexes.

2. POSITION DU PROBLÈME

On notera dorénavant par Ω un domaine polygonal de frontière Γ . On se place ici dans le cadre d'une réaction unique globale avec une chimie infiniment rapide, l'échelle du temps chimique est supposée plus petite que toutes les échelles du temps de turbulence [ABT]. On se propose de résoudre le système (1), constitué des équations de Navier-Stokes couplées aux modèles k -epsilon et MIL, suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \operatorname{grad}(p) + \operatorname{div}(\vec{\tau}) \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}((E + p)\vec{u}) = \operatorname{div}\left(\left(\frac{\gamma}{RePr} + \frac{\gamma}{R_t Pr_t}\right) \operatorname{grad}(e)\right) + \operatorname{div}(\vec{u} \cdot \vec{\tau}) + \beta \rho \omega \\ \frac{\partial \rho y}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho y \vec{u}) = \operatorname{div}\left(\left(\frac{1}{ReSc} + \frac{1}{R_t Sc_t}\right) \operatorname{grad}(y)\right) - \rho \omega \\ \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho k \vec{u}) = \operatorname{div}\left(\left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_k}\right) \operatorname{grad}(k)\right) + P - \rho\left(\varepsilon + \frac{2}{Re} \|\operatorname{grad}(\sqrt{k})\|^2\right) \\ \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \varepsilon \vec{u}) = \operatorname{div}\left(\left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_\varepsilon}\right) \operatorname{grad}(\varepsilon)\right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P - f_2 C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) + F \\ \frac{\partial \rho \psi}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \psi \vec{u}) = \operatorname{div}\left(\left(\frac{1}{ReSc} + \frac{1}{Sc_t R_t}\right) \operatorname{grad}(\psi)\right) \\ \frac{\partial \rho \psi''}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \psi'' \vec{u}) = \operatorname{div}\left(\frac{1}{R_t \sigma_g} \operatorname{grad}(\psi'')\right) + \frac{C_{g1}}{R_t} \|\operatorname{grad}(\psi'')\|^2 - c_{g2} \rho \frac{\varepsilon}{k} \psi'' \end{cases}$$

où ρ désigne la masse volumique du mélange, $\vec{u} = (u_1, u_2)$ étant la vitesse, E désigne l'énergie totale, p est la pression, y est la fraction massique du combustible dans le mélange, k (respectivement ε) représente l'énergie cinétique de turbulence (respectivement le taux de dissipation de k). ψ et ψ'' désignent respectivement un scalaire inerte ne participant pas à la réaction et sa variance statistique. Le tenseur de contraintes est donné par :

$$\vec{\tau} = -\frac{2}{3} \left(\rho k + \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) \operatorname{div}(\vec{u}) \right) + \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) (\operatorname{grad}(\vec{u}) + \operatorname{grad}'(\vec{u})) \quad (2)$$

Re (respectivement $R_t = \frac{\varepsilon}{c_u \rho k^2}$) désigne le nombre de Reynolds (respectivement le nombre de Reynolds turbulent).

$$F \text{ est donnée par : } F = \frac{2}{Re R_t \rho} \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2.$$

Le taux de production de l'énergie cinétique turbulente k est donné par :

$$P = \left(\frac{1}{R_t} \left(\text{grad}(\vec{u}) + \text{grad}'(\vec{u}) - \frac{2}{3} \text{div}(\vec{u}) I \right) - \frac{2}{3} \rho k I \right) : \text{grad}(\vec{u})$$

I étant la matrice identité. Les nombres de Schmidt, Sc et Sc_p , et de Prandtl, Pr et Pr_p , sont considérés constants et c_u , $c_{\varepsilon 1}$, $c_{\varepsilon 2}$ sont des constantes, β est l'enthalpie de formation de l'espèce y .

Le taux moyen de réaction ω est donné par :

$$\omega = -y \int_{\tau_k}^{\infty} \frac{P_{\tau}(\tau)}{\tau} d\tau + y_0 \frac{\psi - \psi_s}{1 - \psi_s} \int_{\psi_s}^1 P_{\psi}(\Phi) \int_{\tau_i}^{\infty} \frac{P_{\tau}(\tau)}{\tau} d\tau d\Phi. \quad (3)$$

Il représente la somme des taux de réaction « instantanés » sur toutes les échelles de temps et toutes les particules présentes dans le mélange, ψ_s est la valeur du scalaire inerte à la stoechiométrie.

τ représente le temps d'échange dont la fonction densité de probabilité (pdf) est donnée par :

$$P_{\tau}(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_t - \tau_k} \exp\left(\frac{\tau - \tau_t}{\tau_t - \tau_k}\right) & \text{pour } \tau \geq \tau_k \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

τ_k et τ_t désignent les échelles de temps extrémales en turbulence (l'échelle de Kolmogorov et l'échelle intégrale) :

$$\tau_t = \frac{k}{\varepsilon} \quad \text{et} \quad \tau_k = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}$$

où ν désigne la viscosité laminaire du fluide.

La pdf du scalaire inerte P_{ψ} , qui représente la répartition du combustible dans le mélange, a une forme présumée et dépend de la moyenne ψ et de la variance ψ'' du scalaire inerte [BG].

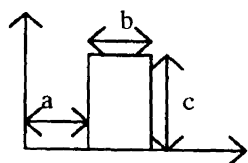


Figure 1

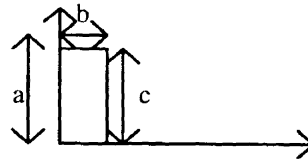


Figure 2

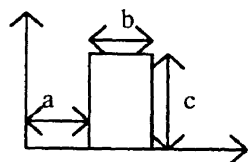


Figure 3

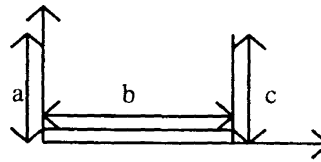


Figure 4

Les quatre figures représentent les différents cas que peut prendre la pdf P_{ψ} suivant la position des particules de combustible dans le mélange. Ainsi, la figure (1) correspond au cas où le scalaire inerte est loin des limites avec

des fluctuations faibles. Les *figures* (2) et (3) représentent le cas où ψ est près de l'une des limites avec fortes fluctuations. La dernière figure correspond au cas où ψ est loin des limites avec des fortes fluctuations. Dans chacun des cas précédents, les paramètres a , b et c sont déterminés en résolvant le système linéaire suivant :

$$\begin{cases} \int_0^1 P_\psi(\phi) d\phi = 1 \\ \int_0^1 \phi P_\psi(\phi) d\phi = \psi \\ \int_0^1 (\psi - \phi)^2 P_\psi(\phi) d\phi = \psi'' \end{cases} \quad (4)$$

qui relie les différents moments de la pdf P_ψ au scalaire inerte et sa variance.

On écrit alors le système (1) sous la forme :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial F(w)}{\partial x} + \frac{\partial G(w)}{\partial y} = \frac{\partial H(w)}{\partial x} + \frac{\partial D(w)}{\partial y} + S(w) \quad (5)$$

où w désigne le vecteur dont les composantes sont les variables du système (1). $F(w)$ (respectivement $G(w)$) représente le vecteur flux de convection dans la direction longitudinale (respectivement transversale) du plan. $H(w)$ (respectivement $D(w)$) représente le vecteur flux de diffusion dans la direction longitudinale (respectivement transversale). $S(w)$ désigne le vecteur terme source.

Pour les conditions aux limites, on distingue quatre types de frontières :

$$\Gamma = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \cup \Gamma_w \cup \Gamma_{axe}$$

où Γ_{in} représente l'entrée du domaine. Γ_{out} , Γ_w et Γ_{axe} désignent respectivement la sortie, la paroi solide et l'axe de symétrie du domaine.

Sur Γ_{in} , on impose des conditions de Dirichlet sur la fraction massique y , l'énergie cinétique k , le taux de dissipation ε , la vitesse $\vec{u}$, le scalaire inerte ψ et la variance du scalaire inerte ψ'' .

Sur la paroi Γ_w , on impose des conditions de glissement sur la vitesse et des conditions de Neumann homogène sur la température (paroi adiabatique). On déduit les valeurs de l'énergie totale et la pression par :

$$E = c_v \rho T \quad \text{et} \quad p = (\gamma - 1) E \quad (6)$$

c_v étant la chaleur spécifique à volume constant et γ le rapport des chaleurs spécifiques.

On impose des conditions de Dirichlet homogènes sur l'énergie cinétique et le taux de dissipation et des conditions de Neumann homogènes sur le scalaire inerte et sa variance.

Sur Γ_{out} , on impose une condition sur la pression. Sur Γ_{axe} , on impose des conditions de Neumann homogènes sur toutes les variables scalaires et une condition de Dirichlet homogène sur la composante de la vitesse normale à l'axe.

3. ALGORITHME DE RÉOLUTION

3.1. Formulation faible et approximation spatiale

On considère une triangulation T_h du domaine Ω . On note par Σ_h l'ensemble des cellules C_i , construites à partir des éléments de T_h , en joignant leurs centres de gravité G_i aux milieux de leurs côtés.

On considère l'espace des approximations V_h défini par :

$$V_h = \{w \in [L^2(\Omega)]^9 ; w|_{C_i} = \text{constante}, \quad \forall C_i \in \Sigma_h\}.$$

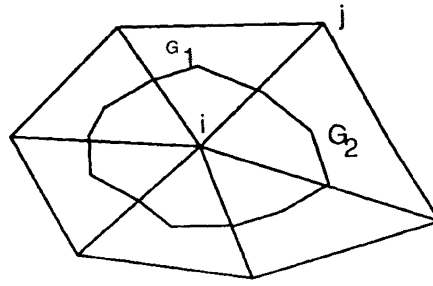


Figure 5. — Cellule de contrôle.

Pour l'approximation du problème (5), nous utilisons une formulation éléments-volumes finis [ABT]. Ainsi, on utilise la méthode de volumes finis pour approcher les flux de convection. Une interpolation en éléments finis P_1 est utilisée pour le calcul des termes de diffusion et des termes sources. La formulation faible obtenue s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{aire}(C_i) \frac{dw_i}{dt} + \sum_{j \in V(i)} \int_{\partial C_i \cap \partial C_j} (F(w) n_x + G(w) n_y) d\sigma + \int_{\partial C_i \cap \Gamma} (F(w) n_x + G(w) n_y) \\ = \sum_{T, i \in T} \iint_T \left(H(w) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + D(w) \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) dx dy + \iint_{C_i} S(w) dx dy \end{aligned} \quad (7)$$

pour toute cellule C_i appartenant à Σ_h

où $(\varphi_i)_i$ désigne la base des éléments finis P_1 . $V(i)$ étant l'ensemble des indices des voisins du nœud a_i .

Dans ce qui suit, nous donnons d'abord les approximations des flux convectifs internes. Ensuite, nous présentons l'approximation des flux de diffusion. Enfin, nous traitons les conditions aux limites et les termes sources.

3.1.1. Calcul des flux convectifs

On distingue deux types de flux convectifs. Ceux dits internes qui représentent les flux de convection calculés aux frontières communes à deux cellules et les flux traduisant les échanges entre le domaine Ω et le milieu extérieur. On écrit donc :

$$\int_{\partial C_i} F(w, \vec{n}) d\sigma = \sum_{j \in V(i)} \int_{\partial C_{ij}} F(w, \vec{n}) d\sigma + \int_{\partial C_i \cap \Gamma} F(w, \vec{n}) d\sigma \quad (8)$$

où $F(w, \vec{n}) = F(w) n_x + G(w) n_y$. $\vec{n} = (n_x, n_y)$ est la normale au bord ∂C_i de la cellule C_i . $v(i)$ désigne l'ensemble des indices des nœuds voisins au nœud a_i . $\Gamma = \partial\Omega$ représente la frontière du domaine Ω . ∂C_{ij} représente l'interface entre les deux cellules C_i et C_j . $\partial C_{ij} = \partial C_i \cap \partial C_j = [G_{1,y}, I_{ij}] \cup [I_{ij}, G_{2,y}]$.

On peut décomposer le vecteur flux de convection en deux « sous-vecteurs ». Le premier, qu'on notera $F_1(w, \vec{n}_{ij})$, correspond au champ aérodynamique. Le deuxième, qu'on notera $F_2(w, \vec{n}_{ij})$, est composé des flux de convection des variables de turbulence k et ε , ainsi que celui des variables « de combustion » Y , ψ et ψ'' .

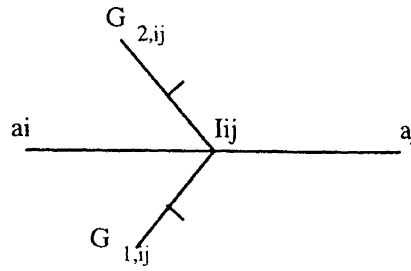


Figure 6. — Interface entre deux cellules internes.

Pour évaluer le flux « global » de convection, on peut adopter trois stratégies :

- La première consiste à calculer le flux de convection $F_1(w, \vec{n}_{ij})$ correspondant aux variables aérodynamiques (la masse volumique, la quantité de mouvement et l'énergie interne) avec les outils numériques habituellement utilisés pour le système d'Euler [ARM], puis approcher le flux $F_2(w, \vec{n}_{ij})$ en utilisant, par exemple, un schéma décentré où le champ aérodynamique est considéré comme donné. On approche le flux en utilisant, par exemple, la fonction du flux numérique de Roe.

$$\Phi_1(w_i, w_j, \vec{n}_{ij}) = \int_{\partial C_{ij}} F_1(w, \vec{n}_{ij}) d\sigma = \frac{1}{2} (F_1(w_i, \vec{n}_{ij}) + F_1(w_j, \vec{n}_{ij})) - \frac{1}{2} |A(\tilde{w}, \tilde{n})| (w_j - w_i) \quad (9)$$

où $A(\tilde{w}, \vec{n}_{ij})$ est la jacobienne du flux $F_1(w, \vec{n}_{ij})$ évaluée en une moyenne $\tilde{w}$, dite la moyenne de Roe (ici w désigne le champ aérodynamique).

L'atout de cette approche est sa simplicité. En effet, on peut toujours l'adopter chaque fois qu'on veut introduire une équation supplémentaire dans un code (comme c'est souvent le cas lorsqu'on veut traiter des modèles chimiques faisant intervenir plusieurs espèces). Son principal handicap est qu'elle viole le principe de maximum (elle ne garantit pas la positivité des fractions massiques ni celle de l'énergie cinétique et de son taux de dissipation). Ceci peut être très contrariant quand on sait que les termes sources de chacune des équations, présentent de fortes non linéarités. Le non-respect du maximum est dû au « décalage » dans la résolution des deux sous-systèmes correspondant aux champs aérodynamiques et à ceux de turbulence et de la chimie [BL].

- La deuxième façon de faire est de résoudre les deux sous-systèmes en même temps. Cette résolution peut se faire en étendant les schémas numériques « classiques », qu'on utilise pour le système d'Euler, au système complet [AB]. Ces extensions peuvent se faire en adoptant les mêmes constructions que celles des flux numériques de Roe, Osher... Cette approche ne vérifie pas, non plus, le principe de maximum. Mais en pratique, les valeurs obtenues par cette méthode s'écartent peu, contrairement à la première approche, du domaine de validité (l'intervalle $[0, 1]$ pour les fractions massiques et $\mathbb{R}^+$ pour les variables turbulentes). Cela dit, elle reste très coûteuse en temps calcul et très peu pratique.

- La troisième approche réunit les avantages des deux méthodes précédentes. En effet, elle reste très simple à implanter dans des codes déjà existants. De plus, elle vérifie le principe du maximum discret tout en consommant un temps calcul raisonnable [BL]. Cette méthode repose sur le fait que le terme de convection pour les variables turbulentes et les fractions massiques est le produit de ces variables par le terme convectif de l'équation de conservation de la masse volumique.

Ainsi, on déduira les composantes du flux numérique pour les variables turbulentes et chimiques en utilisant un décentrage suivant le signe de la composante du flux numérique correspondant à l'équation de conservation de la masse volumique.

Nous utilisons la fonction de flux numérique de Roe, avec la correction d'Hartern, pour calculer le flux convectif « aérodynamique ». Pour les variables de turbulence (k et ε) et de chimie (Y , ψ et ψ''), nous appliquons le décentrage suivant :

$$\Phi_2^k(w_i, w_j, \vec{n}_y) = \Phi_1^1(w_i, w_j, \vec{n}_y) (\alpha_y w_i^k + (1 - \alpha_y) w_j^k) \quad (10)$$

où $\Phi_1^1(w_i, w_j, \vec{n}_y)$ est la première composante du flux numérique $\Phi_1(w_i, w_j, \vec{n}_y)$ qui correspond au flux de la masse volumique.

$$\alpha_y = \frac{1}{2} \text{sign} (\Phi_1^1(w_i, w_j, \vec{n}_y)) + \frac{1}{2} \quad (11)$$

$$\text{où } \text{sign} (\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha \geq 0 \\ -1 & \text{sinon} \end{cases}.$$

$\Phi_l^k(w_i, w_j, \vec{n}_y)$ désigne la k -ième composante du flux $\Phi_l(w_i, w_j, \vec{n}_y)$, pour $l = 1, 2$. w^k est la k -ième composante du vecteur w ($k = 5, \dots, 9$).

L'utilisation du flux numérique de Roe, pour le calcul des flux internes, conduit à des schémas du premier ordre. Leur extension aux ordres supérieurs est possible en utilisant la technique MUSCL (Monotone Upwind Scheme of Conservation Laws) introduite par Van Leer [VL] et étendue au cas des éléments finis par Fezoui [FZ].

3.1.2. Calcul des flux visqueux

Pour l'approximation des flux visqueux, on utilise une interpolation linéaire en élément fini type P_1 . On écrit alors :

$$\sum_{T, a_i \in T} \iint_T \left(H(w) \frac{\partial \varphi_i^T}{\partial x} + D(w) \frac{\partial \varphi_i^T}{\partial y} \right) dx dy = \sum_{T, a_i \in T} \text{aire}(T) \left(H(T) \frac{\partial \varphi_i^T}{\partial x} + D(T) \frac{\partial \varphi_i^T}{\partial y} \right) \quad (12)$$

où $H(T)$ et $D(T)$ sont obtenus par interpolation en éléments finis P_1 des termes diffusifs, suivant les deux directions de l'espace, sur chaque triangle T élément de T_h . Chacune de leurs composantes $H_l(T)$ et $D_l(T)$ s'écrit :

$$H(T)_1 = D(T)_1 = 0; \quad H(T)_2 = \tau_{xx}(T); \quad H(T)_3 = D(T)_2 = \tau_{xy}(T);$$

$$H(T)_4 = u(T) \tau_{xx}(T) + v(T) \tau_{xy}(T) + \left(\frac{\gamma}{Pr Re} + \frac{\gamma}{R_t Pr_t} \right) \sum_{k \in T} e_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x}$$

$$H(T)_5 = \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_k} \right) \sum_{l \in T} k_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial x}; \quad H(T)_6 = \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_\varepsilon} \right) \sum_{l \in T} \varepsilon_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial x}$$

$$H(T)_7 = \left(\frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \sum_{l \in T} Y_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial x}; \quad H(T)_8 = \left(\frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \sum_{l \in T} \psi_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial x}$$

$$H(T)_9 = \left(\frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \sum_{l \in T} \psi_l'' \frac{\partial \varphi_l}{\partial x}$$

$$D(T)_3 = \tau_{yy}(T); \quad D(T)_4 = u(T) \tau_{xy}(T) + v(T) \tau_{yy}(T) + \left(\frac{\gamma}{Pr Re} + \frac{\gamma}{R_t Pr_t} \right) \sum_{k \in T} e_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y}$$

$$D(T)_5 = \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_k} \right) \sum_{l \in T} k_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial y}; \quad D(T)_6 = \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_\varepsilon} \right) \sum_{l \in T} \varepsilon_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial y}$$

$$D(T)_7 = \left(\frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \sum_{l \in T} Y_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial y}; \quad D(T)_8 = \left(\frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \sum_{l \in T} \psi_l \frac{\partial \varphi_l}{\partial y}$$

$$D(T)_9 = \left(\frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \sum_{l \in T} \psi_l'' \frac{\partial \varphi_l}{\partial y}$$

où $u(T)$ et $v(T)$ désignent les composantes de la vitesse moyenne sur le triangle T :

$$u(T) = \frac{1}{3} \sum_{k \in T} u_k \quad v(T) = \frac{1}{3} \sum_{k \in T} v_k$$

u_k et v_k étant les valeurs de deux composantes de la vitesse au sommet k du triangle T . Les composantes du tenseur de contraintes sont approchées sur chaque triangle par :

$$\tau_{xx}(T) = \frac{2}{3} \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) \sum_{k \in T} \left(2 u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} - v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} \right) - \frac{2}{9} \sum_{l \in T} \rho_l k_l$$

$$\tau_{yy}(T) = \frac{2}{3} \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) \sum_{k \in T} \left(2 v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} - u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} \right) - \frac{2}{9} \sum_{l \in T} \rho_l k_l$$

$$\tau_{xy}(T) = \frac{2}{3} \left(\frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) \sum_{k \in T} \left(u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} + v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} \right)$$

$(\varphi_l)_l$ désigne la base des éléments finis P_1 , associée à la triangulation T_h .

3.1.3. Traitement des conditions aux limites

La formulation en éléments finis des flux de diffusion permet de prendre en compte, d'une manière naturelle, les conditions aux limites de type Dirichlet ou de Neumann homogènes. C'est le cas des conditions à la paroi Γ_w et sur l'axe de symétrie Γ_{axe} .

3.1.3.1. Traitement des frontières amont et aval

Il est bien connu que le nombre de conditions à imposer aux entrées et sorties du domaine de calcul dépend du signe des valeurs propres de la jacobienne des flux de convection. De manière plus précise, si on considère par exemple le système d'Euler dans le cas bidimensionnel :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial F(w)}{\partial x} + \frac{\partial G(w)}{\partial y} = 0 \quad (13)$$

où

$$w = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}; \quad F(w) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad G(w) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{pmatrix}$$

La jacobienne $A(w, \vec{n})$ de flux $F(w, \vec{n})$:

$$F(w, \vec{n}) = F(w) n_x + G(w) n_y$$

possède quatre valeurs propres réelles :

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \vec{u} \cdot \vec{n}; \quad \lambda_3 = \vec{u} \cdot \vec{n} + c \|\vec{n}\| \quad \text{et} \quad \lambda_4 = \vec{u} \cdot \vec{n} - c \|\vec{n}\| \quad (14)$$

$\vec{n} = (n_x, n_y)$ étant la normale aux frontières Γ_{in} et Γ_{out} . c désigne la vitesse du son et $\|\cdot\|$ désigne la norme euclidienne dans $\mathbb{R}^2$.

Si on considère un écoulement subsonique $\left(\frac{\|\vec{u} \cdot \vec{n}\|}{c \|\vec{n}\|} < 1 \right)$, les valeurs propres λ_1, λ_2 et λ_3 sont négatives à l'entrée et correspondent à une information qui vient de l'extérieur. La valeur propre λ_4 est négative à la sortie et correspond à une information qui vient de l'extérieur. On impose alors trois conditions à l'entrée et une seule à la sortie. Ces conditions peuvent porter sur les variables du système, sur les flux qu'elles génèrent ou encore sur des combinaisons de ces variables (caractéristiques, par exemple). Les conditions sur les flux sont de plus compatibles avec la formulation en volumes finis.

Pour l'évaluation des flux convectifs aux entrées et sorties du domaine Ω , on utilise des techniques de décentrage. Ainsi, pour un nœud a_i situé sur les frontières amont ou aval, on connaît la solution w_i . On se donne de plus un champ w_∞ représentatif de l'écoulement à l'extérieur du domaine Ω . On résout alors un problème de Riemann avec les données w_i et w_∞ en utilisant la fonction du flux numérique Φ_{sw} de Steger-Warming [SW]. Cette fonction repose sur la décomposition de flux en parties négative et positive. Elle utilise, pour cela, le signe des valeurs propres et elle s'écrit :

$$\Phi_{sw}^1(w_i, w_\infty, \vec{n}) = A^+(w_i, \vec{n}) w_i + A^-(w_\infty, \vec{n}) w_\infty \quad (15)$$

ou encore

$$\Phi_{sw}^2(w_i, w_\infty, \vec{n}) = A^+(w_i, \vec{n}) w_i + A^-(w_i, \vec{n}) w_\infty$$

avec $A^+(w, \vec{n})$ et $A^-(w, \vec{n})$ représentent les parties positive et négative de la jacobienne $A(w, \vec{n})$ du flux $F(w, \vec{n})$.

Elles s'expriment en fonction des parties positives et négatives de la diagonale de la jacobienne. On a :

$$A^+(w, \vec{n}) = P^{-1}(w, \vec{n}) A^+(w, \vec{n}) P(w, \vec{n})$$

$$A^-(w, \vec{n}) = P^{-1}(w, \vec{n}) A^-(w, \vec{n}) P(w, \vec{n})$$

où $A = A^+ - A^-$, est la diagonale de la jacobienne A

$$A^+ = \text{diag}(\lambda_1^+, \dots, \lambda_4^+) \quad \text{et} \quad A^- = \text{diag}(\lambda_1^-, \dots, \lambda_4^-)$$

avec $\lambda_i^+ = \max(\lambda_i, 0)$ (resp. $\lambda_i^- = \max(-\lambda_i, 0)$) désigne la partie positive (respectivement négative) de la valeur propre λ_i donnée par (14).

Ainsi pour calculer les flux externes, nous appliquons la formule (15) pour les composantes du champ aérodynamique. Nous utilisons le décentrage défini par les relations (10) et (11) pour les autres variables (en remplaçant w_j par w_∞ et Φ_j^k et $\Phi_{sw,j}^k$). On écrit alors :

$$\Phi_{sw,2}^k(w_i, w_\infty, \vec{n}) = \Phi_{sw,1}^1(w_i, w_\infty, \vec{n}) (\alpha_{i,\infty}^{sw} w_i^k + (1 - \alpha_{i,\infty}^{sw}) w_\infty^k)$$

où $\Phi_{sw,2}^k(w_i, w_\infty, \vec{n})$ désigne la k -ième composante de la fonction du flux de Steger-Warming.

$$\alpha_{i,\infty}^{sw} = \frac{1}{2} \text{sign}(\Phi_{sw,1}^1(w_i, w_\infty, \vec{n})) + \frac{1}{2}.$$

3.1.4. Calcul des termes sources

On distingue deux types de composantes du vecteur source $S(w)$:

• Celles dont l'expression comporte des dérivées et pour lesquelles on utilise une interpolation en éléments finis P_1 . C'est le cas des termes sources de production de l'énergie cinétique de turbulence et de la variance du scalaire inerte.

• Celles ne comportant pas de dérivées dans leurs expressions. On utilise, pour l'approximation de ces termes, une formule de quadrature d'ordre zéro. C'est le cas des termes sources chimique et de dissipation.

Ainsi, on approche le terme P de production de l'énergie cinétique turbulente par :

$$\iint_{C_i} P \, dx \, dy = \sum_{T, i \in T} \text{aire}(T) \left(\sigma_{xx}(T) \sum_{k \in T} u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} + \sigma_{yy}(T) \sum_{k \in T} v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} + \sigma_{xy}(T) \sum_{k \in T} \left(v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} + u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} \right) \right)$$

où $\sigma_{xx}(T)$, $\sigma_{xy}(T)$ et $\sigma_{yy}(T)$ désignent les composantes du tenseur des contraintes et sont données par :

$$\sigma_{xx}(T) = \frac{2}{3} \frac{1}{R_t} \sum_{k \in T} \left(2 u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} - v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} \right) - \frac{2}{9} \sum_{l \in T} \rho_l k_l$$

$$\sigma_{yy}(T) = \frac{2}{3} \frac{1}{R_t} \sum_{k \in T} \left(2 v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} - u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} \right) - \frac{2}{9} \sum_{l \in T} \rho_l k_l$$

$$\sigma_{xy}(T) = \frac{2}{3} \frac{1}{R_t} \sum_{k \in T} \left(v_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} + u_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial y} \right).$$

La production de la variance du scalaire inerte est approchée par :

$$\iint_{C_i} \frac{c_{g1}}{R_t} \|\text{grad}(\psi'')\|^2 \, dx \, dy = \sum_{T, i \in T} \text{aire}(T) \frac{c_{g1}}{R_t} \left(\frac{1}{3} \sum_{k \in T} \psi_k''^2 \|\nabla \varphi_k\|^2 \right)$$

Pour l'approximation des termes source chimique et de dissipation, nous utilisons la formule suivante :

$$\iint_{C_i} S_\theta \, dx \, dy = \text{aire}(C_i) S_\theta(i)$$

où S_θ désigne les termes source chimique $\rho\omega$ et $\beta\rho\omega$ dans les équations de la fraction massique y et de l'énergie totale E ainsi que les termes de dissipation $\rho\varepsilon$ et $C_{g2} \rho \frac{\varepsilon}{k} \psi''$ dans les équations du taux de dissipation et de la variance du scalaire inerte.

De plus pour approcher les termes correctifs supplémentaires dus aux bas nombres de Reynolds dans l'équation de l'énergie cinétique, on procède comme suit :

$$\iint_{C_i} \frac{2}{Re} \|\text{grad}(\sqrt{k})\|^2 \, dx \, dy = \sum_{T, i \in T} \text{aire}(T) \frac{2}{Re} \left(\frac{1}{3} \sum_{l \in T} k_l \|\nabla \varphi_l\|^2 \right).$$

4. MÉTHODE DE RÉOLUTION

Par souci de simplicité, nous présentons le schéma en écrivant le système des équations semi-discrétisées sous la forme suivante :

$$\frac{dw}{dt} = A(w) + S(w) \quad (16)$$

avec $A(w) = A_1(w) + A_2(w)$, où $A_1(w)$ représente les flux non visqueux. $A_2(w)$ désigne les flux de diffusion. $S(w)$ représente les termes sources.

La résolution du système (16) d'une manière explicite imposera des nombres de CFL très petits, ce qui nécessite un temps considérable pour atteindre la convergence. Nous nous intéressons ici au calcul des solutions stationnaires en adoptant une approche non stationnaire. Pour cela, nous utilisons un schéma implicite introduit par Stoufflet [STF], étudié par Stève [ST] dans le cas des équations d'Euler et repris dans [FLLO] pour la résolution du système de Navier-Stokes.

En discrétisant le terme temporel, l'équation (16) s'écrit :

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = A(w) + S(w) \quad (17)$$

où w^{n+1} et w^n désignent les valeurs de la variable w au temps $t^{n+1} = (n+1)\Delta t$ et $t^n = n\Delta t$. Δt étant le pas du temps utilisé.

La résolution du système non linéaire (17), (le second membre est évalué au temps t^{n+1}), est difficile et très coûteuse. Le recours au linéarisé du système (17) est pratique. En effet, on résout un système linéaire au lieu du système non linéaire, ce qui est moins coûteux en temps de calcul. De plus, les deux systèmes ont la même solution stationnaire. La définition du linéarisé du système (17) passe par la linéarisation du second membre.

La linéarisation des termes $A(w)$ et $S(w)$ à l'aide d'un développement de Taylor à l'ordre 1 en temps, lorsqu'ils sont différentiables, s'exprime par :

$$A(w) = A(w^n) + A'(w^n)(w^{n+1} - w^n) + O(\Delta t^2) \quad (18)$$

$$S(w) = S(w^n) + S'(w^n)(w^{n+1} - w^n) + O(\Delta t^2)$$

où $A'(w)$ et $S'(w)$ désignent les jacobiniennes des termes $A(w)$ et $S(w)$. On obtient alors un schéma implicite, qu'on écrit sous forme d'un delta-schéma :

$$\left(\frac{I}{\Delta t} - A'(w^n) - S'(w^n) \right) \delta w^{n+1} = A(w^n) + S(w^n) \quad (19)$$

où $\delta w^{n+1} = w^{n+1} - w^n$. I étant la matrice identité.

Toutefois, quand le second membre $G(w^n)$, $G(w^n) = A(w^n) + S(w^n)$, n'est pas différentiable ou lorsque la différentiation est coûteuse, on introduit un opérateur linéaire P^n qui approche la matrice jacobienne $G'(w^n)$ [ST]. On résout alors le système :

$$\left(\frac{I}{\Delta t} - P^n \right) \delta w^{n+1} = A(w^n) + S(w^n) \quad (20)$$

En utilisant ces considérations, nous écrivons le schéma implicite appliqué au système (16) sous la forme :

$$\text{aire}(C_i) \frac{\delta w_i^{n+1}}{\Delta t} + \sum_{j \in v(i)} \Phi_{ij}^{n+1} + \int_{\partial C_i \cap \Gamma_\infty} \Phi_{i,\infty}^{sw,n+1} = - \sum_{T,i \in T} \Psi_{T,i}^{n+1} + \sum_{T,i \in T} S_{T,i}^{n+1} \quad (21)$$

où Φ_{ij}^{n+1} ; $\Phi_{i,\infty}^{sw}$ et $\Psi_{T,i}^{n+1}$ désignent les flux implicites de convection et de diffusion. $S_{T,i}^{n+1}$ représente les termes sources implicites. $\Gamma_\infty = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}$ désigne aussi bien l'entrée que la sortie du domaine de calcul.

On résout le système linéarisé du système (21). Dans ce qui suit, nous présentons la linéarisation des différents termes de système (21).

4.1.1.1. La linéarisation des flux convectifs

On s'intéresse à la linéarisation des flux des variables aérodynamiques, les flux des autres variables en découlant comme on l'a vu précédemment. On définit le flux implicite de convection :

$$\Phi_{ij}^{n+1} = \Phi(w_i^n, w_j^n, w_i^{n+1}, w_j^{n+1}, \vec{n}_{ij})$$

en utilisant le développement de Taylor au premier ordre :

$$\Phi(U, V, W, Z, \vec{n}) = \Phi(U, V, \vec{n}) + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial U} \right) (W - U) + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial V} \right) (Z - V)$$

$\Phi(U, V, \vec{n})$ étant la fonction de flux numérique de Roe. Grâce à l'homogénéité du flux de convection $F(w, \vec{n})$ on peut écrire :

$$F(w, \vec{n}) = A(w, \vec{n}) w$$

où $A(w, \vec{n}) = \frac{\partial F}{\partial w}(w, \vec{n})$.

La fonction de flux numérique de Roe s'écrit alors :

$$\Phi(U, V, \vec{n}) = \frac{1}{2} (F(U, \vec{n}) + F(V, \vec{n})) - \frac{1}{2} |A(\tilde{w}, \vec{n})| (V - U)$$

où $\tilde{w}$ désignant la moyenne de Roe de U et V .

On peut écrire le flux $\Phi(U, V, \vec{n})$ sous la forme :

$$\Phi(U, V, \vec{n}) = H_1(U, V, \vec{n}) U + H_2(U, V, \vec{n}) V$$

$$H_1(U, V, \vec{n}) = \frac{1}{2} (A(U, \vec{n}) + |A(\tilde{w}, \vec{n})|)$$

$$H_2(U, V, \vec{n}) = \frac{1}{2} (A(V, \vec{n}) + |A(\tilde{w}, \vec{n})|).$$

De même, les mêmes raisons permettent d'écrire la fonction de flux de Steger-Warming, utilisée pour évaluer les flux de convection aux entrées et sorties de domaine de calcul, sous la forme suivante :

$$\Phi^{sw}(U, V, \vec{n}) = H_1^{sw}(U, V, \vec{n}) U + H_2^{sw}(U, V, \vec{n}) V$$

avec $H_1^{sw}(U, V, \vec{n}) = A^+(U, \vec{n})$ et $H_2^{sw}(U, V, \vec{n}) = A^-(V, \vec{n})$.

A^+ et A^- désignent respectivement la partie positive et négative de la jacobienne A .

Comme les fonctions de flux numériques de Roe et de Steger-Warming ne sont pas différentiables, nous prenons comme dérivées partielles des flux $\Phi(U, V, \vec{n})$ et $\Phi^{sw}(U, V, \vec{n})$ les expressions suivantes :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial U} = H_1(U, V, \vec{n}) ; \quad \frac{\partial \Phi}{\partial V} = H_2(U, V, \vec{n})$$

et

$$\frac{\partial \Phi^{sw}}{\partial U} = H_1^{sw}(U, V, \vec{n}) ; \quad \frac{\partial \Phi^{sw}}{\partial V} = H_2^{sw}(U, V, \vec{n}).$$

La linéarisation des flux internes de convection s'écrit alors :

$$\Phi_y^{n+1} = \Phi(w_i^n, w_j^n, \vec{n}_y) + H_1(w_i^n, w_j^n, \vec{n}_y) (w_i^{n+1} - w_i^n) + H_2(w_i^n, w_j^n, \vec{n}_y) (w_j^{n+1} - w_j^n).$$

Pour les flux externes de convection, on écrit :

$$\Phi_i^{sw, n+1} = \Phi^{sw}(w_i^n, w_\infty, \vec{n}) + H_1^{sw}(w_i^n, w_\infty, \vec{n})(w_i^{n+1} - w_i^n).$$

4.1.1.2. La linéarisation des flux diffusifs

On procède de la même façon que pour les flux convectifs, excepté le fait qu'on n'a pas besoin d'approcher la jacobienne des flux diffusifs vu que ces derniers sont différentiables. On définit le flux implicite de diffusion, sur chaque triangle T , de sommets k_1, k_2, k_3 , formant la cellule :

$$\Psi_{T,i}^{n+1} = \Psi_{T,i}(w_{k_1}^n, w_{k_2}^n, w_{k_3}^n, w_{k_1}^{n+1}, w_{k_2}^{n+1}, w_{k_3}^{n+1})$$

en utilisant un développement de Taylor à l'ordre un :

$$\tilde{\Psi}_{T,i}(U, V, W, X, Y, Z) = \Psi_{T,i}(U, V, W) + \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}}{\partial U}\right)(X - U) + \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}}{\partial V}\right)(Y - V) + \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}}{\partial W}\right)(Z - W)$$

$\Psi_{T,i}(U, V, W)$ est calculé en utilisant une interpolation en éléments finis P_1 :

$$\Psi_{T,i}(U, V, w) = \text{aire}(T) \left(H(T) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + D(T) \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right)$$

où $H(T)$ et $D(T)$ sont donnés dans le paragraphe 3.1.2.

Finalement, la linéarisation du flux de diffusion s'écrit, pour chaque triangle T :

$$\Psi_{T,i}^{n+1} = \Psi_{T,i}^n + \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}}{\partial W_i}\right) \delta W_i^{n+1} + \sum_{k_l \in T, k_l \neq i} \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}}{\partial W_{k_l}}\right) \delta W_{k_l}^{n+1}.$$

4.1.1.3. La linéarisation des termes sources

Les termes sources, aussi bien d'origine chimique ou physique (turbulence), présentent des non linéarités qui peuvent être source d'instabilités numériques. Pour renforcer la stabilité du schéma global, on applique une décomposition de termes sources en tenant compte de leurs signes. Ainsi, on implémente les parties négatives ce qui accroît la propriété de la diagonale dominante de la matrice du système (4.6). Le taux de réaction chimique est négatif, par définition. On l'implémente alors en négligeant les couplages entre la fraction massique, l'énergie cinétique turbulente, le scalaire inerte et la variance du scalaire inerte. On écrit alors :

$$S_7(w_i) = S_7(w_i^n) + \frac{\partial S_7(w_i^n)}{\partial \rho Y} ((\rho Y)_i^{n+1} - (\rho Y)_i^n)$$

avec

$$\frac{\partial S_7(w_i^n)}{\partial \rho Y} = \text{aire}(C_i) \left(\int_0^1 P_\psi(\sigma) \int_{\tau_i}^\infty \frac{P_\tau(\tau)}{\tau} d\tau d\sigma \right).$$

On décompose le terme source de l'équation de l'énergie cinétique sous la forme :

$$S_5(w) = S_5^+(w) - S_5^-(w) \rho k - \frac{2}{3} \frac{\rho k}{R_i} \text{div}(\vec{u})$$

avec

$$S_5^+(w) = c_u \rho \frac{k^2}{\varepsilon} R, \quad S_5^-(w) = \left(\frac{\varepsilon}{k} + \frac{2}{k Re} \|\text{grad}(\sqrt{k})\|^2 \right)$$

et

$$R = \frac{1}{R_t} \left(\frac{1}{2} |\nabla \vec{u} + \nabla^T \vec{u}|^2 - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{u} \right).$$

Les termes $S_5^+(w)$ et $S_5^-(w)$ sont positifs. Le signe du terme restant $\left(\frac{2}{3} \frac{\rho k}{R_t} \nabla \cdot \vec{u} \right)$ dépend de celui de la divergence de la vitesse.

On linéarise le terme $S_5(w)$ comme suit :

$$S_5(w_i) = S_5(w_i^n) + \frac{\partial S_5(w_i^n)}{\partial \rho k} ((\rho k)_i^{n+1} - (\rho k)_i^n) \quad \text{avec} \quad \frac{\partial S_5(w_i^n)}{\partial \rho k} = - \left(S_5^-(w_i^n) + \frac{2}{3 R_t} |\nabla \cdot \vec{u}| \right).$$

En utilisant les mêmes arguments que précédemment, on peut linéariser le terme source $S_6(w)$ correspondant à l'équation du taux de dissipation comme suit :

$$S_6(w_i) = S_6(w_i^n) + \frac{\partial S_6(w_i^n)}{\partial \rho \varepsilon} ((\rho \varepsilon)_i^{n+1} - (\rho \varepsilon)_i^n) \quad \text{avec} \quad \frac{\partial S_6(w_i^n)}{\partial \rho \varepsilon} = - \left(\frac{\varepsilon}{K} f_2 C_{\varepsilon 2} + \frac{2}{3 R_t} |\nabla \cdot \vec{u}| \right).$$

De la même façon, on linéarise le terme source $S_9(w)$ de la variance du scalaire inerte ainsi :

$$S_9(w_i) = S_9(w_i^n) + \frac{\partial S_9(w_i^n)}{\partial \rho \psi''} ((\rho \psi'')_i^{n+1} - (\rho \psi'')_i^n) \quad \text{avec} \quad \frac{\partial S_9(w_i^n)}{\partial \rho \psi''} = - C_{g2} \frac{\varepsilon}{k}.$$

Ainsi, l'algorithme (4.6) conduit à la résolution d'un système linéaire qu'on réalise en deux étapes :

4.1.1.4. Phase « physique » ou explicite

Cette étape consiste à calculer le second terme du système linéaire. Il est constitué des termes de flux convectifs et diffusifs et des termes sources pour les variables chimiques et turbulentes. Il s'écrit :

$$\delta \hat{w}_i = - \left(\sum_{j \in \mathcal{V}(i)} \Phi_{ij}^n + \Phi_i^{sw,n} + \sum_{T, a_i \in T} \Psi_{T,i}^n + \sum_{T, a_i \in T} S_{T,i}^n \right)$$

où Φ_{ij}^n désigne le flux numérique de convection entre les états w_i^n et w_j^n :

$$\Phi_{ij}^n = \Phi(w_i^n, w_j^n, \vec{n}_{ij})$$

$\Phi_i^{sw,n}$ est le flux numérique de Steger-Warming, traduisant l'échange entre le domaine de calcul et l'extérieur

$$\Phi_i^{sw,n} = \Phi^{sw}(w_i^n, w_\infty^n, \vec{n})$$

$\Psi_{T,i}^n$ est le flux de diffusion calculé dans le triangle T .

$$\Psi_{T,i}^n = \Psi_{T,i}(w_{i_1}^n, w_{i_2}^n, w_{i_3}^n)$$

où les i_k désignent les sommets du triangle T . $S_{T,i}^n$ est la valeur des termes sources sur le triangle T .

4.1.1.5. Phase « mathématique » ou implicite

On calcule la matrice implicite constituée des différentes jacobienues des différents termes. Cette matrice est à diagonale dominante ce qui facilite la résolution du système et permet par la suite de prendre des grands nombres de C.F.L. La matrice obtenue est formée de blocs 9×9 . La ligne i du système linéaire s'écrit sous la forme :

$$D_i^n \delta w_i^{n+1} + \sum_{j \in v(i)} E_{ij}^n \delta w_j^{n+1} + \sum_{T, a_i \in T} \sum_{k, k \neq i} F_{ik}^n \delta w_k^{n+1} = \delta \hat{w}_i \quad (23)$$

où

$$D_i^n = \frac{\Delta t(i)}{\text{aire}(C_i)} I + \sum_{j \in v(i)} H_{1,ij}^n + H_{1,i}^{sw,n} + \sum_{T, a_i \in T} \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}^n}{\partial w_i} \right) + \frac{\partial S_i^n}{\partial w_i} \quad E_{ij}^n = H_{2,ij}^n; \quad F_{ik}^n = \sum_{T, a_i \in T, a_k \in T} \left(\frac{\partial \Psi_{T,i}^n}{\partial w_k} \right).$$

La matrice générée n'a pas de structure « périodique ». Néanmoins, elle reste creuse (le nombre de voisins d'une cellule donnée n'est pas constant). Pour la stocker, nous utilisons un stockage de type Morse. Grâce à la propriété de la diagonale dominante de la matrice du système (23), une méthode itérative de type Jacobi ou Gauss-Seidel nécessite en général 10 itérations pour atteindre une précision de 10^{-8} sur le résidu global.

Une fois le système (23) résolu, on actualise le champ w par :

$$w^{n+1} = w^n + \delta w^{n+1}.$$

Pour le calcul du pas de temps, nous adoptons une technique de pas local qui a l'avantage d'accélérer la convergence du calcul vers l'état stationnaire tout en respectant localement la condition de CFL.

5. RÉSULTATS NUMÉRIQUES

On présente ici des résultats numériques obtenus en utilisant l'algorithme décrit précédemment sur deux configurations dont l'une est en régime réactif. Le premier test est celui d'un écoulement isotherme derrière une marche descendante. On distingue, dans la figure 7, la zone de recirculation caractéristique de ce test.

Le deuxième test est celui d'un jet turbulent réactif d'hydrogène dilué avec écoulement annulaire d'air. Les conditions du calcul et le dispositif expérimental sont présentés dans [TAK].

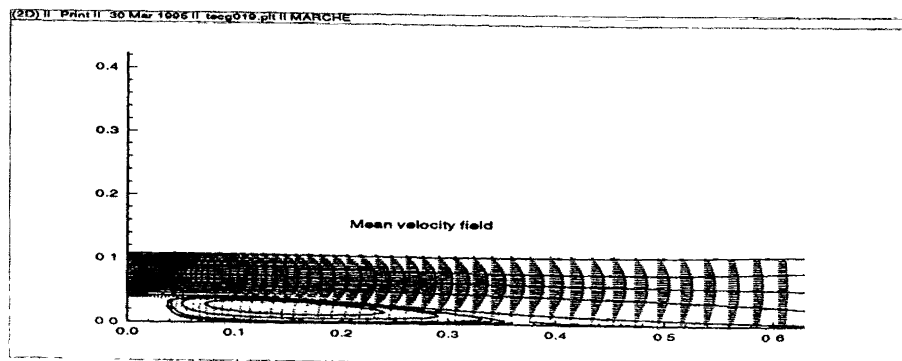


Figure 7. — Champ de vitesse moyen.

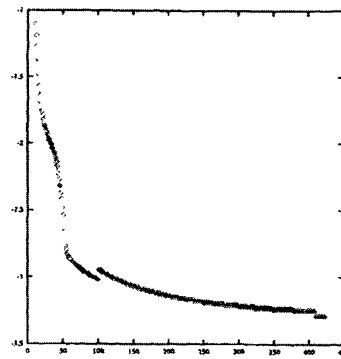


Figure 8. — Courbe de convergence.

Les figures 9 et 10 montrent les champs de température et de fraction massique de l'hydrogène.

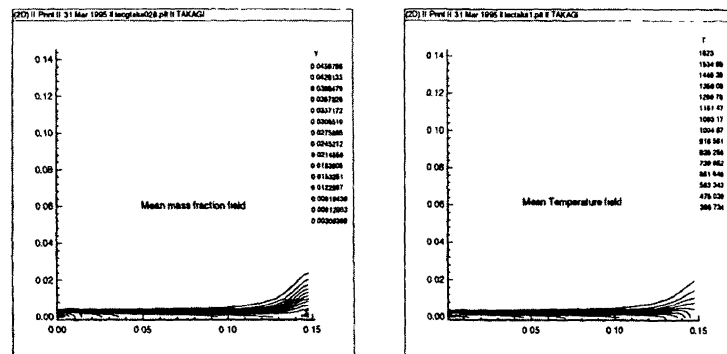


Figure 9. — Isovaleurs du champ de la température et du champ des fractions massiques.

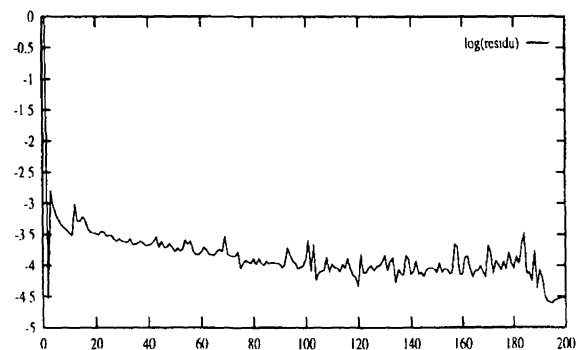


Figure 10. — Courbe de convergence.

6. CONCLUSION

On a présenté dans cet article un algorithme numérique pour la résolution des équations de Navier-Stokes couplées au modèle k -epsilon pour la turbulence et au modèle MIL pour la combustion turbulente. On utilise une formulation en éléments-volumes finis pour l'approximation spatiale de ce système. Ainsi, on utilise des cellules non structurées construites à partir d'une triangulation en joignant les centres de gravité des triangles aux milieux de leurs côtés. Une approximation en volumes finis est adoptée pour le calcul des flux de convection. Pour le calcul des termes source et des termes de diffusion, on utilise une interpolation linéaire P_1 .

L'algorithme, ainsi obtenu, est très robuste et converge rapidement. Le traitement spécial réservé aux modèles k -epsilon et MIL empêche l'apparition de valeurs négatives des variables de turbulence et de chimie.

RÉFÉRENCES

- [AB] ABGRALL R., *Généralisation du schéma de Roe pour le calcul d'écoulements de mélanges de gaz à concentrations variables*, La recherche Aérospatiale, 1988.
- [ABT] BEN TAIB A., *Étude mathématique et numérique d'un modèle de combustion turbulente*, Thèse de doctorat, Université Claude Bernard, Lyon I, 1993.
- [ARM] ARMINJON P., *Some aspects of high resolution numerical methods for hyperbolic systems of conservation laws, with application to gas dynamics*, Rapport INRIA 1986.
- [BL] LARROUTUROU B., *How to preserve the mass fractions positivity when computing compressible multi-component flows*, J. Comp. Physics.
- [BG] BORGHI R. & M. GONZALEZ, *Application of lagrangian Models of turbulent combustion*, Combustion and Flame n° 63, pp. 239-250, 1986.
- [BO] BORGHI R., *Turbulent combustion modelling*, Prog. Energy Comb. Sc. Vol. 14, pp. 245-292, 1988.
- [CH] CHIENG C. C. & HERNG L., *Comparaisons of TVD schemes for turbulent transonic projectile aerodynamics computations with a two equation model of turbulence*, Int. Journ. for Numer. Method. in fluids, 1993.
- [FZ] FEZOU F., *Résolution des équations d'Euler par un schéma de Van Leer en éléments finis*, Rapport INRIA No 358, 1985.
- [FLLO] FEZOU L., LANTERI S., LARROUTUROU B., OLIVIER C., *Résolution numérique des équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible en maillage triangulaire*, Rapport INRIA, mai 1989.
- [GEY] GEROLYMOS G. A., *Implicit multiple-grid solution of the compressible Navier-Stokes equations using $k-\epsilon$ turbulence closure*, AIAA Journal.
- [MO] MOHAMMADI B., *Étude du modèle k -epsilon de la turbulence pour les écoulements compressibles*, Thèse de doctorat, Université Paris VI, 1991.
- [TAK] TAKAGI T. et al., *Local laminarization in turbulent diffusion flames*, 17th Symp. Comb., 1978.
- [ROE] ROE P. L., *Approximate Riemann solvers, parameters vectors and difference schemes*, J. Comp. Phys., **43**, 1981.
- [ST] STEVE H., *Schémas implicites linéarisés décentrés pour la résolution des équations d'Euler en plusieurs dimensions*, Thèses, Université d'Aix-Marseille I, 1988.
- [STF] STOUFFLET B., *Résolution numérique des équations d'Euler des fluides parfaits compressibles par des schémas implicites en éléments finis*, Thèse de docteur-ingénieur, Université Paris 6, 1984.
- [SW] STEGER J., WARMING R. F., *Flux vector splitting for the inviscid gas dynamic with applications to finite-difference methods*, J. Comp. Phys., **40**, 1981.
- [VL] VAN LEER B., *Towards the ultimate conservative difference scheme I: the quest of monotonicity*, Lect. Notes in Phys., **18**, 1972.