



# Methodes numeriques pour la combustion supersonique : bilan et perspectives

Jean-Antoine Desideri, Hervé Guillard

► **To cite this version:**

Jean-Antoine Desideri, Hervé Guillard. Methodes numeriques pour la combustion supersonique : bilan et perspectives. [Rapport de recherche] RR-2002, INRIA. 1993. <inria-00074670>

**HAL Id: inria-00074670**

**<https://hal.inria.fr/inria-00074670>**

Submitted on 24 May 2006

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

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



UNITÉ DE RECHERCHE  
INRIA-SOPHIA ANTIPOLIS

Institut National  
de Recherche  
en Informatique  
et en Automatique

2004 route des Lucioles  
B.P. 93  
06902 Sophia-Antipolis  
France

# Rapports de Recherche

N°2002

*Programme 6*

*Calcul scientifique, Modélisation  
et Logiciel numérique*

## MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR LA COMBUSTION SUPERSONIQUE - BILAN ET PERSPECTIVES -

Jean-Antoine DESIDERI  
Hervé GUILLARD

Juillet 1993

# Méthodes Numériques pour la Combustion Supersonique - Bilan et Perspectives -

Jean-Antoine DESIDERI & Hervé GUILLARD

## Résumé

Ce rapport correspond à une étude sollicitée par le CNRS et présentée au Colloque CNRS sur le PRC "Combustion dans les Superstatoréacteurs", Paris, 21-22 Octobre 1991. On y examine les principales méthodologies numériques applicables en maillages structurés ou non-structurés, susceptibles d'être incorporées à un code de calcul pour les statoréacteurs. La discussion porte sur trois thèmes majeurs: *(i)* la génération et l'adaptation d'un maillage approprié à un calcul d'écoulement interne, *(ii)* la construction d'un schéma d'approximation pour un écoulement de mélange gazeux réactif, et *(iii)* l'efficacité de l'algorithme de résolution lorsque le modèle de cinétique chimique peut être raide.

# Numerical Methods for Supersonic Combustion - State-of-the-Art and Perspectives -

Jean-Antoine DESIDERI & Hervé GUILLARD

## Abstract

This report corresponds to a study solicited by CNRS and has been presented at the CNRS Colloquium related to the PRC "Combustion in the Superstatorreactors", Paris, 21-22 October, 1991. The principal numerical methodologies, applicable to either structured or unstructured meshes, that can potentially be incorporated in a computational code for superstatorreactors are examined. Three major themes are discussed: *(i)* the generation and adaptation of a mesh appropriate to an internal-flow computation, *(ii)* the construction of an approximation scheme for a mixture of reacting gases, and *(iii)* the efficiency of the solution algorithm in situations where the kinetic model may be stiff.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Modélisation physique et modélisation numérique</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Les problèmes numériques</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Génération de maillage et adaptativité</b>	<b>3</b>
3.1	Problèmes géométriques . . . . .	4
3.2	Représentation des couches limites . . . . .	7
3.3	Adaptation et zones de forts gradients . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Schémas d'approximation pour les mélanges gazeux</b>	<b>10</b>
<b>5</b>	<b>Problèmes d'efficacité pour les écoulements réactifs</b>	<b>16</b>
<b>6</b>	<b>Conclusion et recommandations</b>	<b>24</b>

# Méthodes Numériques pour la Combustion Supersonique - Bilan et Perspectives -

Jean-Antoine Désidéri, Hervé Guillard

Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique  
2004 Route des Lucioles, B.P. 93, F-06902 Sophia Antipolis Cédex

## Résumé

*Dans cet article, on passe en revue les principales méthodologies numériques applicables en maillages structurés ou non-structurés, susceptibles d'être incorporées à un code de calcul pour les statoréacteurs. La discussion porte sur trois thèmes majeurs: (i) la génération et l'adaptation d'un maillage approprié à un calcul d'écoulement interne, (ii) la construction d'un schéma d'approximation pour un écoulement de mélange gazeux réactif, et (iii) l'efficacité de l'algorithme de résolution lorsque le modèle de cinétique chimique peut être raide. Sur chaque thème, on cherche à tirer profit de l'expérience acquise en Combustion Subsonique et en Hypersonique pour donner des recommandations en vue de l'application envisagée en Combustion Supersonique.*

## 1 Modélisation physique et modélisation numérique

L'utilisateur d'un code de "CFD" (Computational Fluid Dynamics) dispose d'un outil complexe qui comporte au moins deux volets. Premièrement une modélisation physique qui se traduit par un système d'équations aux dérivées partielles. Deuxièmement, une méthode numérique d'approximation de ce système d'équations. Ces deux volets sont parfois étroitement imbriqués et il peut ne pas être aisé de les séparer. Néanmoins il importe de réaliser que la méthode numérique n'est qu'un outil au service de la modélisation physique et que celle-ci doit être le point de départ de la réalisation de tout code de CFD. En particulier, la méthode numérique utilisée dépend crucialement du ou des modèles physiques utilisés et une méthode qui peut être très efficace pour tel système d'équations peut en fait donner de pauvres résultats pour une autre modélisation. Une autre manière d'exprimer la même idée peut être de dire qu'il n'existe pas de code de CFD capables de calculer n'importe quel type d'écoulements et que chaque méthode a ses points forts et ses points faibles et s'applique à un type particulier d'écoulements ou de modèles. En particulier, la réalisation de codes dits "modulaires" capable de remplacer un modèle de turbulence par un autre ou une cinétique chimique par une autre arbitrairement compliquée demeure un objectif lointain. Il s'ensuit que la modélisation numérique (*la méthode numérique employée*) doit impérativement intervenir **après** un examen rigoureux et une définition précise des modèles physiques employés.

Cette définition est du ressort du physicien et s'appuie sur l'expérience, le raisonnement physique ou l'examen de modèles simplifiés (éventuellement résolus par voie numérique). Dans cette contribution, l'aspect modélisation physique ne sera abordé qu'épisodiquement. Ainsi par exemple, nous ne considérerons pas dans quelles circonstances, il est pertinent de se restreindre aux équations de la couche limite (Navier-Stokes parabolisé) ou s'il est possible d'utiliser le modèle de turbulence de Baldwin-Lomax plutôt que  $k - \epsilon$ , questions sans doute fondamentales mais qui doivent être abordées **avant** la définition des méthodes numériques. L'objectif de cette revue est donc de donner un panorama de techniques numériques générales pouvant s'appliquer en combustion supersonique tout en sachant bien que certaines d'entre elles seront plus ou moins pertinentes selon le niveau de modélisation choisie.

## 2 Les problèmes numériques

La simulation numérique est devenue un outil de plus en plus utilisé dans l'industrie aéronautique avec des succès certains. L'application des acquis obtenus au cours des 15 dernières années aux systèmes de propulsion des avions hypersoniques en cours de conception pour les prochaines décades posent cependant des problèmes (à la fois numériques et de modélisation) considérables. En effet, considérons une chambre de combustion en régime hypersonique. On distingue une zone d'alimentation, une zone d'injection, une zone de combustion suivie d'une zone de détente. Dans la zone d'alimentation (les entrées d'air), l'air déjà comprimé par l'onde de choc accompagnant le véhicule (et donc éventuellement déjà dissocié...) est recomprimé à travers une série d'ondes de choc générées par les parois en forme de coin des entrées d'air. Ces ondes de chocs vont se réfléchir sur les parois et interagir avec la couche limite qui se développe sur ces mêmes parois ainsi d'ailleurs qu'avec la couche limite qui se développe sur les parois du véhicule. Dans la zone d'injection, la principale difficulté est de promouvoir un mélange efficace entre l'air et l'hydrogène injecté. Le degré de mélange entre deux écoulements parallèles est en effet réduit à grands nombres de Mach. Les dispositifs imaginés pour accroître l'efficacité du mélange font appel à la création de vorticités engendrée par l'interaction entre un choc et la zone de mélange [39, 19, 46, 47] et l'on doit donc prendre en compte l'interaction entre une zone de cisaillement et un choc. Dans la chambre de combustion, la stabilisation de la flamme et le processus de combustion (ainsi que les transferts thermiques et de quantités de mouvement à la paroi) sont les principaux points d'étude à prendre en compte. Divers procédés de stabilisation de la flamme sont étudiés dans [6] : stabilisation par injection pariétale, par formation de poches, stabilisation sur un choc droit étudié numériquement dans [11]. Ces dispositifs ont en commun la formation d'ondes de choc permettant d'élever la température du mélange et donc de déclencher la combustion. Enfin dans la chambre de combustion diverses réactions de recombinaison peuvent apparaître avec une influence non négligeable sur la température du mélange et donc les caractéristiques de la poussée. Le problème ici est alors d'avoir une connaissance fine des phénomènes de chimie complexe caractérisé par de nombreuses échelles de temps très disparates.

Tout en étant loin d'être exhaustive, la description précédente met en relief les principales difficultés auxquelles va se heurter le calcul d'un réacteur supersonique. La liste suivante résume ces principales difficultés en les mettant en relation avec les diverses composantes d'un code de CFD :

- Choc forts : hétérogénéité du maillage, robustesse et précision de l'approximation.
- Couche limite : construction de maillages resserrés aux parois, précision des approximations.
- Interaction chocs-couche limite : maillage adapté
- Flamme de diffusion, stabilisation de la flamme : maillage adapté
- Chimie complexe : schéma en temps, problèmes de raideur temporelle.

Les paragraphes suivants sont consacrés à une description des principaux outils numériques aujourd'hui disponibles pour traiter ces problèmes.

### 3 Génération de maillage et adaptativité

Commençons par un simple fait : pour effectuer un calcul quelqu'il soit, on a besoin d'un maillage et la qualité de la solution obtenue dépend fortement de la qualité du maillage. Cette donnée évidente qui a pu être ignoré tant qu'il s'agissait d'effectuer des calculs dans des configurations bi-dimensionnelles simples prend maintenant une importance considérable au fur et à mesure que la simulation numérique aborde des problèmes dans des configurations complexes souvent tri-dimensionnelles en présence de phénomènes physiques (chocs, fronts de flammes) qui exigent une forte hétérogénéité du maillage. L'importance de ce point est attesté par la place croissante accordée à la génération et au contrôle du maillage lors des conférences numériques tandis qu'apparaissent des conférences entières consacrées à la génération de maillage (e.g. [41]).

La simulation numérique en mécanique des fluides utilise deux grands types de maillage. L'un est constitué de maillages structurés (et de ses extensions: structuré par blocs) tandis que l'autre est composé de maillages non-structurés. Le choix entre l'utilisation d'un de ces types de maillage est important car il conditionne le type de méthodes numériques qui pourra être utilisé : méthodes de différences ou de volumes finis éventuellement d'ordre élevé (méthodes compactes du 4<sup>ième</sup> ou du 6<sup>ième</sup> ordre) pour les maillages structurés, méthodes d'éléments finis et de volumes finis pour les maillages non-structurés. Dans la suite, on va passer en revue les avantages et les inconvénients de ces deux types de maillages par rapport aux problèmes spécifiques posés par le calcul d'écoulements réactifs à grands nombres de Mach, c'est à dire la nécessité de représenter des géométries complexes en utilisant des maillages très inhomogènes capables éventuellement de s'adapter au développement de la

solution ainsi que la possibilité de représenter de manière précise les couches limites.

### 3.1 Problèmes géométriques

La géométrie de la chambre de combustion d'un véhicule hypersonique peut sembler a priori relativement simple et ne pas nécessiter l'utilisation d'algorithmes sophistiqués pour en obtenir un maillage satisfaisant. Cependant les différentes parties de la chambre peuvent demander des résolutions très différentes, la forme des entrées d'air peut évoluer vers des configurations non-triviales (voir par exemple [42, 60]) et il peut être nécessaire pour prendre en compte certains effets de mailler une partie de *l'extérieur* de la chambre. Ces contraintes peuvent imposer l'utilisation de mailleurs efficaces. On décrit brièvement ci-dessous les principaux algorithmes utilisés dans la génération de maillages non-structurés et structurés.

#### Maillages non-structurés

**Méthodes de Delaunay-Voronoi :** Ces méthodes ont donné lieu à une littérature importante : [30, 69, 3, 53]...Elles s'appuient sur le critère souvent dit "de la boule vide". En effet un maillage de Delaunay aura la propriété que le cercle (resp. sphère en dimension 3) circonscrit à un triangle (resp. tétraèdre) ne contient pas d'autres points du maillage que les 3 (resp. 4) points définissant ce triangle (resp. tétraèdre). Cette propriété assure en dimension deux que la matrice résultant de la discrétisation d'un Laplacien en éléments finis P1 est une M-matrice ce qui peut être intéressant. Nous donnons ci-dessous la description d'un algorithme (parfois appelé algorithme de Bowyer) permettant de construire récursivement des maillages Delaunay à partir de l'ajout de points successifs. Considérons une triangulation de Delaunay et introduisons un nouveau point  $x_k$  dans la triangulation. Pour simplifier on supposera que ce point appartient à un des triangles (on peut toujours se ramener à ce cas). Soit alors  $\mathcal{S}$  l'ensemble des éléments de la triangulation dont le cercle circonscrit contient  $x_k$  et soient  $A_1, \dots, A_p$  les arêtes externes de cet ensemble. Le nouveau maillage est alors construit en détruisant les éléments de  $\mathcal{S}$  et en comblant la cavité ainsi créée à l'aide de nouveaux éléments construits en reliant  $x_k$  et les arêtes  $A_1, \dots, A_p$ . Le maillage ainsi obtenu est de Delaunay. Le maillage de Delaunay initial est construit à partir d'une discrétisation de la frontière du domaine à mailler. Les algorithmes diffèrent alors suivant les critères utilisés pour rajouter des points ainsi que suivant la manière d'assurer le "respect" de la frontière. On consultera sur ce sujet [22, 53, 4]. A l'heure actuelle, cette méthode est pleinement opérationnelle en deux et trois dimensions et permet de générer de façon totalement automatique des maillages de bonne qualité pour des configurations très complexes pour des temps de calculs très raisonnables (par exemple, la méthode de T. Baker permet de trianguler 25000 points soit à peu près 150.000 tétraèdres par minute sur un CrayII [5]).

**Méthodes d'avancée de fronts :** Ces méthodes ont été étudiées par de très nombreux auteurs, parmi les plus récentes contributions on citera [52, 21]. Ce sont des méthodes es-



sentiellement itératives : un front est construit à partir des données définissant le contour, puis plusieurs éléments internes sont construits par ajout de points de manière "optimale", c'est à dire de telle façon que les éléments s'appuyant sur ces points soient aussi réguliers que possible. Le front est alors mis à jour et l'on poursuit le processus de création des éléments tant que le front n'est pas vide. L'avantage de cette procédure réside essentiellement en sa rapidité : elle est beaucoup plus rapide que la méthode de Delaunay-Voronoi. Cependant et spécialement en dimension 3 l'application des techniques d'avancée de fronts est délicate et les algorithmes peuvent ne pas converger sur certaines configurations particulièrement complexes.

### Maillages structurés

Le recouvrement d'une région complexe par un seul maillage structuré logiquement équivalent à un cube est en général impossible et il faut opérer une décomposition du domaine en un certain nombre de sous-domaines (ou blocs) qui devront être "recollés" entre eux : on parle alors d'approches "blocs-structurées". Le codage des méthodes numériques se fait alors soit par une renumérotation globale du maillage résultant de l'addition des différents blocs, technique proche des éléments finis, soit plus couramment en plaçant une couche supplémentaire autour de chaque bloc, les valeurs des variables dans cette couche pointant sur les valeurs des variables dans les blocs adjacents. Dans l'approche bloc-structurée, la principale difficulté réside dans la construction du maillage de chaque bloc qui doit respecter des critères d'homogénéité et/ou d'orthogonalité. La génération de ces maillages est habituellement réalisée par la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles qui est soit de type elliptique, soit de type hyperbolique. Les méthodes basées sur des équations hyperboliques étant plus particulièrement adaptées aux problèmes d'aérodynamiques externes, nous exposons ci-dessous le principe des méthodes elliptiques. Pour plus de détail, on peut renvoyer par exemple à [66, 33, 62].

### Génération de Maillage par solveur elliptique

Dans un article de revue récent, J. L. Steger [62] a fourni les bases des méthodes de génération de maillage structuré par utilisation d'équations aux dérivées partielles, elliptiques ou hyperboliques, et illustré ces techniques par de nombreux exemples. Nous référons à sa publication pour une présentation détaillée, et donnons ici les idées principales de la génération au moyen d'un solveur elliptique. Pour la simplicité, on se restreint au cas bidimensionnel bien que la méthode admette quelques généralisations tri-dimensionnelles.

Etant donné un domaine simple du plan cartésien  $(x, y)$ , c'est-à-dire un domaine topologiquement semblable à un rectangle, on cherche à définir des variables  $\xi(x, y)$ ,  $\eta(x, y)$  telles que deux côtés opposés du domaine sont des lignes iso-valeurs de  $\xi$  (disons  $\xi = 0$  et  $\xi = 1$ ), les deux autres de  $\eta$  (disons  $\eta = 0$  et  $\eta = 1$ ), ces variables ayant une variation monotone entre ces bornes. Lorsqu'il en est ainsi, ces lignes iso-valeurs de  $\xi$  et de  $\eta$  peuvent jouer le rôle de lignes de coordonnées transformées. En vertu du principe du maximum, c'est le cas

en particulier, si les variables  $\xi$  et  $\eta$  sont obtenues en résolvant dans le domaine donné les équations de Laplace,

$$\xi_{xx} + \xi_{yy} = 0, \quad \eta_{xx} + \eta_{yy} = 0$$

(avec des conditions de Dirichlet du type: bord 1:  $\eta = 0$ , bord 2:  $\xi = 1$ , bord 3:  $\eta = 1$ , bord 4:  $\xi = 0$ ). On peut s'en convaincre simplement en examinant un analogue discret de ces équations:

$$\frac{\xi_{j+1,k} - 2\xi_{j,k} + \xi_{j-1,k}}{\Delta x^2} + \frac{\xi_{j,k+1} - 2\xi_{j,k} + \xi_{j,k-1}}{\Delta y^2} = 0$$

ce qui donne, pour  $\xi_{j,k}$  la moyenne pondérée suivante:

$$\xi_{j,k} = \frac{\Delta y^2(\xi_{j+1,k} + \xi_{j-1,k}) + \Delta x^2(\xi_{j,k+1} + \xi_{j,k-1})}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}$$

et de même pour  $\eta$ . On voit qu'il n'est pas possible que  $\xi_{j,k}$  soit le maximum (ou minimum) des valeurs de  $\xi$  aux quatre points qui l'entourent. Donc, dans toute cellule, les extrema de  $\xi$  (ou de  $\eta$ ) sont atteints sur le bord, ce qui assure la propriété de monotonie désirée.

En pratique au lieu de résoudre les équations donnant  $\xi(x, y)$  et  $\eta(x, y)$  dans le domaine du plan cartésien, on résout les équations donnant  $x(\xi, \eta)$  et  $y(\xi, \eta)$  dans un carré uniformément discrétisé. Ces équations s'écrivent:

$$\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} = 0, \quad \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} = 0, \quad (1)$$

où

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2, \quad \beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta, \quad \gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2$$

et forment un système elliptique nonlinéaire qui est soumis à des conditions de Dirichlet équivalentes à la spécification des bords du domaine initial dans le plan cartésien. On peut résoudre ce système itérativement (relaxations successives par point ou par ligne, directions alternées, multigrilles, gradient conjugué, etc).

Dans les applications, on modifie légèrement ce système en spécifiant des seconds membres non-nuls afin de mieux contrôler l'espacement local des mailles.

Les maillages obtenus ainsi sont très réguliers bien que non orthogonaux en général. La contre-partie de cette qualité est qu'un maillage structuré "lisse" ne permet que des évolutions progressives des caractéristiques locales. Donc, on ne peut pas raffiner de manière à la fois très intensive et très localisée.

Les mérites principaux de ces méthodes sont d'être très robustes et bien fondées mathématiquement (principe du maximum), et de permettre une spécification complète des frontières, ce qui semble particulièrement adapté aux calculs d'aérodynamique interne. Leur inconvénient réside dans leur coût puisqu'il faut résoudre un système elliptique nonlinéaire souvent avec un grand nombre d'inconnues. Ceci peut être pénalisant lorsque, pour un problème instationnaire, on construit une suite de maillages adaptés à l'évolution de la solution.

D'autres systèmes d'équations elliptiques (ou leurs analogues discrets) peuvent être résolus pour calculer des maillages réguliers. En France, citons les travaux de Jacquotte à l'ONERA [34] et la méthode variationnelle de Saouab [57].

## 3.2 Représentation des couches limites

Les couches limites sont par définition des structures physiques ayant une direction préférentielle suivant laquelle les gradients sont beaucoup plus grands que dans la ou les autres directions. Ceci implique d'une part que ces phénomènes nécessitent particulièrement l'usage d'un maillage adapté, et d'autre part que l'adaptation naturelle, au moins pour ce qui est du maillage initial, peut (ou doit) se faire plutôt en maillage structuré.

La technique la plus rudimentaire consiste à construire une couche de maillage à partir de la paroi, le reste du maillage étant construit autrement. Dans les cas simples, on peut construire cette couche par une procédure "ad hoc", simplement en spécifiant les noeuds par une formule tenant compte de l'équation de la paroi et garantissant par exemple, une distribution normale des points en raison géométrique (une option très souvent employée). Lorsqu'à l'inverse la paroi est définie par la donnée numérique de points, on peut construire le maillage à partir de la paroi par empilement successif de couches. Une des méthodes les plus satisfaisantes pour réaliser cela est d'intégrer un système d'équations aux dérivées partielles hyperbolique dans la direction normale à la paroi, la surface donnée servant de "condition initiale". Citons, comme prototype de ces méthodes, l'algorithme d'orthogonalité-volume de Steger [62] qui en 2D, consiste à résoudre le système suivant:

$$x_\xi y_\xi + x_\eta y_\eta = 0, \quad x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi = \mathcal{A}$$

Dans ce cas le maillage construit est orthogonal et on contrôle son degré de raffinement local par la spécification de la distribution des aires,  $\mathcal{A}$ . Cette méthode s'apparente à la méthode frontale de Peraire et al. [52].

Citons que l'on peut également adapter à une couche limite un maillage construit globalement par un solveur elliptique. Il convient pour cela, comme on l'a mentionné dans la section précédente, de spécifier des seconds membres non nuls au système elliptique résolu. Ceci peut se faire aussi de manière monodimensionnelle pour une couche limite (voir exemples dans [62]).

La construction de maillages *non-structurés* adaptés à la capture des couches limites a récemment reçu l'attention de plusieurs auteurs [52, 67, 48, 10]. Pour les méthodes d'avancée de front comme pour les méthodes de Delaunay, la procédure utilisée repose sur la définition d'un "vecteur d'étirement" qui transforme localement l'espace euclidien par une transformation du type :

$$x' = (1. + (s - 1) \sin \theta)x \quad ; \quad y' = (1. + (s - 1) \cos \theta)y \quad (2)$$

où  $s > 1$  est l'intensité du vecteur d'étirement qui est orienté d'un angle  $\theta$  par rapport au repère cartésien. Une des difficultés de ce type d'approche est que le vecteur d'étirement doit être défini sur un maillage préexistant. Dans [51], ceci est fait à partir d'une triangulation préalable grossière du domaine à mailler tandis que dans [48] le maillage initial est d'abord construit par un mailleur hyperbolique structuré avant d'être triangulé dans l'espace  $x', y'$ . Le processus peut être répété plusieurs fois en affinant progressivement la définition du vecteur d'étirement et éventuellement en couplant la procédure au calcul de l'écoulement. On obtient alors une méthode de maillage adaptatif (voir section III.3). Remarquons que les méthodes

d'avancée de front construisent dans cette approche les nouveaux éléments de la manière la plus régulière possible par rapport à la métrique induite par (2) tandis que la triangulation Delaunay doit être modifiée de façon à construire des éléments de grands rapport d'aspect. En effet, les méthodes de Delaunay construisent des éléments les plus équilatéraux possibles, l'application d'une triangulation Delaunay a un nuage de points resserrés selon une direction privilégiée résulte alors en une triangulation formée de triangles de faibles rapports d'aspect mais de tailles très différentes. Cette modification de la triangulation Delaunay est réalisée en redéfinissant la métrique par des formules de type (2) (voir [67, 48]). Ces approches ne sont donc pas exemptes de difficultés. Une autre possibilité est alors d'utiliser un maillage structuré au voisinage des parois tandis qu'un maillage non-structuré est employé en dehors des couches limites. Cette approche, proposée notamment dans [70, 31] permet aussi l'utilisation aisée de modèles de turbulence algébriques qui requièrent la connaissance de la distance à la paroi. Son grand inconvénient est qu'il est alors nécessaire de disposer d'une méthode numérique capable d'utiliser des éléments de différentes natures (triangles et quadrangles en 2-D; tétraèdres, prismes et hexaèdres en 3-D).

Enfin signalons que le contrôle automatique du raffinement dans une couche limite dont on ignore a priori l'épaisseur constitue un problème non trivial. Pour cette raison, il est banal mais important de rappeler que pour qu'un calcul d'écoulement soit fiable, il convient (particulièrement lorsque l'écoulement est visqueux) de démontrer par l'expérience numérique la convergence de l'approximation par raffinements successifs.

### 3.3 Adaptation et zones de forts gradients

#### Déplacement des noeuds

Alors que les chocs sont, comme les couches limites, des structures monodimensionnelles (en 2D), ils en diffèrent dans le traitement numérique du raffinement par le fait qu'ils ne sont pas localisés a priori. Une forme d'auto-adaptation est donc nécessaire. L'enrichissement du maillage (voir section suivante) est une technique simple, mais pas nécessairement la meilleure. Le déplacement des noeuds en est une alternative.

On peut "statiquement" calculer la solution sur un maillage initial; puis reconstruire un meilleur maillage; puis refaire le calcul; répéter éventuellement la procédure. Une technique plus "sophistiquée" consiste à adapter le maillage à mesure que la solution est calculée ("adaptation dynamique"). On peut "déplacer" légèrement les noeuds à chaque itération en temps. Dans ce cas, la topologie du maillage ne varie pas (on n'ajoute ni ne retranche de points, les connexions sont inchangées), ce qui est très attractif en différences finies (maillages structurés). La procédure la plus utilisée consiste à maintenir constant sur tout le maillage le produit d'une certaine fonction poids et la taille de l'élément. Diverses techniques sont possibles pour parvenir à cet objectif. Gnoffo ([25]) a été l'un des précurseurs de la "méthode des ressorts" dans laquelle deux noeuds voisins sont liés par un ressort dont on règle la raideur

proportionnellement à la variation d'un critère entre ces deux points; les nouvelles positions sont définies par les équations d'équilibre du système de ressorts. Le maillage a donc tendance à se resserrer là où le gradient *directionnel* est important. Cette méthode a été modifiée notamment par Nakahashi et Deiwert [49] et Palmerio [50] en introduisant des forces de torsion ou de pression qui permettent de mieux contrôler la régularité du maillage. Les méthodes dites variationnelles cherchent à minimiser une intégrale dont l'intégrande est une fonction d'une estimation d'erreur. Thompson [66] a montré que ces méthodes sont équivalentes à la résolution d'un système d'équations elliptiques de type (1) avec second membre non nul. C'est aussi le cas du système d'équations résolu dans la méthode des ressorts, (La fonction à minimiser est ici l'énergie du système de ressort). Toutes ces méthodes sont donc étroitement apparentées.

Une fois le nouveau maillage calculé, on doit y projeter la solution. Remarquons que cette projection doit être conservative, ce qui peut se réaliser par un algorithme de transport [50], ou directement en incluant la vitesse du maillage dans la formulation discrète [38].

### Enrichissement du maillage

Il existe ici une différence importante entre les techniques utilisées sur maillages non-structurés et celles appliquées en maillages structurés. En effet, alors que l'enrichissement est une procédure extrêmement simple à mettre en oeuvre sur des maillages non-structurés, elle oblige à une révision complète des algorithmes de résolution et du codage pour pouvoir être appliquée sur des maillages initialement structurés. Nous commencerons par envisager le cas non-structuré. Les algorithmes utilisés sont de deux types. Dans le premier, le maillage est totalement reconstruit à partir de la solution obtenue sur un premier maillage (on peut évidemment répéter la procédure). Cette technique proposée notamment dans [52] utilise comme au paragraphe II.2 la définition d'un vecteur d'étirement qui cette fois est rendu dépendant de la solution calculée sur le maillage précédent. La seconde approche plus simple se contente de rajouter et d'ôter des éléments à partir d'un maillage grossier selon un critère basé sur une estimation de l'erreur ou sur la variation d'une grandeur physique caractéristique. En combustion supersonique, cette approche a notamment été illustrée dans [13]. Bien que très efficace, cette approche a cependant l'inconvénient de générer des maillages avec des angles obtus à cause des nécessaires connections entre les éléments divisés et ceux du maillage sous-jacent. Cela peut être un inconvénient pour le traitement des termes de diffusion. La description d'une implémentation informatique efficace de ces algorithmes de raffinement/déraffinement peut être trouvée dans [36].

Ainsi que nous l'avons mentionné précédemment, l'utilisation de techniques de raffinement de maillages est beaucoup moins aisée dans le cas de maillages structurés. Le fait de rajouter ne serait ce qu'un point impose en effet de rajouter une ligne (un plan en 3-D) entière de maillage si l'on veut conserver la structure du maillage ou bien détruit complètement cette structure. Nonobstant ces difficultés, plusieurs auteurs ont introduit des algorithmes

de raffinement à partir de maillages structurés [27, 8]. Ces algorithmes divisent les cellules du maillage de base en 4 puis en 16 etc ...mais ne cherchent pas à maintenir une connectivité entre les nœuds ajoutés et ceux du maillage initial (en éléments finis, on parlerait de maillage non-conforme). En écoulements réactifs, ces techniques ont été utilisées par [61] pour des calculs de flammes de diffusion subsoniques. Il existe donc des nœuds "orphelins" ou "pendus" (hanging nodes) pour lesquels on doit utiliser des formules d'approximation différentes et/ou utiliser des formules d'interpolation. Dans sa forme la plus élaborée, (parfois appelée "Chimera method") cette technique superpose des grilles structurées construites indépendamment les unes des autres, le passage d'information de l'une à l'autre s'effectuant par interpolation. Les avantages de cet ensemble de techniques sur l'approche non-structurée ne sont pas très clairs. En particulier, la gestion des différents niveaux de maillage et le traitement des interfaces entre zones raffinées et zones grossières compliquent singulièrement le codage. En pratique, il n'est pas sûr que les codes résultants de ces approches soient très différents dans leurs implémentations des codes non-structurés. Certains d'entre eux adoptent d'ailleurs une structure de données très semblable à celle utilisée en éléments finis [56].

## 4 Schémas d'approximation pour les mélanges gazeux

La simulation numérique d'écoulements de mélange gazeux présente deux difficultés majeures. La première est dans l'extension au cas d'un mélange des schémas d'approximation des termes de convection dans la partie eulérienne du système. On s'intéresse alors particulièrement au fait que l'on connaisse ou non un Jacobien exact de cette approximation, car cela conditionne à la fois la décomposition des flux en cas d'approximation décentrée, et la performance des algorithmes implicites. La deuxième est liée à l'introduction de modèles complexes pour les termes de diffusion et les conséquences qui en résultent sur le traitement numérique de ces termes.

On examine ces deux questions séparément dans les sections suivantes dans le cas d'un écoulement monodimensionnel, pour simplifier l'écriture.

### *Approximation des écoulements de mélange non visqueux*

Les équations d'Euler sont complétées par des équations de convection d'espèces pour former un système qui en une dimension d'espace, s'écrit:

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0 \\ E_t + [u(E + p)]_x = 0 \\ (\rho Y_s)_t + (\rho u Y_s)_x = \Omega_s \end{cases} \quad (s = 1, 2, \dots, N_s) \quad (3)$$

Les trois premières équations ont la forme classique des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Dans les équations de bilan d'espèces ,

$Y_s$  représente la fraction massique de l'espèce  $s$ , et  $\Omega_s = \Omega_s(\rho, T, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_s})$  est le taux de production de cette espèce. On peut remarquer que ce système d'équation est sur-déterminé. En effet, examinons de plus près certaines relations de conservation du mélange. Les taux de production sont fournis par le modèle de cinétique chimique employé. Quel qu'il soit, on a :

$$\sum_s \Omega_s = 0$$

et puisque  $\sum_s Y_s = 1$ , les équations de bilan d'espèces s'ajoutent pour redonner l'équation de conservation de la masse. Le système précédent est donc surabondant.

On peut encore simplifier le système, si certaines relations existent entre les différents constituants du mélange. Ainsi, par exemple, en hypersonique où l'on s'intéresse à la dissociation de l'air, les  $N_s$  espèces du mélange sont issues d'un certain nombre  $N_c$  de constituants atomiques; par exemple pour un mélange d'air du type  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$  et  $O$ , les atomes de  $N$  et de  $O$  sont ces constituants:  $N_c = 2$ . Soit alors  $\alpha_s$  le nombre d'atomes de l'un quelconque de ces constituants dans l'espèce  $s$ . On a également la relation:

$$\sum_s \frac{\alpha_s}{M_s} \Omega_s = 0$$

(où  $M_s$  est la masse molaire). Il en résulte que la quantité

$$\sum_s \frac{\alpha_s}{M_s} Y_s$$

est conservée par ligne de courant. Si on suppose que toutes les lignes de courant émanent d'un milieu (peut-être non-uniforme mais) tel que cette grandeur  $y$  est constante, alors cette quantité est constante partout. Utilisant ceci et la relation  $\sum_s Y_s = 1$ , on obtient  $N_c$  relations algébriques de conservation des atomes des constituants. En définitive, d'un point de vue purement mathématique, on peut donc réduire le système précédent d'un nombre d'équations égal au nombre d'espèce moins une ou même si la somme  $\sum_s \frac{\alpha_s}{M_s} Y_s$  est constante partout (cas de la dissociation de l'air par exemple) à un nombre d'équations égal au nombre de constituants  $N_c$ .

Pour cette raison, on trouve dans la littérature, deux types d'approche:

- ou bien on traite le système réduit formé des équations d'Euler sous forme usuelle complétées par  $N_s - 1$  (ou  $N_s - N_c$ ) équations de bilan d'espèces,
- ou bien c'est l'équation de conservation de la masse que l'on supprime et on traite toutes les équations d'espèces globalement et conjointement aux équations de conservation de la quantité de mouvement et d'énergie.

La première approche présente l'avantage de permettre un traitement modulaire du système. On se contente de traiter d'une part la partie eulérienne du système par une modification simple d'un "code" Euler classique écrit pour un gaz inerte, principalement par l'utilisation d'une loi d'état qui tient compte de la composition locale. Lorsque l'approximation

est de type décentrée, la composition peut être gelée au cours de cette étape, par la technique du  $\gamma$ -équivalent. On discrétise ensuite les équations d'espèces en calquant l'approximation de l'équation de la masse. Cette approche s'est révélée à la fois précise et robuste pour des écoulements hypersoniques réactifs externes [15] où la difficulté majeure réside dans la capture d'un choc fort. Selon certains auteurs, cette technique peut cependant conduire à une perte de précision. En effet, cette approche impose cependant un certain arbitraire dans le choix de l'équation supprimée. Dans un problème où l'une des espèces est toujours en excès, on pourra évaluer la fraction massique de cette espèce par la relation  $\sum_s Y_s = 1$ . Cependant ceci n'est pas toujours possible par exemple dans une flamme de diffusion où le fuel ou l'oxydant sont alternativement en excès ou déficients suivant le côté de la flamme où l'on se trouve.

La seconde approche plus générale, est cependant beaucoup moins "modulaire": en effet, il n'est plus possible d'utiliser tel quel un code résolvant les équations d'Euler mono-espèce et l'introduction de nouveaux modèles de cinétique chimique impose des modifications du code.

Enfin, signalons que si mathématiquement les deux systèmes d'équations sont équivalents, ils peuvent ne plus l'être après discrétisation si les approximations utilisées ne sont pas linéaires, ce qui est notamment le cas des techniques modernes de résolution des systèmes hyperboliques utilisant des limiteurs.

Le système (3) est complété par:

- l'équation d'état donnant la pression en fonction de la température et de la composition, et
- l'équation donnant l'expression de l'énergie totale  $E$  (par unité de volume) en fonction des grandeurs thermodynamiques et de la composition.

Nous allons voir que suivant la forme que prennent ces deux équations les formulations numériques sont plus ou moins générales.

Bien que le débat entre l'utilisation de schémas centrés et décentrés soit certainement loin d'être clos, l'examen des colloques et conférences consacrées à la simulation numérique en mécanique des fluides montre une utilisation croissante des schémas décentrés lorsque les solutions sont très discontinues. Ceci ne signifie nullement que les schémas centrés doivent être bannis de l'étude de la combustion supersonique. Ainsi le code SCRAMIN [40, 42] dérivé de NASCRIN utilise un schéma de MacCormack pour l'étude des entrées d'air d'un scramjet. Dans [55] on trouvera une comparaison entre divers codes utilisés à NASA Langley dans l'étude de configurations hypersoniques et qui emploient des approximations soit décentrées, soit centrées. Cependant l'extension aux écoulements multi-espèces des schémas centrés ne posant pas de problèmes particuliers, le reste de ce paragraphe sera consacré à l'examen des divers problèmes posés par l'application de schémas décentrés aux écoulements multi-espèces. On pourra trouver une revue plus détaillée que ci-dessous dans [43].



Les difficultés essentielles sont maintenant résolues lorsque l'on considère un mélange de gaz parfaits. Faisant l'hypothèse que les chaleurs spécifiques à volume et à pression constants de l'espèce  $k$   $Cv_k, Cp_k$  sont constantes, on notera  $\gamma_k$  leur rapport. Le poids moléculaire de l'espèce  $k$  satisfait la relation de Mayer :

$$W_k(Cp_k - Cv_k) = R$$

où  $R$  est la constante des gaz parfaits. La pression est donnée par la loi de Dalton :

$$p = \sum_k p_k$$

dans laquelle chaque pression partielle est donnée par

$$p_k = \rho Y_k \frac{R}{W_k} T$$

où  $T$  est la température du mélange. L'énergie totale a alors l'expression suivante :

$$E = \sum_k \left( \frac{1}{2} \rho Y_k u^2 + \rho Y_k Cv_k T + \rho Y_k h_k^o \right)$$

où  $h_k^o$  est l'enthalpie de formation de l'espèce  $k$ . On montre alors aisément que le système est hyperbolique et que le flux est une fonction homogène de degré 1 (e.g. [1]). De plus comme dans le cas d'un gaz à un composant, on sait expliciter la solution du problème de Riemann ([1]). En particulier, on montre que le premier et le dernier champs caractéristiques (associés respectivement aux valeurs propres  $u - c$  et  $u + c$ ) sont vraiment non-linéaires tandis que les champs caractéristiques associés à la valeur propre  $u$  sont linéairement dégénérés. Ces résultats permettent alors d'étendre au cas multi-espèces la plupart des schémas décentrés utilisés pour les équations d'Euler. Ainsi les "flux vector-splitting" de Steger et Warming et de van Leer s'étendent très simplement dans ce cas, le très utilisé schéma de Roe a été construit pour le cas multi-espèce dans [1] tandis que l'extension du schéma d'Osher-Solomon a été faite par Abgrall et Montagné [2]. On trouvera dans [14] une comparaison entre ces différents schémas ainsi d'ailleurs qu'avec le schéma présenté dans [35]. Ce dernier schéma a la propriété de préserver la positivité des espèces et est donc intéressant pour des études de combustion. Il utilise cependant une formulation avec  $N_s - 1$  équations d'espèces complétées par l'équation de conservation de la masse et n'est pas différentiable ce qui peut être un handicap si l'on veut utiliser un schéma en temps implicite.

Les écoulements réactifs étant caractérisés par des variations de température très importantes, il est souvent nécessaire de prendre en compte les variations des chaleurs spécifiques avec la température. La définition de l'énergie totale devient alors :

$$E = \sum_k \left( \frac{1}{2} \rho Y_k u^2 + \rho Y_k \left( \int_{T_{ref}}^T Cv_k(T) dT + h_k^o \right) \right)$$

D'autres modifications de l'équation de l'énergie peuvent être introduites si l'on doit prendre en compte les énergies de vibration des molécules et/ou l'énergie des électrons lorsque

l'ionisation ne peut être négligée (cela peut être nécessaire si l'écoulement atteint de très hautes températures). Une modélisation possible de cette situation consiste à introduire des équations supplémentaires pour les énergies de vibration de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_n e_n + \frac{\partial}{\partial x} \rho_n e_n u = \rho_n \hat{e}_n + e_n \Omega_n$$

où  $e_n$  est l'énergie de vibration de l'espèce  $n$  en déséquilibre thermique, fonction inversible de la température de vibration et  $\hat{e}_n$  est un terme de relaxation vers l'équilibre thermique donné par exemple par le modèle de Landau-Teller. Dans ce cas, l'essentiel des résultats précédents demeure vrai : le système est hyperbolique et les flux sont homogènes de degré un. Il est alors toujours possible d'étendre à ces modèles les principaux schémas décentrés usuels. En particulier, on sait construire pour ces modèles une matrice de Roe diagonalisable [1].

En fait, à l'exception du schéma d'Osher-Solomon, les schémas décentrés usuels peuvent s'étendre à des modèles où la pression suit simplement la loi de Mariotte :

$$p_k = \rho_k f_k(T)$$

et où l'énergie interne est donnée par :

$$E = \sum_k \left( \frac{1}{2} \rho Y_k u^2 + \rho Y_k g_k(T) \right)$$

à condition que les fonctions  $f_k(T)$  et  $g_k(T)$  soient monotones croissantes [1, 43]; ce qui recouvre une assez large classe de modèles de mélanges gazeux.

#### *Ecoulements réactifs visqueux*

D'un point de vue numérique, les termes paraboliques des équations de Navier-Stokes sont discrétisés par des approximations centrées. Si l'introduction de ces termes dans un code existant résolvant les équations d'Euler ne présente généralement pas de difficulté de principe, elle a bien évidemment des conséquences importantes: *(i)* sur la solution, *(ii)* sur le raffinement qu'il est nécessaire d'apporter au maillage pour capturer cette solution (notamment pour contrôler le rapport entre la viscosité artificielle et la viscosité physique), et *(iii)* sur l'efficacité de la méthode de résolution en maillage raffiné. Dans les couches limites, nous avons vu qu'un maillage de type structuré est préférable au moins initialement (avant une éventuelle adaptation dynamique). Mais outre le contrôle de l'espacement des points dans la couche limite, notons que dans un écoulement visqueux il est déconseillé d'utiliser des éléments fortement distordus. Ceci peut se produire par exemple lorsqu'on a déplacé les noeuds pour mieux capturer un choc. En effet, l'approximation centrée des termes paraboliques peut alors perdre de sa consistance lorsque le "rapport d'aspect" devient grand. Par conséquent, il est préférable dans ce cas d'adapter par un enrichissement isotrope, ce qui n'est pas nécessairement le cas pour un écoulement non-visqueux.

Considérons maintenant quelques aspects liés à la modélisation des termes paraboliques dans le cas d'un écoulement réactif.

Il convient tout d'abord de calculer la viscosité  $\mu$  et la conductivité  $\lambda$  du mélange qui fournissent le tenseur des contraintes,

$$\tau_{xx} = (2\mu + \nu)\frac{\partial u}{\partial x} + \nu\frac{\partial v}{\partial y}, \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right), \quad \tau_{yy} = (2\mu + \nu)\frac{\partial v}{\partial y} + \nu\frac{\partial u}{\partial x}$$

et le flux thermique (loi de Fourier),

$$q_x = -\lambda\frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y = -\lambda\frac{\partial T}{\partial y}.$$

(On suppose que la loi de Stokes s'applique:  $3\nu + 2\mu = 0$ .) La plage de température envisagée ne permet pas d'obtenir ces grandeurs par une formule de Sutherland. On peut en utiliser plusieurs, une par plage de température, mais ceci n'est pas encore suffisant car il convient généralement de tenir compte aussi de la composition (sinon on utilise l'hypothèse d'équilibre chimique). Une alternative à cela est d'utiliser un modèle plus complexe où la viscosité de chaque espèce  $\mu_s$  est donnée par une formule en fonction de la température, et de même pour la conductivité. Par exemple, en hypersonique, dans le cas de l'air, on a utilisé [58], [59] la formule de Blottner [9] basée sur l'interpolation de résultats de la théorie de Chapman-Enskog

$$\mu_s = 0.1 \exp[(A_s \ln T + B_s) \ln T + C_s]$$

la conductivité thermique étant calculée par la relation d'Eucken:

$$\lambda_s = \mu_s \left( \frac{5}{2} C_{v_s}^{TR} + C_{v_s}^{ROT} + C_{v_s}^{VIB} \right).$$

Les grandeurs associées au mélange s'obtiennent par une moyenne de Wilke [71]

$$\mu = \sum_s \frac{\psi_s \mu_s}{\phi_s}, \quad \lambda = \sum_s \frac{\psi_s \lambda_s}{\phi_s}$$

où

$$\psi_s = \frac{M Y_s}{M_s}$$

et

$$\phi_s = \sum_r \psi_r \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left( \frac{m_r}{m_s} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2 / \sqrt{8 \left( 1 + \frac{m_s}{m_r} \right)}.$$

Considérons maintenant la modélisation des diffusions d'espèces. L'équation de bilan de l'espèce  $s$  s'écrit comme suit:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s) + \text{div} \left( \rho_s (\vec{V} + \vec{V}_s) \right) = \Omega_s$$

où  $V_s$  est la vitesse de diffusion de l'espèce  $s$ . On a en particulier,

$$\sum_s \rho_s = \rho, \quad \sum_s \rho_s V_s = 0$$

Par conséquent, la sommation de ces équations redonne l'équation de conservation de la masse. Les modèles les plus simples consistent à modéliser la vitesse de diffusion par une loi de Fick, ce qui donne:

$$\rho_s V_s = -\rho D_s \overline{\nabla Y_s}$$

Avant d'aborder la question de la modélisation des coefficients  $D_s$ , examinons le cas où  $D_s = D$  pour tout  $s$ . On a alors:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_s) + \text{div} \left( \rho \vec{V} Y_s - \rho D \overline{\nabla Y_s} \right) = \Omega_s$$

ce qui implique que:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q) + \text{div} \left( \rho \vec{V} Q - \rho D \overline{\nabla Q} \right) = 0$$

où  $Q = \sum_s \frac{\alpha_s Y_s}{M_s}$ . Plaçons-nous dans le cas simple où la quantité  $Q$  est constante sur les frontières; alors  $Q$  est constant partout, ce qui traduit la conservation des atomes d'un constituant donné. Ecrivant cette loi pour chaque constituant redonne la conservation de la masse. Cette loi est en général violée lorsque le modèle est tel que  $D_s$  n'est pas le même pour toutes les espèces. Il faut alors soit modéliser le tenseur des diffusions de manière plus complexe par un tenseur non-diagonal soit appliquer un facteur d'échelle sur les fractions massiques [24], soit utiliser des lois de Fick sur le système réduit et imposer algébriquement la conservation des atomes ce qui est acceptable lorsque les conditions aux frontières sont constantes [58], [59], [28] (ce qui semble malheureusement peu réaliste en combustion), soit accepter la violation de cette loi.

Signalons enfin qu'un modèle couramment utilisé à la NASA [26] est celui de Yos [72] dans lequel

$$D_s = \frac{1 - x_s}{\sum_{i, i \neq s} x_i / D_{si}}$$

où  $x_s$  une concentration et  $D_{si}$  est le coefficient de diffusion binaire:

$$D_{si} = \frac{KT}{p \Delta_{si}^{(1)}}$$

où  $\Delta_{si}^{(1)}$  est une intégrale de collision (que l'on évalue par interpolation de valeurs tabulées).

## 5 Problèmes d'efficacité pour les écoulements réactifs

Dans une approche eulérienne, la partie supersonique de l'écoulement, spatialement hyperbolique, peut se calculer par une méthode d'avancement en espace. Une telle approche réalise(raît) une réduction du coût puisqu'un seul balayage de la zone correspondante est

suffisant pour résoudre. Cependant, le développement d’une méthode de ce type est spécifique, et de plus n’est pas suffisant puisque les zones subsoniques doivent être calculées autrement. De plus l’approche n’est pas viable en écoulement visqueux dans la partie subsonique de la couche limite. Il nous semble donc préférable de développer une méthode générale par intégration en temps des équations instationnaires (Euler, Navier-Stokes ou un modèle intermédiaire) applicable dans tout le domaine. On suppose néanmoins ici que l’on ne s’intéresse qu’aux solutions stationnaires obtenues comme limites asymptotiques dans le temps.

Les méthodes les plus efficaces sont les méthodes implicites bien que, pour les problèmes de raideur modérée, une méthode explicite, généralement beaucoup plus simple à mettre en oeuvre, permette souvent plus rapidement (en “heures ingénieur”) d’obtenir la solution. Nous ne recommandons pas cette option, car le couplage d’équations de cinétique chimique peut accroître considérablement dans certains cas la raideur du problème, par la présence dans la modélisation de grandes disparités d’échelles temporelles. Il convient à ce stade de la recherche, où cette modélisation à notre connaissance n’est pas complètement arrêtée, d’envisager le développement de codes de résolution implicite plus ou moins sophistiquée. Plusieurs approches sont possibles que nous allons maintenant discuter, dans l’ordre suivant qui correspond à une simplification croissante du schéma de départ (implicite nonlinéaire), donc à une complexité algorithmique décroissante (moindre coût par itération en temps au prix d’une robustesse moindre):

- schéma implicite nonlinéaire,
- schéma implicite linéarisé,
- schéma implicite linéarisé, avec préconditionneur d’ordre inférieur,
- schéma implicite linéarisé, avec préconditionneur d’ordre inférieur, et à pas fractionnaires ou Jacobien incomplet (“couplage faible”)
- schéma explicite.

Bien évidemment, le meilleur compromis dépend du problème, et en particulier de la raideur du modèle de cinétique chimique et du cas de calcul (régime plus ou moins proche de l’équilibre chimique). L’identification de ce compromis nous semble donc être l’un des points essentiels de l’option numérique adoptée.

Avant d’examiner ces différentes approches numériques, nous allons préciser comment classiquement un problème d’écoulement réactif peut être localement ou globalement raide. Pour cela, rappelons qu’il est d’usage, pour ces écoulements, de définir (localement ou globalement) le nombre de Damkhöler qui est le rapport entre un temps caractéristique du mouvement fluide,  $\tau_{\text{TRANSIT}}$ , à un temps caractéristique de la relaxation chimique (vibrationnelle, ou autre),  $\tau_{\text{RELAXATION}}$ :

$$Da = \frac{\tau_{\text{TRANSIT}}}{\tau_{\text{RELAXATION}}}$$

Le temps caractéristique de transit peut s’exprimer comme le rapport entre une échelle

géométrique  $L$ , et une vitesse matérielle caractéristique de l'écoulement  $V$ :

$$\tau_{\text{TRANSIT}} = \frac{L}{V}.$$

Le temps caractéristique de relaxation est purement lié au modèle de cinétique chimique dans les conditions thermodynamiques de l'écoulement. Une linéarisation locale des équations de bilan d'espèces montre qu'on peut l'exprimer comme l'inverse d'une valeur propre de la matrice Jacobienne des taux de production (par unité de masse):

$$\tau_{\text{RELAXATION}} = \left( \frac{1}{\rho} |\lambda(\Omega')| \right)^{-1}$$

D'où

$$Da = \frac{L}{\rho V} \times |\lambda(\Omega')|$$

Lorsque ce nombre est faible,  $Da \ll 1$ , les particules fluide parcourent une longueur caractéristique de la géométrie à la vitesse particulaire moyenne en un temps de l'ordre de  $\tau_{\text{TRANSIT}}$  qui est bien inférieur au temps nécessaire à un changement sensible de la composition. On a alors un écoulement quasi figé, les termes de production chimique jouant un rôle faible. Dans ce cas, l'adjonction des équations de chimie est plus ou moins équivalente au rajout d'équations se comportant (et se traitant numériquement) comme l'équation globale de conservation de la masse. Dans ce cas, la simplicité algorithmique est préférable aux méthodes les plus robustes qui sont les plus coûteuses par itération.

A l'inverse, lorsque le nombre de Damkhöler est grand,  $Da \gg 1$ , la relaxation chimique s'effectue en des temps d'ordre inférieur au temps qu'il faut à une particule pour parcourir une longueur caractéristique de la géométrie. Sur une trajectoire, les particules fluides atteignent rapidement un état d'équilibre chimique. Si cette situation est vraie partout, on peut traiter le problème par couplage d'un code classique à un modèle d'équilibre chimique par modification de l'équation d'état (définie soit par lecture d'un diagramme de Mollier, soit en explicitant des formules d'approximation de la loi d'action de masse, ou de minimisation de la fonction de Gibbs). Dans ce cas, les nombreuses expériences réalisées dans le cadre des écoulements hypersoniques nous ont appris que des codes très efficaces peuvent être ainsi réalisés.

Paradoxalement, si au contraire, on traite de tels écoulements en régime proche équilibre, par une approximation d'un modèle de cinétique chimique, la formulation numérique devient raide. Pour le voir, considérer les équations de bilan d'espèces qui s'écrivent comme suit lorsqu'on néglige la diffusion:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{\partial u \rho_s}{\partial x} + \frac{\partial v \rho_s}{\partial y} = \Omega_s \quad (s = 1, 2, \dots)$$

L'adimensionnement naturel conduit à poser:

$$\tau = \frac{Vt}{L}, \quad \xi = \frac{x}{L}, \quad \eta = \frac{y}{L}$$

et

$$\tilde{u} = \frac{u}{V}, \quad \tilde{v} = \frac{v}{V}, \quad Y_s = \frac{\rho_s}{\rho}$$

ce qui donne après quelques manipulations faisant intervenir la conservation globale de la masse, l'équation suivante où apparaît la dérivée particulière du vecteur  $Y$  des fractions massiques:

$$\frac{\mathcal{D}Y}{\mathcal{D}\tau} = \frac{\partial Y}{\partial \tau} + \tilde{u} \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \tilde{v} \frac{\partial Y}{\partial \eta} = \frac{L}{\rho V} \times \Omega.$$

Pour comprendre le comportement local de cette équation, linéarisons le terme source par rapport à un état d'équilibre  $Y^0$  pour lequel  $\Omega = 0$ :

$$\frac{L}{\rho V} \times \Omega = \frac{L}{\rho V} \times \Omega'^0 (Y - Y^0) + \dots$$

Le rôle essentiel joué par le nombre de Damkhöler apparaît donc clairement de cette linéarisation. Ce paramètre agit comme un multiplicateur du terme source. Lorsque  $Da \rightarrow \infty$  (approche du régime d'“équilibre”), on obtient donc un problème de perturbation singulière. D'un point de vue plus physique, on retrouve que lorsque  $Da$  est grand, la chimie se produit de manière très brève sur une trajectoire fluide, d'où la raideur du système.

On voit aussi que l'on peut définir de nombreux nombres de Damkhöler: au moins un par valeur propre de  $\Omega'$ , chacun variant d'un point à l'autre de l'écoulement, peut-être aussi en fonction du temps. L'adaptation globale du schéma numérique à ces nombres de Damkhöler est donc certainement une difficulté majeure du calcul des écoulements réactifs. L'utilisation d'un schéma implicite approprié n'est pas toujours indispensable mais devient alors fortement conseillée. On connaît la difficulté qu'il existe à reproduire numériquement des conditions proches de l'équilibre par une approximation numérique du modèle de hors-équilibre [17].

Il faut noter que dans le cas qui nous intéresse, c'est-à-dire celui d'un mélange réactif de  $H_2$ ,  $O_2$  et d'air, plusieurs auteurs [19], [54], [44], ont utilisé différents modèles. Nous ignorons comment se comparent les caractéristiques temporelles de ces modèles de cinétique. Il serait donc fort utile de démarrer les études numériques en étalonnant leurs échelles temporelles au moyen d'un cas test très simple d'un point de vue géométrique (monodimensionnel), mais permettant de faire varier les conditions thermodynamiques dans les plages pertinentes au problème.

Nous allons maintenant passer en revue différents types de schémas possibles.

### *Schéma implicite nonlinéaire*

On suppose ici qu'on utilise une méthode des lignes. On note  $U$  le vecteur des degrés de liberté, et on écrit le système d'équations aux dérivées partielles à résoudre sous la forme compacte suivante:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \Phi(U) = 0$$

où  $\Phi(U)$  représente globalement le schéma d'approximation de la partie stationnaire, termes de production compris.

Pour l'obtention de solutions stationnaires, on peut utiliser pour la discrétisation du terme temporel, la méthode très robuste d'Euler implicite:

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + \Phi(U^{n+1}) = 0.$$

L'équation ci-dessus définit de manière récurrente l'itéré  $U^{n+1}$  connaissant l'itéré précédent  $U^n$ . Cette équation est nonlinéaire en  $U^{n+1}$ . Il faut donc à chaque pas de temps, la résoudre par une méthode itérative, par exemple par la méthode de Newton,

Poser  $V^0 = U^n$

Pour  $\nu = 0, 1, 2, \dots$  (jusqu'à satisfaction d'un critère):

Calculer  $V^{\nu+1}$  par résolution du système:

$$[I + \Delta t \Phi'(V^\nu)] (V^{\nu+1} - V^\nu) = -[V^\nu - U^n + \Delta t \Phi(V^\nu)]$$

(A convergence, faire  $U^{n+1} = V^{\nu+1}$  dernièrement calculé).

Le procédé est donc au moins doublement infini (en  $n$  et  $\nu$ ). En pratique quelques itérations en  $\nu$  ( $< 10$ ) sont généralement suffisantes.

Nous discuterons de la résolution du système linéaire dans le cas du schéma linéarisé.

Ces schémas sont complexes à réaliser. On note la nécessité d'évaluer le Jacobien  $\Phi'(U)$  de l'approximation. Cette tâche peut se révéler extrêmement complexe (pour ne pas dire impossible en toute rigueur) lorsqu'on utilise des approximations décentrées quasiment d'ordre deux comprenant des procédures (nonlinéaires) de limitation, où lorsque les conditions aux limites sont complexes; ceci est le cas lorsque ces conditions sont définies par exemple par des modélisations complexes à la paroi; dans ce cas on sait rarement calculer le véritable Jacobien de l'approximation. Néanmoins, même si l'itération de Newton (en  $\nu$ ) est alors dégradée, si la convergence est atteinte, l'itération en temps qui en résulte est très robuste.

Ce genre d'approche a été utilisé notamment en combustion, pour des problèmes présumés raides, [23], [61], [44], Nous ignorons si ces auteurs ont véritablement démontré que pour ces problèmes l'approche nonlinéaire est une nécessité absolue, ou même plus efficace. Notons aussi la nécessité d'une bonne initialisation. En particulier, le pas de temps utilisé par Smooke [61] ne semble pas beaucoup plus grand que le plus petit temps caractéristique du modèle de cinétique chimique qu'il emploie. La supériorité de cet algorithme par rapport à son analogue linéarisé n'est donc pas évidente.

Le schéma le plus utilisé dans la littérature est le suivant:

### *Schéma implicite linéarisé*

Il s'obtient naturellement à partir du précédent en linéarisant le terme  $\Phi(U^{n+1})$  autour de  $U^n$ ,

$$\Phi(U^{n+1}) = \Phi(U^n) + \Phi'(U^n)(U^{n+1} - U^n) + \dots$$

où l'on a négligé des termes du second ordre en temps, ce qui ne modifie pas l'ordre formel de l'erreur de troncature. On obtient ainsi:

$$[I + \Delta t \Phi'(U^n)] (U^{n+1} - U^n) = -[\Delta t \Phi(U^n)]$$



A chaque itération en temps, on résout un système linéaire qui est précisément celui de la première itération ( $\nu = 0$ ) de la sous-itération de Newton de l'algorithme précédent. La complexité de mise en oeuvre est donc équivalente, mais le coût par pas de temps est moindre d'un facteur égal à la valeur finale de  $\nu$ .

La résolution du système linéaire peut s'effectuer de plusieurs manières. Dans les années '70, en différences finies (maillages structurés), et pour des schémas d'approximation spatiale de type centré, certains auteurs [7] ont utilisé une factorisation du préconditionneur suivant les directions de coordonnées généralisées. Chaque facteur fait alors intervenir une matrice bloc-tridiagonale, et on résout en 2-D par 2 éliminations de Gauss (3 en 3D). Cette approche se généralise au cas d'une approximation décentrée; pour conserver la structure tridiagonale il faut alors factoriser aussi suivant les parties positives et négatives du Jacobien [63]. On a donc deux fois plus de facteurs, mais la résolution du système reste directe. Les schémas implicites factorisés sont généralement plus efficaces que les solveurs explicites, mais leur supériorité n'est pas très grande, car leur vitesse de convergence admet un minimum fini pour un certain  $\Delta t$ . Le nombre de CFL dépasse rarement la centaine en ordre de grandeur. Pour cette raison, de nombreux auteurs, et à l'origine en différences finies [12] leur ont préféré une résolution partielle par relaxation (méthodes de Jacobi, Gauss-Seidel, etc). Pour certains problèmes, aucune limitation sur le pas de temps n'est observée (stabilité inconditionnelle). (Dans le cas du schéma implicite nonlinéaire de la section précédente, cette option rend l'algorithme itératif triplement infini: par rapport à  $n$ ,  $\nu$  et disons  $\mu$  correspondant pour un  $\nu$  donné à l'indice d'itérations sur le système linéaire; seul un problème très raide peut justifier une telle approche.)

Lorsque le pas de temps  $\Delta t$  est très grand, l'itération en temps équivaut à la méthode de Newton appliquée directement au système nonlinéaire stationnaire. On a alors une convergence quadratique. Ces schémas formulés en éléments finis non-structurés et en approximation décentrée ont été analysés en grand détail dans [64], où on trouvera également de nombreuses illustrations par le calcul d'écoulements compressibles.

Bien souvent l'approximation  $\Phi(U^n)$  est de type décentrée. Supposons par exemple que  $\Phi$  définisse un schéma décentré d'ordre un. La structure matricielle du préconditionneur

$$[I + \Delta t \Phi'(U^n)]$$

est alors semblable à une matrice à diagonale dominante. (Ceci n'est littéralement vrai qu'en négligeant localement le gradient dans les coefficients du problème). Cette propriété très favorable au bon conditionnement du système permet de garantir que la relaxation converge (e.g. [64]). Dans sa thèse, Stève [64] notamment a examiné la version décentrée d'ordre deux de ce schéma dont les propriétés itératives sont très satisfaisantes dans le cas de l'air (inerte). Il convient néanmoins de remarquer, que l'implémentation de l'algorithme est complexe, car l'évaluation du Jacobien d'une approximation décentrée (avec ou sans procédure de limitation) d'ordre deux n'est pas une trivialité. Nous ne connaissons pas d'exemple de traitement d'écoulement réactif où le préconditionneur ait été construit à l'ordre deux.

Notons aussi, que même dans le cas d'un gaz inerte, le préconditionneur d'ordre deux n'est pas à diagonale dominante. Donc, si l'on gagne à rendre l'itération en temps plus

efficace (plus proche de la méthode de Newton aux grands pas de temps), on perd en facilité de résolution du système linéaire à résoudre à chaque  $\Delta t$ .

Pour ces deux raisons (plus grande simplicité et maintien d’une structure matricielle de type diagonale dominante), de nombreux auteurs préfèrent utiliser un préconditionneur décentré d’ordre un, même si la partie explicite de l’approximation (qui contrôle seule la solution stationnaire) est à l’ordre deux. Ceci conduit au schéma suivant:

*Schéma implicite linéarisé, avec préconditionneur d’ordre inférieur*

On remplace le schéma précédent par:

$$[I + \Delta t \Phi'_1(U^n)] (U^{n+1} - U^n) = -[\Delta t \Phi_2(U^n)]$$

où  $\Phi_2$  est une approximation d’ordre deux, et  $\Phi'_1$  le Jacobien de l’approximation d’ordre un.

Par suite de la légère inconsistance d’approximation entre le préconditionneur et la partie explicite (membre de droite), lorsque le pas de temps tend vers l’infini, la méthode ne s’identifie plus à l’itération de Newton. En conséquence, même dans le cas d’une équation modèle linéaire, la méthode ne converge pas en une seule itération. La convergence est au plus linéaire. D’ailleurs, l’itération est alors équivalente à la méthode de “Defect-Correction” très utilisée au CWI, Amsterdam [29].

Il faut savoir, que dans cette formulation, le schéma d’approximation  $\Phi_2$  ne doit être ni un schéma centré, ni un schéma totalement décentré, car sinon le schéma a une convergence pathologique [18]. Les schémas “demi-décentrés” (de type Fromm) ou “un-tiers décentrés” (de type schéma du troisième ordre de van Leer) sont recommandés.

En différences finies (maillages structurés), ces schémas ont été popularisé notamment par Chakravarthy [12] en gaz inerte, par MacCormack [45] pour des mélanges réactifs, et par d’autres. En éléments finis, l’INRIA a une grande expérience de ces schémas [65], [64], [20], [16], [18], [37], etc.

Dans de nombreux cas d’écoulements compressibles avec chocs forts (en hypersonique notamment) de très grands pas de temps ( $CFL \sim 10^6$ ) peuvent être utilisés à condition de régler le pas de temps de manière progressive à mesure que le résidu itératif décroît.

*Schéma implicite linéarisé, avec préconditionneur d’ordre inférieur, et à pas fractionnaires ou Jacobien incomplet (“couplage faible”)*

Dans le cas d’écoulements réactifs, on peut, notamment lorsque la modélisation est susceptible de varier, utiliser une approche à pas fractionnaires; par exemple une décomposition des équations en partie “fluide” et partie “chimie” est assez naturelle. A chaque itération en temps, on commence par un sous-pas “fluide” dans lequel la composition chimique est gelée mais non-uniforme dans le domaine. On utilise pour cela un code de type “gaz-inerte” modifié seulement pour tenir compte de la composition locale dans l’équation d’état. Ensuite on intègre dans un sous-pas “chimie” les équations de cinétique, le champ de température ayant

été réactualisé. Lorsqu'on fait cela on néglige certains termes croisés du Jacobien complet apparaissant dans le préconditionneur de la méthode implicite précédente. Insistons sur le fait que ceci ne change en rien la modélisation physique. Il s'agit simplement d'une simplification algorithmique.

La motivation pour ces schémas est simple. Tout d'abord, pour la partie fluide, on peut utiliser une structure de code existante avec des modifications mineures. D'autre part, lorsque la raideur du modèle de cinétique chimique est modérée, ce qui est le cas de la dissociation de l'air pour des problèmes d'aérodynamique hypersonique externe, on peut ainsi réaliser des économies importantes en temps de calcul. En effet, prenons pour fixer les idées, un exemple d'écoulement réactif bidimensionnel, où l'on traite 3 équations de cinétique chimique. En "couplage fort", il faut évaluer un Jacobien  $7 \times 7$ , en tenant compte de tous les termes de couplage (sinon c'est inutile), et inverser un système de cette taille. En "couplage dit faible", on évalue d'abord un Jacobien  $4 \times 4$  ayant une forme habituelle sauf que son évaluation fait ici aussi intervenir la composition locale; on inverse un système  $4 \times 4$ ; puis on calcule un Jacobien  $3 \times 3$  dont certains éléments sont proportionnels à des quantités déjà calculées dans l'approximation de l'équation de conservation de la masse au sous pas "fluide"; ce Jacobien simplifié est particulièrement simple; on résout enfin un système  $3 \times 3$  pour réactualiser la composition. On constate que dans la deuxième méthode, les Jacobiens à évaluer sont de moindre taille (moins de termes) et plus faciles à calculer, car certaines dérivées croisées ont disparu; il est d'autre part moins coûteux, de résoudre un système  $4 \times 4$  et un système  $3 \times 3$  qu'un seul système  $7 \times 7$ . En définitive, la méthode à pas fractionnaires peut être typiquement 2 à 3 fois moins coûteuse par pas de temps. En contre partie, elle peut être moins robuste, mais de grands pas de temps peuvent néanmoins être utilisés. En hypersonique, les pas fractionnaires semblent avoir fourni la méthode la plus efficace en temps calcul, alors qu'une méthode à couplage fort est la plus robuste, donc plus facilement manipulable par utilisateur non-expert ([15], [37]).

Il convient de noter qu'une des raisons du succès de la méthode à pas fractionnaire pour des écoulements hypersoniques réactifs externes, vient du fait que la difficulté numérique majeure de ces écoulements semble être la capture du choc détaché très fort, plus que la raideur du modèle de cinétique. La conclusion pourrait être inverse dans le cas de la combustion.

Enfin, un dernier avantage de la méthode à pas fractionnaires est de permettre un traitement modulaire ("par boîtes") de la modélisation. Ceci présente un avantage certain, si dans un programme d'étude, on envisage de tester une série de modèles de complexité croissante.

### *Schéma explicite*

Nous mentionnons ici pour mémoire qu'il existe des études numériques d'écoulements hypersoniques réactifs externes par des méthodes explicites (Euler explicite au premier ordre, [17], méthodes de Runge Kutta au second ordre, [68]).

A nouveau, nous pensons que de telles approches sont viables dans ce contexte étant donné la raideur modérée de la cinétique chimique. Nous ne recommandons pas a priori ces méthodes, vu que même dans ce contexte, les méthodes implicites restent largement plus

efficaces.

## 6 Conclusion et recommandations

Dans les dix dernières années, les méthodes numériques et les ordinateurs ont atteint un niveau de performance permettant la simulation d'écoulements dont la modélisation physique est complexe. On enregistre notamment une littérature importante dans le domaine des écoulements réactifs, en Combustion et en Hypersonique. Ce type d'écoulements a donné lieu à des développements numériques nouveaux.

D'une part, les techniques de génération et d'adaptation de maillage ont été revitalisées en Combustion notamment par la nécessité d'adapter la résolution des forts gradients ("flammes") "statiquement", ou de les suivre "dynamiquement" suivant qu'ils sont stationnaires ou évolutifs, l'usage d'un maillage fin partout étant exclu en considération du coût.

D'autre part, bien que certains schémas d'approximation de type centré soient très performants, on note une tendance nette vers les approximations de type décentré. Ceci est dû à plusieurs raisons. Premièrement, leur construction se fonde sur l'analyse des directions préférentielles de propagation des différentes ondes, ce qui semble particulièrement judicieux d'un point de vue physique. Deuxièmement, d'un point de vue numérique, les études en Hypersonique ont démontré que ces approximations présentent l'avantage de permettre la capture de chocs forts sans qu'il soit nécessaire de régler délicatement un terme de viscosité artificielle souvent introduit de manière très arbitraire. Les schémas décentrés classiques (constructions de Steger-Warming, van Leer, Roe, Osher) ont été développés à l'origine pour le cas d'un gaz inerte. Leur extension à divers cas de mélange gazeux a été traitée par de nombreux auteurs. En particulier, le cas d'un mélange de gaz caloriquement parfaits a abouti à une construction mathématiquement satisfaisante. Les gaz réels sont traités par des techniques "ad hoc" moins fondées mathématiquement, mais néanmoins performantes. Quelques précautions doivent être prises pour le passage à une approximation d'ordre deux. Notamment lorsqu'on utilise la méthode M.U.S.C.L. de van Leer (Monotonic Upwind Schemes for Conservation Laws), le choix des variables d'extrapolation est non trivial dans le cas d'un mélange réactif.

Pour ce qui est de la résolution en temps, on utilise en général, une intégration des équations instationnaires, même lorsqu'on ne s'intéresse qu'à un écoulement en régime permanent, car cette formulation s'applique à tout le domaine de calcul en subsonique comme en supersonique. Se pose donc le problème de l'efficacité, d'autant plus critique que la modélisation est complexe. On dispose de différents schémas d'intégration implicite en temps, qui réalisent différents compromis entre la robustesse et le coût par itération. Notons cependant que ces méthodes pour être robustes nécessitent le calcul formel d'un Jacobien "plus ou moins complet" de l'approximation. Ce Jacobien peut s'évaluer de manière rigoureuse

même à l'ordre deux dans le cas de gaz caloriquement parfaits. Par contre, pour les gaz réels, cette tâche serait beaucoup plus ardue. Une étude théorique de ce point est donc à envisager.

Nous recommandons que l'étude numérique s'effectue par étape de complexité graduelle, chaque étape pouvant contenir plusieurs volets.

Dans une première étape, il faudra évaluer la raideur réelle des modèles de cinétique chimique appropriés dans cette étude. Dans un cas géométriquement simple monodimensionnel, on pourra tester les performances des différents algorithmes implicites connus. Parallèlement à ceci, sur une géométrie réaliste de tuyère, il faudra identifier le sous-domaine (éventuellement ce sera le domaine entier), où une construction de maillage structuré est perçue comme suffisante. Néanmoins, nous insistons sur le fait que l'adaptation à des phénomènes présentant des instationnarités serait beaucoup plus simple en maillage non structuré. Nous recommandons donc cette voie, même si le maillage initial (avant auto-adaptation) est structuré. Enfin, un schéma d'approximation d'ordre deux contenant les effets d'une cinétique chimique simple devra être construit.

Dans une deuxième phase, on pourra aborder la simulation d'écoulements "plus physiques". D'une part, peut-être en introduisant un modèle plus complexe de cinétique chimique. Mais surtout, en construisant un code numérique incluant les phénomènes visqueux par résolution des équations de Navier-Stokes. Cette étape numérique présuppose l'adoption d'un modèle des termes de diffusion pour le mélange et pour les espèces.

## Remerciements

*Les auteurs souhaitent exprimer leur gratitude à Y. D'Angelo et P. Rostand pour l'aide qu'ils leur ont apportée dans la recherche bibliographique.*

## Bibliographie

- [1] R. Abgrall, "Généralisation du schéma de Roe pour le calcul d'écoulements de gaz à concentrations variables", *La Recherche Aérospatiale*, **6**, p 31-43, 1988.
- [2] R. Abgrall, J. L. Montagné, "Généralisation du schéma d'Osher pour le calcul d'écoulements de gaz à concentrations variables et de gaz réels", *La recherche aérospatiale*, **4**, p 1-13, 1989.
- [3] T. J. Baker, "Three dimensional mesh generation by triangulation of arbitrary set points", *Appl. Num. Math.*, **2**, No 1, 1986.
- [4] T. J. Baker, "Developments and trends in 3-D mesh generations", *Appl. Num. Math.*, **5**, p 275-309, 1989.
- [5] T. J. Baker, "Tetraedral mesh generation by a constrained delaunay triangulation", 13th IMACS World congress on computational and applied math., p 114-115, July 22-26, 1991, Dublin.
- [6] M. Barrère, A. Mestre, "Stabilisation de la flamme en combustion supersonique", *La recherche aérospatiale*, p 1-13, 1988
- [7] R. Beam, and R. F. Warming, "An Implicit Finite-Difference Algorithm for Hyperbolic Systems in Conservation-Law-Form", *J. of Comp. Phys. Vol. 22, Sept. 1976, pp. 87-110.*
- [8] M. Berger, J. Olinger, "Adaptive Mesh Refinement for hyperbolic partial differential equations", *J. of Comp. Phys.*, **53**, pp. 484-512, 1984.
- [9] F. G. Blottner "Finite Difference Methods of Solution of the Boundary-Layer Equations", *AIAA Journal*, vol. 18, n. 2, p. 193, 1970.
- [10] M. O. Bristeau, B. Mantel, M. G. Vallet, "Adaptive stretched finite elements for viscous incompressible and compressible flows", *Proc. of 13th IMACS Congress, Dublin, July 22-26, 1991.*
- [11] T. R. A. Bussing, E. M. Murman, "Numerical investigation of a 2-D H<sub>2</sub>-Air flameholding over ramps and reaward-facing steps", *J. Propulsion*, **3**, No 5, p448-455, 1987.
- [12] S. R. Chakravarthy, "Relaxation Methods for Unfactored Implicit Upwind Schemes", *AIAA Paper 84-0165, AIAA 2nd Aerospace Sciences Meeting, January 9-12, 1984/Reno, Nevada.*
- [13] D. Chargy, "Simulation numérique d'écoulements réactifs transsoniques", *Thèse de doctorat, Université de Nice, 1991.*

- [14] D. Chargy, R. Abgrall, L. Fezoui, B. Larrouturou., "Comparisons of several upwind schemes for multi-component one-dimensional inviscid flows." *Rapport INRIA* No 1253, 1990.
- [15] M. C. Ciccoli, L. Fezoui, J.-A. Désidéri, "Méthodes Numériques Efficaces pour les Ecoulements Hypersoniques Non Visqueux Hors Equilibre Chimique", *La Recherche Aéronautique*, à paraître.
- [16] J.-A. Désidéri, A. Dervieux, "Compressible Flow Solvers Using Unstructured Grids", *Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series 1988-05, Computational Fluid Dynamics, Mars 7-11, 1988*.
- [17] J.-A. Désidéri, N. Glinsky, E. Hettena, "Hypersonic Reactive Flow Computations", *Computers & Fluids Vol. 18, No. 2, pp. 151-182, 1990*.
- [18] J.-A. Désidéri, P. W. Hemker, "Analysis of the Convergence of Iterative Implicit and Defect-Correction Algorithms for Hyperbolic Problems", *Rapport INRIA No. 1200, Mars 1990*.
- [19] J. P. Drummond, H. S. Mukunda, AIAA paper 88-3260, July 1988.
- [20] L. Fezoui, B. Stoufflet, "A Class of Implicit Upwind Schemes for Euler Simulation with Unstructured Meshes", *J. of Comp. Phys. Vol. 84, No. 1, Sept. 1989*.
- [21] A. Golgolab, "Mailleur 3-D automatique pour les géométries complexes", *Rapport INRIA No 1004, 1989*.
- [22] P.L. George, F. Hetch, E. Saltel, "Tétraèdrisation et respect de la frontière", *Rapport INRIA No 835, 1988*.
- [23] M. Ghilani, "Simulation Numérique de Flamme Planes Stationnaires avec Chimie Complexe", *Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud, Paris XI, 1987*.
- [24] V. Giovangigli, "Mass Conservation and Singular Multicomponent Diffusion Algorithms", *Impact of Computing in Science and Engineering* **2**, 73-97, 1990.
- [25] P. A. Gnoffo, "A Finite Volume Adaptive Grid Algorithm Applied to Planetary Entry Flowfields", *AIAA J. Vol. 21, No. 9, pp. 1249-1254, 1983*.
- [26] P. A. Gnoffo, R. N. Gupta, J. L. Shinn, "Conservation Equations and Physicals Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium", *NASA TP-2687, Feb. 1989*.
- [27] Gropp, *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, **1**, p. 191, 1980.
- [28] P. Gubernatis, "Ecoulements Hypersoniques Dissipatifs: Modèles Physiques et Numériques, Application aux Ondes de choc et aux Tuyères bidimensionnelles", *Thèse, Université d'Aix-Marseille I, Juillet 1989*.



- [29] P. W. Hemker, B. Koren, "A Nonlinear Multigrid Method for the Steady Euler Equations", *Numerical Simulation of Compressible Euler Flows*, A. Dervieux, B. van Leer, J. Périaux, A. Rizzi Eds., Vieweg Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 1989.
- [30] F. Hermeline, "Triangulation automatique d'un polyèdre en dimension n", *RAIRO, Analyse numérique*, **16**, No 3, pp. 211-242, 1982.
- [31] D. G. Holmes, S. Connell., "Solution of the 2-D Navier-Stokes equations on Unstructured adaptive Grids", *AIAA paper 89-1932*, 1989.
- [32] T. Ishiguro, Y. Wada, S. Ogawa, "3-D Navier-Stokes calculation of scram inlet flow",
- [33] O. P. Jacquotte, "A mechanical model for a new generation method in CFD", *Comp. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **66**, pp. 323-338, 1988.
- [34] O. P. Jacquotte, "Méthodes de Construction de Maillages en Mécanique", *Ecole de Printemps de Mécanique des Fluides Numérique, Aussois, 1991*, S. Candel, O. Daube, R. Peyret Organisateur.
- [35] B. Larrouturou, "How to preserve mass the fraction positivity when computing compressible multi-component flows", *J. Comput. Phys.*, 1991.
- [36] N. Maman, "Méthodes de maillages adaptatifs pour les problèmes de propagation de flammes laminaires", *Thèse de l'Université de Toulouse, 1991 en préparation*.
- [37] A. Merlo, R. Abgrall, J.-A. Désidéri, "Calcul d'Écoulements Hypersoniques Réactifs de Fluide Non Visqueux en Déséquilibre Chimique et Vibratoire", *Journées sur les Écoulements Hypersoniques, Roscoff, France, Octobre 1990*.
- [38] B. N'Konga, H. Guillard, "A Roe Scheme on Non-Structured Meshes for Moving Boundary Problems", *Proc. of 13th IMACS Congress, Dublin, July 22-26, 1991*.
- [39] Ajay Kumar, D. M. Bushnell, M. Y. Hussaini., *AIAA J. Propulsion and Power*, **5**, p 514-522, 1989.
- [40] Ajay Kumar, "Numerical simulation of scramjet inlet flow fields", *Fourth Int. Symposium on CFD, Davis CA, Sept 1991 NASA TP-2517*, may 1986.
- [41] "Proc of the 3rd Int. Conf. Num. Mesh Generation", Elsevier, 1991.
- [42] Ajay Kumar, D. J. Singh, C. A. Trexler, "A Numerical study of the effects of reverse Sweep on a scramjet inlet", *AIAA Paper No 90-2218*, July 1990.
- [43] B. Larrouturou, L. Fezoui, "On the Equations of Multi-Component Perfect or Real Gas Inviscid Flow", *Nonlinear Hyperbolic Problems, Carasso, Charrier, Hanouzet et Joly Eds., Lecture Notes in Math., Springer-Verlag, Heidelberg, 1989*.

- [44] U. Maas, "Detailed Numerical Simulation of Chemically Reacting Laminar Flows", *Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics, A Collection of Technical Papers Vol. II*, pp. 741-746, September 9-12, 1991.
- [45] R. W. MacCormack, "Current Status of Numerical Solutions of the Navier-Stokes Equations", *AIAA Paper 85-0032*, 1985.
- [46] F. E. Marble, G. J. Hendricks, E. E. Zukoski, *AIAA Paper 87-1880*, June 1987.
- [47] F. E. Marble, E. E. Zukoski, J. W. Jacobs, G. J. Hendricks, I. A. Waitz, *AIAA Paper 90-1981*, July 1990.
- [48] D. Mavriplis, "Adaptive Mesh Generation for viscous Flows using Delaunay Triangulations", *J. Comp. Phys.*, **90**, 271-291, 1990.
- [49] K. Nakahashi, G. S. Deiwert, "A self-adaptive Grid Method with Application to Airfoil flow", *AIAA paper 85-1525*, July 1985.
- [50] B. Palmerio, "Recent Developments in Adaptive Finite-Element Calculations of Compressible Flows", *Conference on Automated Mesh Generation and Adaptation, Grenoble, 1-2 Octobre, 1987*.
- [51] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan, O. C Zienkiewicz, "Adaptive remeshing for compressible flow computations", *J. Comp. Phys.*, **72**, p 449,466, 1987.
- [52] J. Peraire, J. Peiro, L. Formaggia, K. Morgan, O. C Zienkiewicz, "Finite element Euler computations in 3-D", *Int. J. Num. Meth. in. Eng.*, **26**, p 2135-2159, 1988.
- [53] A. Perronnet, "A generator of tetrahedral finite elements for multi-material objects and fluids", Numerical grid generation in CFD, Miami 1988.
- [54] R. C. Rogers, W. Chinitz, "Using a global Hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculation", *AIAA Journal*, vol 21, p 586-592, 1983.
- [55] D. H. Rudy, J. L. Thomas, A. Kumar, P. A. Gnoffo., "Computation of laminar hypersonic compression corner flows", *AIAA Journal*, **29**, No 7, p 1108
- [56] T. Schönfeld, A. Rizzi., "Transonic vortex flow computations over delta wings using a unstructured grid enrichment technique", *Proc. Fourth Int. Symposium on CFD*, Davis CA, Sept 1991.
- [57] A. Saouab, "Génération de maillages adaptatifs par une méthode variationnelle", *Thèse de doctorat, Université de Rouen, 1991*.
- [58] M. V. Salvetti, "Influence de la Modélisation Physique des Termes Visqueux sur le Calcul d'Écoulements Hypersoniques", *Rapport INRIA No. 1493*, Sept. 1991.

- [59] M. V. Salvetti, M. C. Ciccoli, J.-A. Désidéri, "Non-Equilibrium Inviscid and Viscous Flows over the Double Ellipse by Adaptive Upwind Finite-Elements", *Preprints of Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part II, Antibes, France, April 15-19, 1991*.
- [60] J. Shigematsu, K. Yamamoto, K. Shiraishi, A. Tanaka, "Numerical investigation for supersonic inlet with throat cavity", *Proc. Fourth Int. Symposium on CFD, Davis CA, Sept 1991*.
- [61] M. D. Smooke, A. A. Turnbull, R. E. Mitchell, D. E. Keyes, "Solution of 2-D axisymmetric laminar diffusion flames by adaptive boundary value methods" in *Mathematical Modelling in Combustion and Related Topics* C. M. Brauner et C. Schmidt-Lainé, (Eds), Martinus Nijhoff, 1988.
- [62] J. L. Steger, "An Introduction to Grid Generation Using Partial Differential Equations", *The Third Joint Europe-US Short Course in Hypersonics, RWTH Aachen - University of Technology, October 1990*.
- [63] J. L. Steger, R. F. Warming, "Flux Vector Splitting for the Inviscid Gas Dynamic with applications to Finite-Difference Methods", *J. of Comp. Phys. Vol. 40, No. 2, pp. 263-293, 1981*.
- [64] H. Stève, "Schémas Implicites Linéarisés Décentrés pour la Résolution des Equations d'Euler en Plusieurs Dimensions", *Thèse de doctorat, Université de Provence Aix-Marseille I, Juillet 1988*.
- [65] B. Stoufflet, "Résolution Numérique des Equations d'Euler des Fluides Parfaits Compressibles par des Schémas Implicites en Eléments Finis", *Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 1984*.
- [66] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, C. W. Mastin, "Numerical grid generation, Foundations and applications", North-holland, 1985.
- [67] M. G. Vallet, "Génération de maillages anisotropes adaptés à la capture des couches limites", Rapport INRIA No 1360, 1991.
- [68] J. B. Vos, "2D Hypersonic Euler Solver Including Chemistry", *Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I, Springer-Verlag, J.-A. Désidéri, R. Glowinski and J. Périaux Eds., Proc. of a Workshop held in Antibes, France, January 22-25, 1990, to appear*.
- [69] D. F. Watson "Computing the n-dimensional Delaunay Tesselation with application to Voronoi polytopes", *Computer Journal*, **24**, No 2, p167-172, 1981.
- [70] N. P. Weatherhill, "Mixed structured-unstructured meshes for aerodynamic flow simulations", *The Aeronautical Journal*, **94**, No 934, p 111-123, 1990.

- [71] C. R. Wilke, "A Viscosity Equation for Gas Mixtures", *J. Chem. Physics*, vol. 18, p. 517, 1950.
- [72] J.M. Yos, "Transport Properties of Nitrogen, Hydrogen, Oxygen and Air to 30000 K", *Technical Memorial RAD-TM-63.7 Contract AF 33(616).7578, AVCO Corp.*, Mar. 22, 1963.