

Université de Montréal

MÉTHODES DE VOLUMES FINIS POUR LA
SIMULATION SOUS-RÉSOLUE DE
DÉTONATIONS

par

Marie-Odette St-Hilaire

Département de mathématiques et de statistique

Faculté des arts et des sciences

Thèse présentée à la Faculté des études supérieures
en vue de l'obtention du grade de
Philosophiæ Doctor (Ph.D.)
en Mathématiques

Orientation mathématiques appliquées

septembre 2007

© Marie-Odette St-Hilaire, 2007



QA

3

U54

2007

v.019

AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal

Faculté des études supérieures

Cette thèse intitulée

MÉTHODES DE VOLUMES FINIS POUR LA
SIMULATION SOUS-RÉSOLUE DE
DÉTONATIONS

présentée par

Marie-Odette St-Hilaire

a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes :

Robert Owens

(président-rapporteur)

Paul Arminjon

(directeur de recherche)

Anne Bourlioux

(membre du jury)

Rémi Abgrall

(examineur externe)

Normand Mousseau

(représentant du doyen de la FES)

Thèse acceptée le:

27 Août 2007

SOMMAIRE

La présence simultanée de deux échelles : macroscopique pour l'écoulement du gaz et microscopique pour la réaction chimique, rend la simulation de la détonation très délicate. Un calcul effectué avec une discrétisation proportionnelle à la largeur de la zone de réaction (échelle microscopique) et évoluant avec un pas de temps du même ordre de grandeur que la durée de la réaction capte efficacement l'onde et les détails de sa structure, mais est cependant trop coûteux en temps de calcul. Une approche sous-résolue, c'est-à-dire pour laquelle les dimensions du maillage temps-espace sont dictées par la convection du fluide (échelle macroscopique), est économique, mais conduit toutefois, dans les cas raides, à des solutions non-physiques.

Dans cette thèse, nous proposons une famille de méthodes sous-résolues, basées sur la minimisation de la viscosité numérique, stables, précises d'ordre deux, évitant la résolution du problème de Riemann et bien sûr, convergentes vers la solution physique. Avec un raffinement du maillage, elles captent efficacement le caractère instable de la détonation et fournissent la structure exacte du front de l'onde. Un des avantages principaux de l'approche proposée est qu'elle permet de résoudre d'autres systèmes hyperboliques avec ou sans terme de source, incluant les problèmes de type relaxation.

De plus, cette thèse présente une méthode multi-échelle permettant d'obtenir des prédictions à très grande échelle sur le comportement d'une détonation, tout en ayant accès à l'information provenant de l'échelle microscopique, telle que les effets des instabilités de l'onde sur les variables physiques autour du front.

Mots clés : Détonation, systèmes hyperboliques, terme de source, relaxation, séparation d'opérateurs, sous-résolu, volumes finis, méthodes de type central, explicite, implicite, viscosité numérique, instabilité, compression artificielle, modification des moyennes, multiéchelle.

SUMMARY

The simultaneous presence of two scales : macroscopic for the gas flow and microscopic for the chemical reaction, makes numerical approximation of detonation waves very delicate. A resolved simulation, where the small chemical time scale is fully resolved, effectively captures the wave in details. However, it is far too expensive in computing time, especially for multi-dimensional problems. While being economic, an underresolved approach, where the discretisation is proportional to the macroscopic scale, is unfortunately inefficient for the capture of stiff detonation waves because it leads to unphysical solutions.

We propose a family of accurate time-splitting methods, numerically stable, allowing underresolved calculations and requiring neither the resolution of the Riemann problem nor the knowledge of the characteristic structure of the flux jacobian matrix and of course, converging to the physical solution. With a refinement of the grid, these methods moreover effectively capture the unstable character of the detonation and provide the exact front structure of the wave. It is realistic to claim that such methods can moreover solve about any hyperbolic system with source term. We thus elaborate "black box"-type methods, while the majority of the schemes existing for the detonation problem use properties of the solution.

Moreover, this thesis presents a multi-scale method producing very large scale predictions on the behavior of a detonation, while giving access to information coming from the microscopic scale, such as effects of the wave instabilities on the physical variables near the front.

Key words : Detonation, hyperbolic systems, source term, relaxation, operator splitting, underresolved, finite volumes, central schemes, explicit, implicit, numerical viscosity, instability, artificial compression, modified cell averages, multi-scale.

TABLE DES MATIÈRES

Sommaire	iii
Summary	v
Liste des figures	xiii
Liste des tableaux	xix
Remerciements	xx
Introduction	1
Motivations	1
Objectifs	3
Simulation de détonations à grande échelle	3
Hypothèse de la viscosité numérique	4
Systèmes hyperboliques avec terme de source	4
Limites de l'approche boîte noire	5
Nature instable de la détonation	5
Contenu de la thèse	6
Chapitre 1. Modélisation	8
1.1. Équations d'Euler Réactives	8
1.2. Théorie de Chapman-Jouguet	11
1.3. Théorie ZND	19
1.3.1. Détonation : Déflagration Initiée par un Choc	19

1.3.2. Solution de Type Ondulatoire.....	21
Chapitre 2. Étude des Solutions Non-Physiques.....	28
2.1. Problématique des Solutions Non-Physiques.....	29
2.2. Analyse de la solution non-physique.....	31
2.3. Modèle simplifié pour Navier-Stokes réactives	33
2.4. Équations de Navier-Stokes réactives.....	40
2.5. Équations d'Euler réactives	40
2.5.1. Solution non-physique.....	42
2.5.2. Solution physique : Bonne vitesse de propagation.....	46
2.6. Lien entre les détonations faibles physiques et non-physiques	48
2.6.1. Limite de la viscosité dissipante.....	50
Chapitre 3. Revue Bibliographique : Les Approches Sous-résolues	51
3.1. Raffinement du maillage	51
3.2. Déductions du modèle visqueux.....	52
3.3. Techniques de limitation	52
3.4. Viscosité numérique.....	53
3.4.1. Notre approche	54
3.4.1.1. Bonne capture des discontinuités.....	54
3.4.1.2. Évitement des Solveurs de Riemann.....	54
3.4.1.3. Ouverture à d'autres cas test.....	54
Chapitre 4. Approximation numérique de systèmes de lois de conservation avec terme de source raide.....	55
4.1. Méthodes de volumes finis pour systèmes de lois de conservations homogènes.....	55

4.1.1.	Systèmes de lois de conservations	56
4.1.2.	Volumes finis : approche classique	56
4.1.2.1.	Stabilité	59
4.1.2.2.	Conservation et Compatibilité	60
4.1.2.3.	Ordre supérieur	61
4.1.2.4.	Solution entropique	63
4.1.3.	Volumes finis : type central	64
4.2.	Traitement de la source	68
4.2.1.	Méthode directe	69
4.2.1.1.	Méthodes de volumes finis directes de type central pour systèmes hyperboliques avec terme de source	70
4.2.2.	Séparation d'opérateurs (Méthode des pas fractionnaires)	72
4.2.2.1.	Séparation d'opérateurs pour les méthodes PC	75
4.2.3.	Séparation d'opérateurs dans les cas raides	76
4.2.3.1.	Le cas des systèmes de relaxation	77
4.2.4.	Séparation d'opérateurs pour la détonation	81
4.2.4.1.	Comparaison des approches directes et à pas fractionnaires pour la détonation	82
Chapitre 5.	Approximation numérique de systèmes de lois de conservation en 2 dimensions avec terme de source raide	86
5.1.	Extension du schéma PC en 2 dimensions	86
5.2.	Résultats numériques pour la détonation	91
5.2.1.	Équations d'Euler avec gravitation	91
5.2.2.	Onde de détonation évoluant dans un tube	93
Chapitre 6.	Introduction à la Compression Artificielle	95
6.1.	Largeur de capture d'une discontinuité	95

6.2.	Flux de compression artificielle.....	97
6.3.	Mise en oeuvre de l'ACM.....	100
6.4.	Choix du flux de compression.....	101
6.5.	Détection des discontinuités.....	102
Chapitre 7. Capture sous-résolue de la détonation sans viscosité		
	numérique.....	105
7.1.	Viscosité numérique minimale.....	106
7.2.	Encapsulation.....	107
7.3.	Résultats en 1D.....	108
7.3.1.	Chimie d'Arrhenius.....	109
7.3.2.	Chimie d'ignition.....	111
7.3.3.	Collision d'ondes.....	114
7.3.4.	Interaction avec un profil oscillatoire.....	116
7.4.	Résultats en 2D.....	119
Chapitre 8. Limites de la Capture en Un Point.....		
		120
8.1.	Existence d'une discrétisation limite.....	121
8.2.	Influence de la moyenne.....	123
8.3.	Méthode de la Modification des Moyennes.....	128
8.4.	Résultats en 1D.....	135
8.5.	Résultats en 2D.....	138
Chapitre 9. Caractère Instable des Détonations Fortes.....		
		141
9.1.	Existence des instabilités en une dimension.....	141
9.2.	Analyse numérique des instabilités.....	143

9.2.1.	Discrétisation	143
9.2.2.	Conditions aux bords	144
9.2.3.	Conditions initiales	146
Chapitre 10.	Méthode Multiéchelle	147
10.1.	Motivations de l'Élaboration d'une nouvelle Méthode Multiéchelle	149
10.2.	Concept	150
10.2.1.	Évolution	150
10.2.2.	Reconstruction	152
10.2.2.1.	Domaine Macroscopique de Raffinement	152
10.2.2.2.	Projection des Variables Eulériennes	153
10.2.3.	Estimation des flux	155
10.2.3.1.	Critères d'Arrêt	158
10.2.3.2.	Suivi du Front	160
10.2.4.	Algorithme	161
10.3.	Résultats numériques	161
10.3.1.	Détonation stable	162
10.3.2.	Détonation instable	165
10.3.3.	Transition entre stable et instable	168
10.3.3.1.	Détermination du degré de poussée	169
10.3.3.2.	Simulation multiéchelle	171
Conclusion		175
	Détails mathématiques de la solution non-physique	176
	Choix du splitting pour les problèmes de relaxation	176
	Développement en 2 dimensions spatiales de PC	177
	Application de la compression artificielle au problème de la détonation raide	177

Limites de l'hypothèse de la viscosité numérique	178
Méthode de la modification des moyennes	178
Méthode multiéchelle homogène.....	179
Perspectives	180
Index	182
Bibliographie	185

LISTE DES FIGURES

0.1	Éruption solaire. L'onde de choc est l'anneau gris encerclant la zone blanche. Photo National Solar Observatory/AURA/NSF and USAF Research Laboratory	3
0.2	Solution non-physique en rouge versus la solution physique en bleu, pour la simulation sous-résolue d'une détonation forte.	4
0.3	Une hiérarchie des systèmes hyperboliques.....	5
1.1	Courbe de Crussard \mathcal{C}	15
1.2	Courbe de Crussard \mathcal{C} et droites de Rayleigh \mathcal{R}	17
1.3	Variation de la pente de la droite de Rayleigh. Les indices W réfèrent à la détonation faible et S à la forte.	18
1.4	Choc Suivi d'une Déflagration	21
1.5	Courbes de Hugoniot associées à diverses valeurs de Z	23
1.6	La détonation est équivalente un choc non-réactif suivi d'une déflagration. 26	
1.7	Profils ZND typiques	27
2.1	Solution non-physique typique obtenue avec une méthode sous-résolue non adaptée.....	30
2.2	Impact de la diffusion sur la capture de la détonation raide.....	32
2.3	Courbes de Crussard et Rayleigh pour le modèle simplifié.....	36
2.4	Profils de u	37
2.5	Profil de u pour une détonation faible : cas B) et C)	38

2.6	Représentation qualitative possible du domaine d'existence de $q_{cr}(K_0)$ pour q_0 fixé : région entre Π et π . Si $K_0 \in$ Zone 1 on a une détonation forte et si $K_0 \in$ Zone 2, une détonation faible. La courbe Π est ici approximée par une droite, dans le but d'alléger l'illustration.	39
2.7	Profil de pression non-physique en noir et physique en bleu.	44
2.8	Structure de la solution faible non-physique : une détonation faible suivie d'un choc.	45
2.9	La solution non-physique obtenue avec une méthode sous-résolue se décompose en une détonation faible suivie d'un choc non-réactif. L'état A' est relié à A'' par une raréfaction.	46
2.10	Profils de la pression et de la température évoluant à la vitesse physique, pour une simulation sous-résolue : $\Delta x \in \mathcal{P}$	47
2.11	Augmentation de la vitesse de l'onde de combustion de s à s^*	48
4.1	Problèmes de Riemann aux interfaces de la cellule C_i (en une dimension). 57	
4.2	Maillage décalé typique des méthodes de type central	64
4.3	$\varepsilon = 1.e - 8$, $t = 0.5$, $\alpha = 1/3$ (valeur optimale dans les cas raides [61]), $CFL = 1/3$ et $\Delta x = 0.01$	81
4.4	Zoom sur $\rho(x, t)$	81
4.5	Proportions spatiales pour les simulations résolues et sous-résolues. ...	83
4.6	Solutions obtenues pour le meilleur solveur (split, solveur exact) et le pire (unsplit non-linéaire), pour la valeur limite $\tau_{min} = 0.09$. On observe la naissance du profil non-physique pour le schéma unsplit non-linéaire.	85
5.1	Divisions du domaine d'espace centré en $(x_{i+1/2}, y_{j+1/2})$	87
5.2	Densité à $t = 0.5$, pour $\Delta x = 0.05$	92

5.3	Contours de pression, pour $\Delta x = \Delta y = 1$	94
6.1	Profils possibles pour le flux de compression.	97
7.1	Projection de la position $x_{G,D}$ de la discontinuité, pour une capture en un point. Pour représenter la position $x_{G,D}$ de la discontinuité entre l'état u_G et u_D , une seule cellule est suffisante, i.e. l'information sur la position d'une discontinuité peut être contenu dans une cellule, mais pas moins.	107
7.2	Encapsulation de l'approche volumes finis de type central avec le duo ACM et DDD	108
7.3	Exemple 7.3.1, avec PC et ACM, $\Delta x = 2100 = 2.1 \times 10^3 L_{1/2}$, CFL= 0.4, $t = 38135.99$ (500 pas de temps).	110
7.4	Exemple 7.3.1, $\Delta x = 2100 = 2.1 \times 10^3 L_{1/2}$, $t = 38135.99$ (500 pas de temps). En rouge, sans ACM ni DDD.	111
7.5	Performance des deux approches en fonction de la température d'ignition. Les coupures de $\Delta x/L_{1/2}$ indiquent qu'à partir de cette température d'ignition, le schéma fournit toujours la solution physique ($\tau_{\min} \text{ t.q. } L_{1/2} \simeq 0$).	114
7.6	Exemple 7.3.3, $\tau = 1/66$, à $t = 2$, avant la collision entre la détonation et la rarefaction. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.037821 L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = 0.25 = 18.91038 L_{1/2}$, 210 pas de temps. On observe majoritairement que la solution avec ACM et DDD (bleu), car elle approxime parfaitement la solution "exacte".	116
7.7	Exemple 7.3.3, $\tau = 1/66$, à $t = 8$, après la collision de la détonation et de la rarefaction. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.037821 L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = 0.25 = 18.91038 L_{1/2}$, 210 pas de temps. On observe	

	majoritairement que la solution avec ACM et DDD (bleu). car elle approxime parfaitement la solution "exacte".....	116
7.8	Détonation se propageant dans un gaz à densité non-constante, exemple 7.3.4, à $t = \pi/20$, $\tau = 0.001$, 388 pas de temps. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.36367L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = \pi/400 = 9.09174L_{1/2}$	118
7.9	Zoom. Détonation se propageant dans un gaz à densité non-constante, exemple 7.3.4, à $t = \pi/20$, $\tau = 0.001$, 388 pas de temps. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.36367L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = \pi/400 = 9.09174L_{1/2}$	118
7.10	Détonation se propageant dans un gaz à densité non-constante, exemple 7.3.4, à $t = \pi/5$. $\Delta x = \pi/400 = 9.09174L_{1/2}$, $\tau = 0.001$, 826 pas de temps. En noir, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.36367L_{1/2}$	118
8.1	Influence de ε sur la discrétisation limite.	124
8.2	Position des limites pour l'exemple 7.3.2, agrandissement de 8.1. Les limites ACM et sans ACM sont les valeurs de $\Delta t/\tau$ pour lesquelles les schémas PC avec et sans ACM cessent de fournir la solution physique.	125
8.3	Température moyenne supérieure à la température d'ignition.	128
8.4	Les quantités de gaz brûlant lors de la réaction chimique (après le pas d'advection) sont illustrées en mauve. La correction apportée par la modification des moyennes est en bleu.....	132
8.5	Encapsulation de l'approche volumes finis de type central avec ACM, DDD et MdM	135
8.6	Exemple 8.4.1, avec PC, ACM et MdM, $\Delta x = 1 \times 10^{10} = 1 \times 10^{10}L_{1/2}$, CFL= 0.4, $t = 1.815600 \times 10^{11}$ (500 pas de temps).	136
8.7	Exemple 8.4.1, avec PC et MdM, $\Delta x = 2100 = 2100L_{1/2}$, CFL= 0.4, $t = 38024.1615$ (500 pas de temps).	136

8.8	Domaines de convergence pour le cas 8.4.2 avec CFL de 0.4.	138
8.9	Exemple 8.4.1. avec PC et MdM, $\Delta x = 0.25 = 3.4902e + 020L_{1/2}$. CFL= 0.4, $t = 8$ (826 pas de temps).	138
9.1	Historique de la pression maximale pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.725$ et $\Delta x = 0.05L_{1/2}$	144
9.2	Historique de la pression maximale pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.725$ et $\Delta x = 0.04L_{1/2}$ et $\Delta x = 0.025L_{1/2}$	144
9.3	Profil des quantités physiques pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.6$, $\Delta x =$ $0.05L_{1/2}$, $t = 5$. Les traces des instabilités sont reconnaissables par les légères fluctuations du gaz brûlé.	145
9.4	Historique de la pression maximale pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.725$ et $\Delta x = 0.04L_{1/2}$ et des conditions initiales discontinues.	146
10.1	Estimé de la mémoire vive nécessaire (bytes) pour traiter un problème contenant des longueurs allant de L_{min} à L_{max} , avec $M = 1$ minimal.	148
10.2	Reconstruction plateaux $u = RU$ sur une fenêtre F_j	154
10.3	Reconstruction à l'aide du dernier pas de temps microscopique sur une fenêtre \mathcal{F}_j , avec lissage des oscillations.	155
10.4	Historique des maxima de pression pour un cas stable.	159
10.5	Historique des maxima de pression pour un cas stable : zoom	159
10.6	Maillage multiéchelle.	162
10.7	Profils macroscopiques à $t = 812$, $f = 1.76$. Solution exacte en rouge continu et solution approximée en bleu discontinu.	163
10.8	Historique des maxima pour le cas stable, $f = 1.76$	164
10.9	Historique de la pression maximale pour le cas stable : zoom	165
10.10	Profils macroscopiques à $t = 857$, $f = 1.60$. Solution exacte en rouge continu et solution approximée en bleu discontinu.	166

10.11	Historique des maxima pour le cas instable, $f = 1.6$.	167
10.12	Historique des maxima de pression pour le cas instable : zoom	167
10.13	Flux pour X_j au 5 ^e pas de temps macroscopique, $f = 1.60$, $N = 90001$: zoom	168
10.14	Variation de ρ_0 en fonction de Δx et δx .	169
10.15	Variation de f associé à $\rho_0 = 1$, pour une densité avec gradient devant la détonation.	170
10.16	Variation de $S_{\frac{Z}{2}}^n$ pour $f = 1.6$, avec $L_{1/2} = 20\Delta x$.	171
10.17	Historique de la pression maximale le cas transitoire, $f = 1.731$, en continu avec $\Delta x = 1/30$ et densité du gaz non-brûlé devant le front.	172
10.18	Profil de la solution à grande échelle, pour le cas transitoire $f =$ 1.731 . Solution exacte en rouge continu et solution approximée en bleu discontinu.	173
10.19	Historique des maxima pour le cas transitoire, $f = 1.731$.	173
10.20	Historique continu du maximum de la pression pour le cas transitoire, $f = 1.631$.	174

LISTE DES TABLEAUX

2.1	Type de solution obtenue lors d'une simulation numérique typique avec discrétisation γ	42
2.2	Tableau récapitulatif des solutions analytiques et numériques pour les modèles visqueux et non-visqueux, respectivement.	43
4.1	Erreurs causées exclusivement par la séparation d'opérateurs.	74
4.2	Performance des méthodes PC, pour différents traitements de la source : Valeurs limites pour lesquelles le schéma fournit encore la solution physique (i.e. pour $\tau_{min} - \varepsilon, \forall \varepsilon > 0$, le schéma converge vers la solution non-physique).....	84
5.1	Performance de la méthode PC2 : les ordres de convergence obtenus vérifient la théorie.....	92
7.1	Performance des méthodes PC, pour différentes températures d'ignition, avec $\Delta x = 0.25$, pour l'exemple 7.3.2.	113
8.1	Performance des méthodes PC, avec combinaisons de ACM et MdM, pour $T_{ign} = 1.01$	137
8.2	Performance des méthodes PC2, avec MdM, pour le tube 2D 8.5.1. ..	139

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche Paul Arminjon de m'avoir offert ce sujet de recherche passionnant et d'avoir eu confiance en mes capacités. J'aimerais aussi remercier Anne Bourlioux de m'avoir proposé le projet multiéchelle et de m'avoir consacré de son temps. De façon générale, je tiens à souligner ici à quel point le DMS est un endroit agréable et stimulant pour faire des études graduées, et ce grâce à la compétence et au dynamisme des professeurs et du personnel non-enseignant.

Merci à l'ISM, Paul Arminjon et à la FES pour le soutien financier.

Mes études graduées au DMS n'auraient pas été aussi passionnantes sans la présence de mes collègues et amis : Rony Touma, Anik Soulière, Pascal Turbis, Alexandre Girouard, Nicolas Beauchemin et tout spécialement Jean-François Renaud, mon complice de longue date.

J'aimerais remercier Olivier Rouch, avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer pour mes travaux de recherche, pour son implication et son optimisme sans faille.

Bien que le statut d'étudiante soit une situation privilégiée, à mes yeux, celle de chercheure rémunérée l'est encore plus. À ce chapitre, je tiens à remercier mon employeur Lockheed Martin Canada, et particulièrement mes patrons Elisa Shabazian et Eric Lefebvre du département de Recherche et Développement de m'avoir choisie comme employée et collègue.

Les études graduées étant ce qu'elles sont, je ne voudrais pas passer sous silence l'immense apport du soutien moral de ma famille et de mes amies. Merci à ma famille, Odette, Gilles, Simon et Hervé, ainsi qu'à ma belle famille, Denise, Bertrand et Mélanie, pour avoir montré de l'intérêt pour mon travail et m'avoir encouragée. Merci à Anne, Caroline, Karina, Mélanie, Marie-Claude, Sarah et Stéphanie pour leur amitié.

Merci à Marc d'avoir cru en moi sans relâche et de m'avoir soutenu financièrement et moralement, avec tant d'amour.

Theory needn't be right to be good...

Theory needn't be mathematical to be right...

Theory needn't be incomprehensible to be mathematical...

F.A. Williams

INTRODUCTION

La détonation est un processus de combustion où des réactions chimiques se produisent à vitesse très élevée, soit plusieurs milliers de mètres par seconde. On différencie la détonation des autres types de combustions par la grande quantité d'énergie dégagée par de fortes ondes de compression. La présence simultanée d'au moins deux échelles de temps, une rapide pour la combustion du gaz et une lente pour l'écoulement, rend la simulation numérique de ce phénomène très délicate.

La détonation, telle qu'étudiée dans cette thèse, est modélisée par les équations d'Euler réactives, un système d'équations hyperbolique avec un terme de source. L'objectif principal de cette thèse est de développer une méthode numérique pour simuler efficacement la détonation, sans résoudre en détails les réactions chimiques.

MOTIVATIONS

La problématique des solutions non-physiques pour les détonations raides n'est pas un problème marginal (voir la revue bibliographique au chapitre 3). Pouvoir simuler des détonations avec un maillage grossier est une propriété hautement appréciable pour un schéma numérique. En effet, une *simulation résolue*, où les dimensions du maillage sont définies par les plus petites échelles contenues dans le problème (réactions chimiques), permet une capture efficace et détaillée de l'onde de combustion, mais peut devenir extrêmement coûteuse en temps de calcul, particulièrement en plusieurs dimensions spatiales. Par contre, une *simulation sous-résolue*, où cette fois la discrétisation est dictée par l'échelle associée à l'écoulement du gaz, tout en ignorant les échelles microscopiques implicites, permet de

faire des économies. mais produit malheureusement. dans les cas raides, des solutions non-physiques.

D'un point de vue pratique, il est important de pouvoir obtenir des simulations de détonations fiables. Voici, en vrac, quelques applications nécessitant une bonne capture de la détonation où l'écart entre les échelles intrinsèques du problème requiert une approche sous-résolue.

Les premières applications qui viennent à l'esprit, sont celles reliées à l'étude des effets des explosions : modélisation d'explosions sur terre, sous-marines ou urbaines, évaluation des risques industriels et étude de la résistance des matériaux aux explosions.

Bien sur, il est maintenant impossible de passer à côté des applications reliées à la lutte contre le terrorisme : résistance des grandes structures, reconstitutions à des fins d'enquêtes en balistique et simulations de catastrophes de toutes sortes.

Un bon solveur pour les détonations raides peut aussi s'avérer utile pour la recherche en astrophysique. Les explosions de supernovae de type Ia ont un impact considérable dans le développement de l'univers. Leur étude par simulations numériques est présentement un sujet d'intérêt en astrophysique (consulter [58] pour avoir un aperçu). Une autre application intéressante pour l'astrophysique concerne les éruptions solaires. Sur la surface du soleil, les particules de gaz ionisées (dues à la grande chaleur ambiante), sont soumises à des champs magnétiques extrêmement puissants. Il en résulte une très grande quantité d'énergie concentrée en peu d'espace, qui est relâchée lors d'un processus appelé éruption solaire. L'éruption solaire peut être modélisée par une détonation [42], car elle produit une onde de choc circulaire parcourant une partie de la surface du soleil, suivie par une vive combustion des gaz. L'énergie totale libérée lors d'une grosse éruption solaire est de 10^{25} Joules, soit 10% de l'énergie totale émise par le soleil à chaque seconde (voir la figure 0.1).

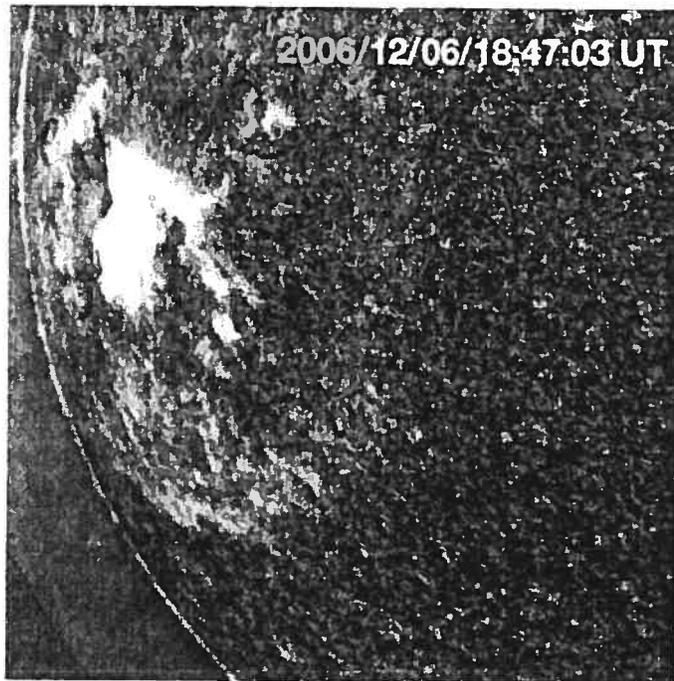


FIG. 0.1. Éruption solaire. L'onde de choc est l'anneau gris encerclant la zone blanche. Photo National Solar Observatory/AURA/NSF and USAF Research Laboratory

OBJECTIFS

Cette thèse se veut avant tout un ouvrage portant sur les méthodes de volumes finis pour systèmes de lois de conservation hyperboliques avec terme de source, en particulier pour le cas de la détonation. Elle s'adresse à un lecteur ayant de bonnes bases en analyse numérique et en mécanique des fluides compressibles.

Simulation de détonations à grande échelle

Un calcul effectué avec une discrétisation proportionnelle à la largeur de la zone de réaction chimique (échelle microscopique) et évoluant avec un pas de temps du même ordre de grandeur que la durée de la réaction modélise efficacement l'onde et les détails de sa structure. Cependant, une telle approche est trop dispendieuse en temps de calcul et en mémoire vive. Une approche sous-résolue, c'est-à-dire pour laquelle les dimensions du maillage temps-espace sont dictées par la convection du fluide (échelle macroscopique), est économique, mais conduit toutefois,

dans les cas raides, à des solutions non-physiques. La convergence vers la solution non-physique, voir la figure 0.2, est le symptôme d'un traitement numérique non-adéquat. En effet, la solution observée se déplace à une vitesse dictée par les dimensions du maillage, soit un pas d'espace (ou une moitié, dans le cas d'un maillage décalé) par pas de temps. La convergence vers la solution non-physique pour un maillage sous-résolu est observable pour toute méthode de volumes finis, non préalablement modifiée pour ce cas particulier.

L'objectif premier de cette thèse est donc d'élaborer une approche numérique pour simuler adéquatement la détonation à grande échelle, c'est-à-dire de façon sous-résolue.

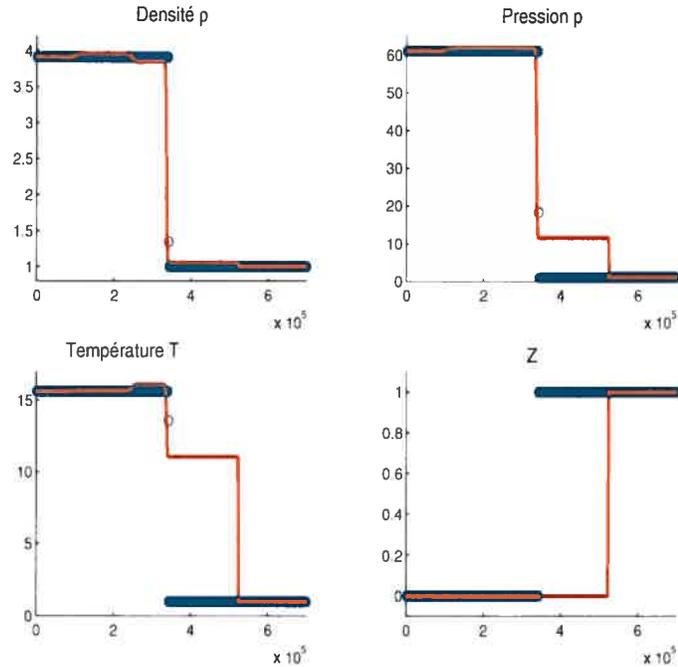


FIG. 0.2. Solution non-physique en rouge versus la solution physique en bleu, pour la simulation sous-résolue d'une détonation forte.

Hypothèse de la viscosité numérique

La raison la plus intuitive et la plus largement acceptée pour expliquer le comportement erroné des schémas de volumes finis, lors du traitement sous-résolu

des détonations, est la présence de viscosité numérique. La viscosité numérique intrinsèque aux schémas est responsable de l'étalement d'une discontinuité sur plusieurs cellules. Ceci a pour effet d'augmenter artificiellement la température du gaz devant le front d'onde (dans les cellules d'étalement du choc), provoquant la combustion prématurée du gaz.

Un des objectifs de la thèse est de vérifier théoriquement et numériquement cette hypothèse de la viscosité numérique.

Systèmes hyperboliques avec terme de source

Les équations d'Euler réactives forment un système de lois de conservation hyperbolique additionné d'un terme de source, pouvant être raide ou non, modélisant la perte de chaleur. La figure 0.3 illustre où est situé ce problème par rapport à la famille des systèmes hyperboliques. La plupart des méthodes construites pour simuler des détonations à grande échelle ne sont pas aisément récupérables pour traiter d'autres types de problèmes hyperboliques, avec ou sans terme de source. En effet, la plupart exploitent la structure de la solution du problème de Riemann propre à la détonation.

Pour notre part, nous visons une approche facilement exportable, bien encapsulée pour permettre, à peu de frais, de l'adapter à l'ensemble des systèmes de la figure 0.3.

Limites de l'approche boîte noire

L'idée de construire un solveur "universel" efficace avec maillage grossier, pour les systèmes hyperboliques avec ou sans terme de source, y compris la détonation, est bien séduisante, mais comporte des limites. Dans bien des cas, on doit introduire de l'information provenant du modèle.

Nous allons explorer les limites de l'approche boîte noire dans le cas de la détonation, c'est-à-dire tenter de déterminer à quel point et à quel prix il est possible de faire abstraction de la physique de la détonation.

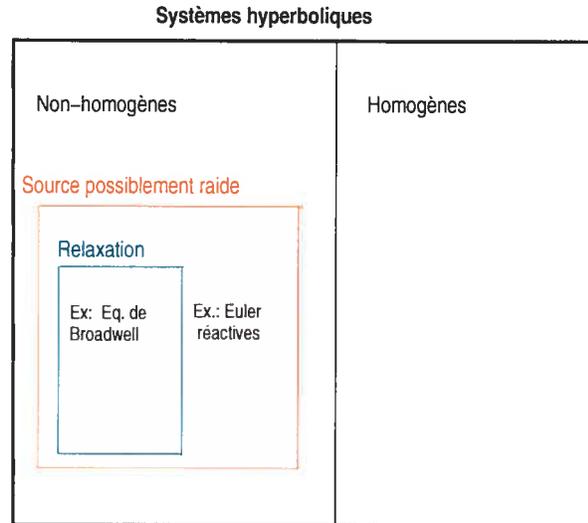


FIG. 0.3. Une hiérarchie des systèmes hyperboliques.

Nature instable de la détonation

Il est maintenant impossible de nier l'existence d'instabilités au front d'une détonation. De plus, Fickett et Wood [34] démontrèrent que les instabilités sont présentes lors de la simulation numérique du modèle des équations d'Euler réactives. Avec une discrétisation assez fine et adéquate, il est possible de détecter les oscillations du front de l'onde de combustion.

L'objectif final de cette thèse est d'obtenir de l'information sur la dynamique présente à petite échelle, de façon à enrichir nos simulations à grande échelle. À cet effet, nous avons élaboré une approche multiéchelle homogène permettant de coupler de façon efficace l'information provenant des deux échelles principales.

CONTENU DE LA THÈSE

Le premier chapitre est consacré à la modélisation et à la théorie mathématique décrivant le processus de la détonation. La théorie de Chapman-Jouguet décrit l'état du gaz après le passage de la détonation, tandis que la théorie ZND détaille l'onde séparant le gaz avant et après la combustion.

Le deuxième chapitre est consacré à la solution non-physique obtenue lors de la simulation sous-résolue. Son existence, sa nature non-physique et les conditions pour lesquelles elle est observée sont décrites. Ce chapitre motive l'hypothèse que la viscosité numérique est responsable de la bifurcation des schémas de volumes finis vers la solution non-physique pour des maillages grossiers.

Le chapitre trois se veut une revue de littérature portant sur la simulation sous-résolue des détonations. Cette étape permet de définir les contraintes et les objectifs précis pour le développement de notre approche numérique.

Les chapitres quatre, cinq et six constituent le coeur de la thèse. Ils décrivent en détails comment chacun des objectifs énoncés au troisième chapitre est atteint. Tous les outils utilisés pour résoudre la détonation sont décrits et testés séparément ici. Le chapitre quatre est consacré aux méthodes de volumes finis et au traitement de la source. Le cinquième chapitre décrit le passage à la deuxième dimension spatiale et le sixième traite de la compression artificielle.

Au chapitre sept, nous testons notre première approche avec compression artificielle et détecteur de discontinuité pour divers problèmes faisant intervenir des détonations.

L'hypothèse de la viscosité numérique est étudiée à fond au chapitre huit. En explorant et en comprenant ses limites, on élabore une façon d'améliorer la performance de notre approche : la modification des moyennes.

Les deux derniers chapitres sont consacrés à la nature instable des détonations. Le chapitre neuf traite des conditions nécessaires pour l'obtention de la dynamique adéquate lors des simulations. Ce chapitre met en place les outils nécessaires pour la réussite de l'expérience multiéchelle du dernier chapitre.

Au dernier chapitre, on motive dans un premier temps l'élaboration de l'approche multiéchelle. Le reste du chapitre est consacré à la description et à la validation de la méthode.

Chapitre 1

MODÉLISATION

Le phénomène de la détonation est la propagation à vitesse supersonique de réactions chimiques exothermiques dans une substance explosive [79]. La détonation n'est obtenue que si le gaz explosif est soumis à un choc causant un différentiel de pression supérieur à un seuil critique. Les réactions chimiques présentes dans le processus de détonation se décomposent en 30 à 1000 réactions élémentaires impliquant de 10 à 100 espèces chimiques [7]. Les équations modélisant la totalité de ces réactions sont bien sûr très complexes. Pour réduire la complexité, nous considérerons un gaz possédant deux états possibles, l'état brûlé et non-brûlé, où une seule réaction exothermique et irréversible peut subvenir. Cette simplification est physiquement acceptable à la condition d'accepter que les effets de diffusion moléculaire, de la conduction thermique et de la viscosité soient négligés.

1.1. ÉQUATIONS D'EULER RÉACTIVES

Le système d'équations d'Euler réactives est la façon la plus commune de modéliser le processus de la détonation à grande échelle.

L'état thermodynamique final du gaz réactant, connecté à un état initial non-brûlé donné, est caractérisé par la théorie de Chapman-Jouguet (voir, entre autres, les livres de Fickett et Davis [33] et de Godlewski et Raviart [37]), tandis que la théorie de Zel'dovich, von Neumann et Döring (ZND) (voir Courant et Friedrichs [22] et [33]) décrit la structure de l'onde séparant ces deux états.

Les équations d'Euler réactives, comme l'indique le nom, sont constituées des équations d'Euler de la dynamique des gaz compressibles, additionnées d'une équations modélisant une réaction chimique exothermique irréversible :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial((E + p)u)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Z u)}{\partial x} &= -\rho Z K(\rho, p) \end{aligned} \quad (1.1.1)$$

Nous utiliserons la notation abrégée d'un système de lois de conservation avec un terme de source :

$$U_t + F(U)_x = G(U), \quad (1.1.2)$$

où $U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \\ \rho Z \end{pmatrix}$, $F(U) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (E + p)u \\ \rho Z u \end{pmatrix}$ et $G(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\rho Z K(\rho, p) \end{pmatrix}$.

La variable Z représente la *fraction de la masse du gaz non-brûlé*

$$0 \leq Z = \frac{\text{masse du gaz non-brûlé}}{\text{masse totale de gaz}} \leq 1.$$

Les autres quantités physiques sont la vitesse u , la pression p , la densité ρ . L'énergie totale par unité de volume est définie par

$$E = \rho e = \rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right)$$

où e est l'énergie totale par unité de masse et ε , l'énergie interne spécifique, i.e. par unité de masse. Ces variables ont été adimensionnalisées, voir [7] pour les détails.

La température du gaz est donnée par $T = p/(\rho R)$, où la pression est définie par l'équation d'état suivante :

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2} \rho u^2 - q_0 \rho Z \right). \quad (1.1.3)$$

et R , la constante universelle des gaz parfaits, est normalisée à 1. Les variables q_0 et γ sont la quantité de chaleur dégagée par la réaction chimique et la constante polytropicque d'un gaz parfait.

Le taux de réaction

$$K(\rho, p) = K(T) : \text{ gaz non-brûlé } \xrightarrow{K(T)} \text{ gaz brûlé}$$

dépend de la température selon une *loi d'Arrhenius* (dans les cas les plus simples [60]) :

$$K(T) = K_0 \exp(-E^+/T), \quad (1.1.4)$$

où K_0 est une constante propre au taux de réaction, utilisée comme un facteur de mise à l'échelle et E^+ est l'*énergie d'activation*.

Le taux de réaction augmente exponentiellement pour une température T suffisamment élevée, mais est négligeable en basse température.

Le comportement de la chimie d'Arrhenius peut être approximé par le modèle discontinu de la *température d'ignition* :

$$K(T) = \begin{cases} 1/\tau, & T \geq T_{ign}; \\ 0, & T < T_{ign}. \end{cases} \quad (1.1.5)$$

où T_{ign} est la *température d'ignition* (ou de combustion) et $1/\tau$ est aussi une constante d'équilibre (ou de mise à l'échelle). Nous utiliserons aussi une température d'ignition pour la chimie d'Arrhenius, dans le but d'éviter les problèmes de *cold boundary* [57] (ignition prématurée causée par du bruit numérique).

Une fois la réaction chimique déclenchée, la proportion de gaz non-brûlé diminue proportionnellement à $e^{-t/\tau}$. En effet, la dernière équation de (1.1.1) est équivalente à

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + u \frac{\partial Z}{\partial x} = -ZK(T).$$

On peut donc voir τ comme étant l'échelle de temps de la réaction chimique. Pour une combustion typique, τ est très petit (jusqu'à l'ordre de 10^{-6}), beaucoup plus petit que l'échelle de temps associée à l'écoulement du gaz.

Dans le cas d'une réaction d'Arrhenius, la constante K_0 est habituellement appelée *nombre de Damkhöler* [60], et les deux constantes, K_0 et $1/\tau$, jouent le même rôle, dans leurs équations respectives, relativement à la raideur de la réaction.

1.2. THÉORIE DE CHAPMAN-JOUGUET

La théorie de Chapman-Jouguet, développée par Chapman en 1899 et approfondie par Jouguet en 1917 (consulter l'article de Chéret [18], pour plus de détails historiques) suppose que la réaction chimique est complétée instantanément, que l'échelle de temps associée à cette réaction est nulle, d'où l'appellation de réaction à taux infini. Ce modèle propose un gaz réactant constitué de deux états, en équilibre thermodynamique, le gaz brûlé et le non-brûlé. La théorie de Chapman-Jouguet postule que ces deux états sont séparés par un front de réaction infiniment petit, c'est-à-dire par une discontinuité.

Introduisons la notation suivante : l'état (0) réfère au gaz non-brûlé et (1) à celui brûlé.

En plus des ondes de choc, raréfaction et discontinuités de contact, nous devons introduire la discontinuité séparant l'état (0) de l'état (1). En supposant que cette discontinuité se propage à la vitesse s , les *conditions de Rankine et Hugoniot* ($s[U] = [F(U)]$) sont :

$$\begin{cases} s[\rho] = [\rho u] \\ s[\rho u] = [\rho u^2 + p] \\ s[E] = [(E + p)u] \end{cases} \quad (1.2.1)$$

On reconnaît les relations de saut de la dynamique des gaz chimiquement inertes. En effet, la théorie de Chapman-Jouguet considérant la détonation comme une "onde de choc et combustion" [18], les mêmes relations classiques de conservation y sont observées. La différence entre le choc classique et celui de combustion, réside en la libération d'énergie lors de ce dernier.

En dénotant la vitesse du gaz relative au front par $d_i = u_i - s$ ($i = 0, 1$), on peut dériver les relations suivantes à partir de (1.2.1) :

De la première équation, on obtient aisément

$$\begin{aligned} s[\rho] &= [\rho u] \\ \rho_0 d_0 &= \rho_1 d_1. \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

De la seconde, en utilisant la conclusion précédente, on a

$$\begin{aligned} s[\rho u] &= [\rho u^2 + p] \\ p_0 + \rho_0 d_0^2 &= p_1 + \rho_1 d_1^2. \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

En utilisant la même méthodologie qu'au cas précédent, on trouve la troisième relation

$$\begin{aligned} s[E] &= [(E + p)u] \\ d_0(\rho_0 \varepsilon_0 + \rho_0 \frac{d_0^2}{2} + p_0) &= d_1(\rho_1 \varepsilon_1 + \rho_1 \frac{d_1^2}{2} + p_1). \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

En posant $M = \rho_i d_i$, l'expression (1.2.3) devient :

$$p_0 + M d_0 = p_1 + M d_1$$

et ainsi,

$$-M = \frac{(p_1 - p_0)}{d_1 - d_0} = \frac{(p_1 - p_0)}{u_1 - u_0}.$$

Sachant que $d_i = M v_i$ où v est le volume spécifique ($v = \rho^{-1}$), nous obtenons la relation d'équilibre suivante

$$-M^2 = \frac{p_1 - p_0}{v_1 - v_0}. \quad (1.2.5)$$

Celle-ci nous indique que la pression et le volume spécifique varient dans des directions opposées, ou encore que la pression et la densité évoluent dans le même sens (la réaction étant exothermique et irréversible, le gaz ne peut passer de l'état (1) à (0)). Les processus où la pression et la densité augmentent au cours

de la réaction, sont appelés *détonations* et ceux pour lesquels ces mêmes quantités diminuent, sont appelées combustions lentes ou *déflagrations*. La détonation constitue le type d'explosion le plus puissant, car elle génère des pressions élevées.

Nous voulons exprimer tous les états brûlés pouvant être reliés à un état non-brûlé quelconque (0). Pour ce faire, nous allons définir l'analogie de la courbe de Hugoniot du cas non-réactif.

Substituons les d_i et les ρ_i dans (1.2.4) à l'aide des expressions contenant M :

$$\left(\rho_0 \varepsilon_0 + \frac{M^2 v_0}{2} + p_0\right) M v_0 = \left(\rho_1 \varepsilon_1 + \frac{M^2 v_1}{2} + p_1\right) M v_1,$$

La relation (1.2.5), nous permet d'obtenir

$$\varepsilon_0 - \frac{v_0^2(p_1 - p_0)}{2(v_1 - v_0)} + p_0 v_0 = \varepsilon_1 - \frac{v_1^2(p_1 - p_0)}{2(v_1 - v_0)} + p_1 v_1$$

d'où découle l'équation

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(p_1 + p_0)(v_1 - v_0) = 0,$$

que nous appellerons la courbe $C1$.

En posant $\varepsilon(v, p) = \varepsilon_1(v, p)$ dans $C1$, on définit la *courbe de Crussard* C (ou Hugoniot pour les gaz réactifs ou encore adiabatique de détonation), avec centre (v_0, p_0) , reliant un état non-brûlé donné (0) à l'ensemble des états brûlés possibles (p, v) (mais pas nécessairement admissibles) :

$$\varepsilon(v, p) - \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(v - v_0) = 0. \quad (1.2.6)$$

Remarquons qu'il y a perte de chaleur q_0 lors de la réaction chimique, ce qui explique que le pôle $A_0 = (v_0, p_0)$ n'appartient pas à C . En effet, d'après (1.1.3), on a la relation

$$\varepsilon = E/\rho - u^2/2 - q_0 Z,$$

ce qui implique que

$$\varepsilon(v_0, p_0) - \varepsilon_0 = q_0. \quad (1.2.7)$$

La théorie classique de la thermodynamique nous permet d'affirmer que pour une entropie constante, on a $\frac{\partial p}{\partial v} < 0$ et $\frac{\partial^2 p}{\partial v^2} > 0$. On peut conclure que l'adiabatique de détonation se traduit dans l'espace (p, v) , par une courbe concave, de pente négative. De plus, en considérant la relation (1.2.7) et le fait que $\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} > 0$ pour une densité fixée, on peut conclure que le pôle est situé sous la courbe de Crussard.

Il est possible d'exprimer \mathcal{C} explicitement en termes de la pression et du volume spécifique. On sait que la courbe de Hugoniot représente tous les états (v, p) pouvant être reliés à l'état (v_0, p_0) par un choc non réactif, pas nécessairement admissible.

$$\mathcal{H} = \varepsilon(v, p) - \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(v - v_0), \quad (1.2.8)$$

où $\mathcal{H}(v, p) = 0$ le long de la courbe d'Hugoniot (voir, entre autres, les livres de Godlewski et Raviart [37] et de Smoller [75]). La différence entre cette courbe et son analogue réactif (mis à part le sens physique), est le fait que $\mathcal{H}(v_0, p_0) = 0$, i.e. A_0 appartient à la courbe et constitue son centre.

De plus, pour un gaz parfait polytropique inerte chimiquement, on a

$$\varepsilon = \frac{pv}{\gamma - 1},$$

ce qui permet aisément de trouver

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu^2}(p(v - \mu^2 v_0) - p_0(v_0 - \mu^2 v)), \quad (1.2.9)$$

avec $\mu^2 = \frac{\gamma-1}{\gamma+1}$. Nous pouvons donc conclure que pour un gaz parfait polytropique, la courbe de Crussard est une hyperbole rectangulaire

$$0 = \varepsilon(v, p) - \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(v - v_0),$$

qui s'exprime aussi en fonction de p

$$p(v) = \frac{p_0(v_0 - \mu^2 v) + 2\mu^2 q_0}{v - \mu^2 v_0}. \quad (1.2.10)$$

En considérant de nouveau la relation d'équilibre (1.2.5), on remarque que celle-ci apporte une information supplémentaire quant aux états finaux possibles. La

droite

$$p(v) = -M^2(v - v_0) + p_0. \quad (1.2.11)$$

reliant le pôle A_0 aux points (v, p) , est appelée *droite de Rayleigh*. L'intersection de cette dernière avec la courbe de Crussard nous fournit l'ensemble des états (v, p) admissibles mathématiquement (pas nécessairement physiquement) pour un état initial donné.

Notons que la pente de la droite de Rayleigh est toujours négative. C'est pour cette raison qu'une section de la courbe de Crussard doit être ignorée. La portion de C comprise entre A et B , sur la figure (1.1), correspond à la zone d'intersection avec une droite de pente positive passant par A_0 . Cette section doit être omise, car son existence contredit la relation (1.2.11).

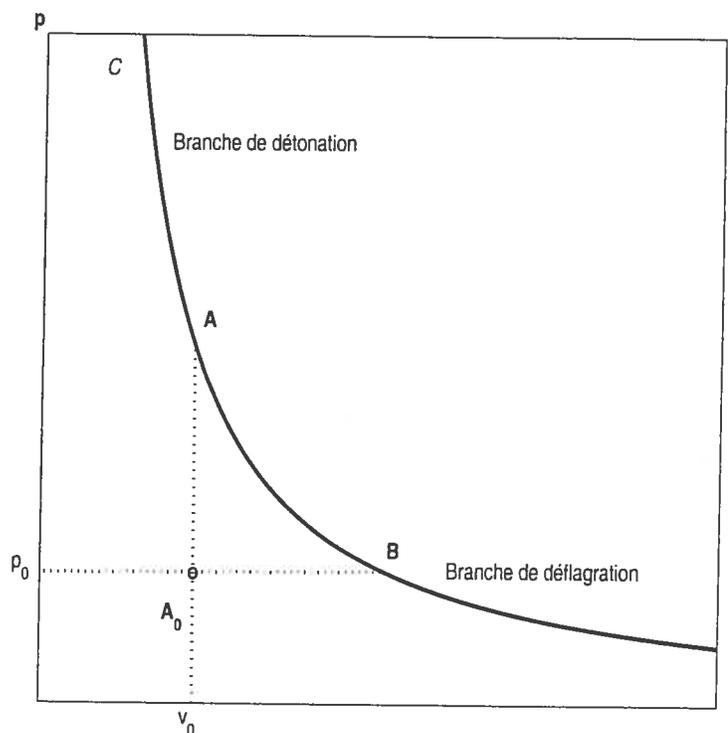


FIG. 1.1. Courbe de Crussard C

La courbe de Crussard, étant privée d'une section, est donc séparée en deux branches. La branche supérieure, correspondant à une réaction caractérisée par un front d'onde compressif ($p > p_0$), est appelée *branche de détonation*. La branche inférieure, correspondant à une réaction d'expansion ($p < p_0$), est appelée *branche de déflagration*.

Les points CJ_1 et CJ_2 , où la droite de Rayleigh est tangente à C , sont appelés *points de Chapman-Jouguet*. Ces deux points divisent la courbe de Crussard en quatre sous-branches. La *détonation de Chapman-Jouguet* (située au point CJ_1) sépare la branche de détonation *forte* (partie supérieure) de la branche de détonation *faible* (partie inférieure). La *déflagration de Chapman-Jouguet* (au point CJ_2), quant à elle, divise la branche de la déflagration en une partie supérieure et inférieure, respectivement appelées *branche de déflagration faible* et *forte* (consulter la figure 1.2). Pour la suite, nous nous concentrerons uniquement sur la détonation.

Il peut être démontré que pour une vitesse de propagation s , il existe 0 ou 2 états brûlés (pouvant être confondus, par exemple, dans le cas d'une détonation C.-J.) pouvant être reliés à l'état non-brûlé (0), par une onde de combustion se propageant à une vitesse s . De plus, ces deux états appartiennent à la même courbe de Hugoniot pour le gaz brûlé (voir ([37]) pour la démonstration). Au point CJ (nous abandonnons les indices, puisqu'il est maintenant uniquement question de la détonation), la droite de Rayleigh étant tangente à la courbe de Crussard, il est possible d'en déterminer la pente (pour le cas d'un gaz parfait polytropique) en dérivant (1.2.10)

$$M_{CJ}^2 = \gamma \frac{p_u}{v_u} + (\gamma^2 - 1) \frac{q_0}{v_u^2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{2\gamma p_u v_u}{q_0(\gamma^2 - 1)}} \right). \quad (1.2.12)$$

Une fois la pente M_{CJ} connue, tout l'état brûlé $(p, v, u, s)_{CJ}$ peut être déterminé.

Remarquons que si $M^2 < M_{CJ}^2$, il n'y a pas de détonation, car la droite n'intersecte pas C et que si $M^2 > M_{CJ}^2$, nous observons soit une détonation forte ou

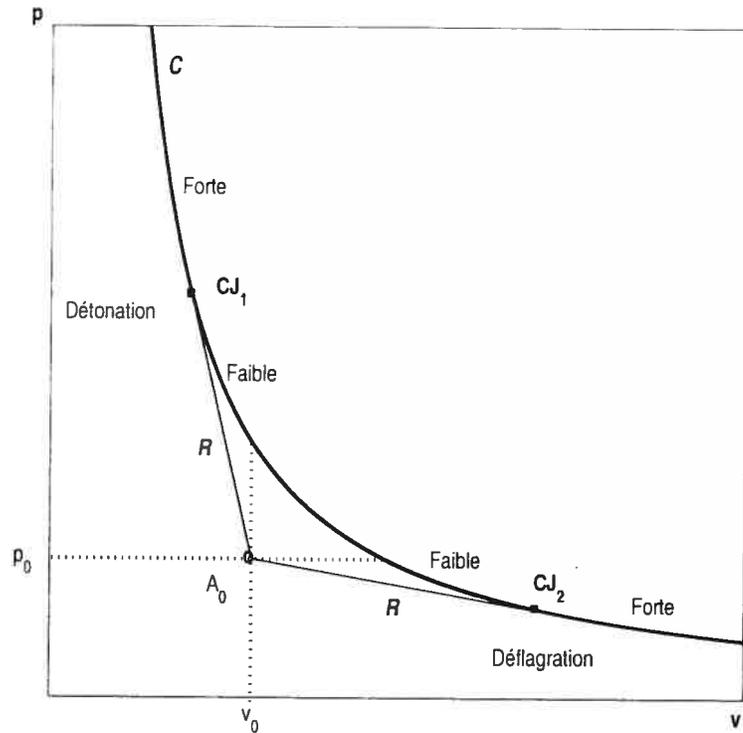


FIG. 1.2. Courbe de Crussard \mathcal{C} et droites de Rayleigh \mathcal{R}

une faible (voir la figure 1.3).

Maintenant, pour une détonation non Chapman-Jouguet, nous savons seulement que la courbe et la droite se coupent dans la zone $(p > p_0) \cap (v < v_0)$. En égalisant les relations (1.2.10) et (1.2.11) tout en isolant v , on obtient

$$v = \frac{\gamma(v_u M^2 + p_u)}{(\gamma + 1)M^2} \mp \frac{1}{M^2} B, \quad (1.2.13)$$

avec $B = \sqrt{(M^2 v_u - \gamma p_u)^2 + 2M^2 q_0(1 - \gamma^2)}/(\gamma + 1)$. La détonation forte étant plus compressive que la faible, on a que $v_S < v_W$ (où les indices S correspondent à la branche de détonation forte et W à celle de la détonation faible), et ainsi

$$\begin{aligned} v_S &= \frac{\gamma(v_u M^2 + p_u)}{(\gamma + 1)M^2} - \frac{1}{M^2} B \\ v_W &= \frac{\gamma(v_u M^2 + p_u)}{(\gamma + 1)M^2} + \frac{1}{M^2} B. \end{aligned}$$

Une fois le volume spécifique connu, les autres variables physiques (p, v, u, s) peuvent en être déduites.

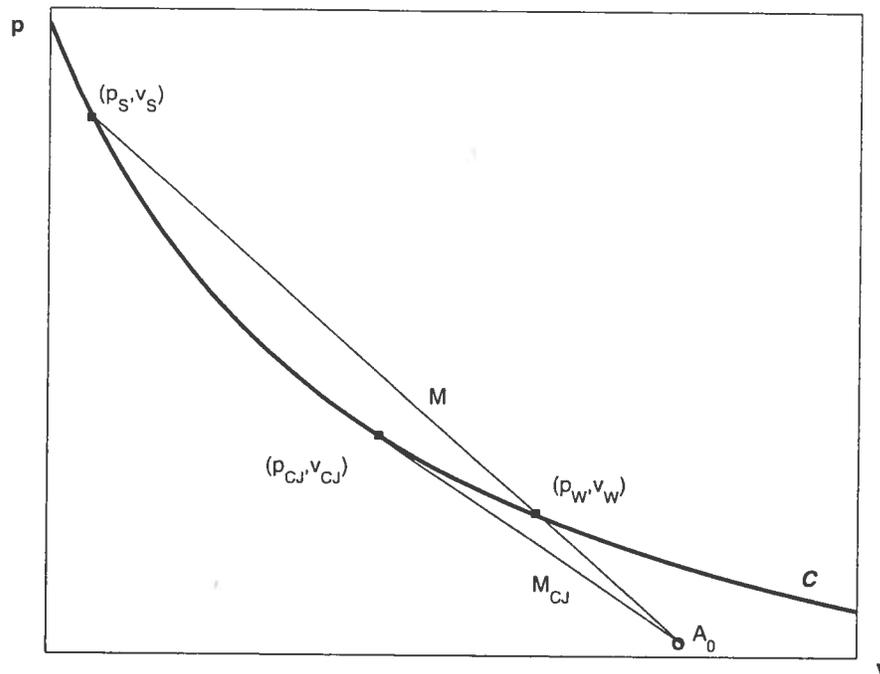


FIG. 1.3. Variation de la pente de la droite de Rayleigh. Les indices W réfèrent à la détonation faible et S à la forte.

Les relations $M = d_0 v_0$ et $M > M_{CJ}$, nous indiquent que la vitesse de propagation minimale du front de détonation est atteinte lors d'une détonation CJ. Il est toutefois toujours possible de déduire la vitesse d'une onde Chapman-Jouguet (respectivement d'une onde de détonation forte) à partir de la vitesse de propagation de la détonation forte (respectivement Chapman-Jouguet). La quantité f nommée *degré de poussée*

$$f = (s/s_{CJ})^2 \geq 1, \quad (1.2.14)$$

nous permet de déduire ces quantités. En pratique, cette quantité n'est pas connue, mais elle est souvent utilisée comme paramètre de bifurcation dans la théorie des détonations instables. De plus, connaissant f et les caractéristiques de l'état initial, on peut définir de façon unique l'état brûlé.

La détonation faible (et la déflagration forte) est un phénomène non admissible pour ce modèle (consulter [22], [37]). Ceci n'exclut cependant pas l'existence

d'une telle onde (voir [33]), toutefois son étude nécessite un modèle plus sophistiqué. C'est pour cette raison qu'à partir de maintenant, lorsque nous parlerons de la détonation, nous sous-entendrons détonation forte ou Chapman-Jouguet.

1.3. THÉORIE ZND

Maintenant que l'état brûlé, connecté par une onde de détonation à un état non-brûlé quelconque, est bien caractérisé, nous nous pencherons sur la structure de l'onde. Pour ce faire, nous devons relaxer une hypothèse de la théorie de Chapman-Jouguet, à savoir celle stipulant que la réaction est instantanée.

Au début des années 1940, Zeldovich [87], von Neumann [85] et Döring [27], ont proposé indépendamment un modèle pour le processus de détonation incluant un taux de réaction fini. Ce modèle propose donc une solution constituée d'une onde de combustion se déplaçant à vitesse constante s , séparant deux états en équilibre thermodynamique. Le taux de réaction est nul devant le front de l'onde et fini derrière.

Pour mettre l'emphase sur l'équation non-homogène des équations d'Euler réactives, nous allons réécrire le système sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f(\phi, Z)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Z u)}{\partial x} &= -\rho Z K(T) \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

$$\text{avec } \phi = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix} \text{ et } f(\phi, Z) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (E + p)u \end{pmatrix}.$$

1.3.1. Détonation : Déflagration Initiée par un Choc

Une des idées de base de la théorie ZND est que la détonation peut être vue comme étant une onde de déflagration, déclenchée par un choc compressible, se

propageant dans le gaz non-brûlé. Le choc comprime le gaz non-brûlé, augmentant ainsi sa température de façon à igniter la réaction chimique.

Le choc relie l'état non-brûlé initial $A_0 = (v_0, p_0)$ à l'état intermédiaire $A_* = (v_*, p_*)$ (tous deux non-brûlés) et la déflagration connecte A_* à l'état $A_1 = (\rho_1, u_1, p_1)$ (brûlé).

Supposons que les deux ondes se déplacent à la même vitesse et que la même quantité de matière traverse les deux discontinuités :

$$M = d_0 \rho_0 = d_* \rho_* = d_1 \rho_1,$$

et

$$-M^2 = \frac{p_0 - p_*}{v_0 - v_*} = \frac{p_* - p_1}{v_* - v_1}.$$

De plus, la détonation est régie par :

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_* + \frac{1}{2}(p_1 + p_0)(v_1 - v_0) = 0$$

et

$$-M^2 = \frac{p_0 - p_1}{v_0 - v_1}.$$

Il en découle que les points A_0 , A_* et A_1 appartiennent à la même droite de Rayleigh. Le processus reliant A_0 à A_1 est donc équivalent à la combinaison illustrée à la figure (1.4). Une détonation forte est équivalente à un choc non-réactif suivi d'une déflagration faible (car son centre A^* est situé au dessus de A'_1), tandis qu'une détonation faible peut être vue comme étant une combinaison d'un choc suivi d'une déflagration forte (A''_1 est situé sous A'_1). Cette dernière remarque est en accord avec le fait que les détonations faibles et les déflagrations fortes sont toutes deux non admissibles.

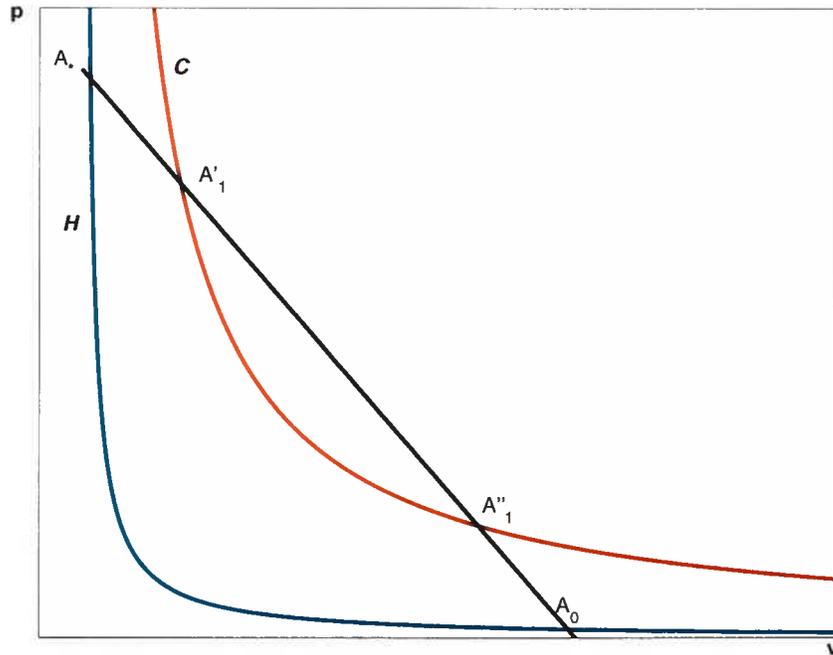


FIG. 1.4. Choc Suivi d'une Déflagration

1.3.2. Solution de Type Ondulatoire

Nous voulons trouver une solution au système (1.3.1) de la forme

$$\begin{cases} (\phi, Z)(x, t) = (\phi, Z)(\xi) \\ \xi = x - st \end{cases} \quad (1.3.2)$$

c'est-à-dire une onde itinérante (*travelling wave*), où s est la vitesse constante de l'onde connectant les états (0) et (1).

Les équations (1.3.2) doivent satisfaire

- i) $(\phi, Z)(\xi) = (\phi_0, 1)$ pour $\xi > 0$, devant le choc
- ii) $(\phi, Z)(0) = (\phi_s, 1)$ pour $\xi = 0$, au choc
- iii) $\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (\phi, Z)(\xi) = (\phi_1, 0)$ pour la réaction totale ($\xi \rightarrow -\infty$: loin derrière le choc)

où ϕ_0 est l'état initial, ϕ_1 est l'état final en équilibre et ϕ_s est l'état correspondant au choc, que nous supposons chimiquement inerte (voir la section précédente), i.e. $Z = 1$ à travers le choc.

Le problème consiste à caractériser l'état après le choc $(\phi, Z)(\xi)$ pour $\xi < 0$. Nous supposons que la solution y soit lisse pour $\xi < 0$.

La première partie de la solution consiste à résoudre les premières équations de (1.3.1) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f(\phi, Z)}{\partial x} &= 0 \\ \Rightarrow -s \frac{d\phi}{d\xi} + \frac{df(\phi, Z)}{d\xi} &= 0. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

En intégrant (1.3.3), on obtient le système suivant :

$$f(\phi(\xi), Z(\xi)) - f(\phi_s, 1) = s(\phi(\xi) - \phi_s).$$

Suivant la même méthodologie que pour la théorie de Chapman-Jouguet, nous trouvons

$$M = \rho_0(u_0 - s) = \rho(\xi)(u(\xi) - s) \quad (1.3.4)$$

ainsi que les relations suivantes :

$$\begin{aligned} M &= \frac{u(\xi) - u_0}{v(\xi) - v_0} = -\frac{p(\xi) - p_0}{u(\xi) - u_0} \\ -M^2 &= \frac{p(\xi) - p_0}{v(\xi) - v_0}. \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

Ces dernières nous amènent à la famille de courbes de Crussard :

$$\varepsilon(v(\xi), p(\xi), Z(\xi)) - \varepsilon(v_0, p_0, 0) + \frac{1}{2}(p(\xi) + p_0)(v(\xi) - v_0) = 0. \quad (1.3.6)$$

Comme pour la théorie de Chapman-Jouguet, on peut exprimer v et p en fonction de Z en résolvant les équations (1.3.5) et (1.3.6).

On remarque que lorsque $\xi = 0$, on retrouve l'équation de la courbe de Hugoniot pour le gaz non-brûlé et que lorsque $\xi \rightarrow -\infty$, on retombe sur la courbe de Crussard pour le gaz entièrement brûlé ($Z = 0$). Entre les états non-brûlé et brûlé, il y a une infinité de courbes définies par la relation (1.3.6) (voir la figure 1.5)

La seconde partie de la solution, consiste à développer la deuxième équation de

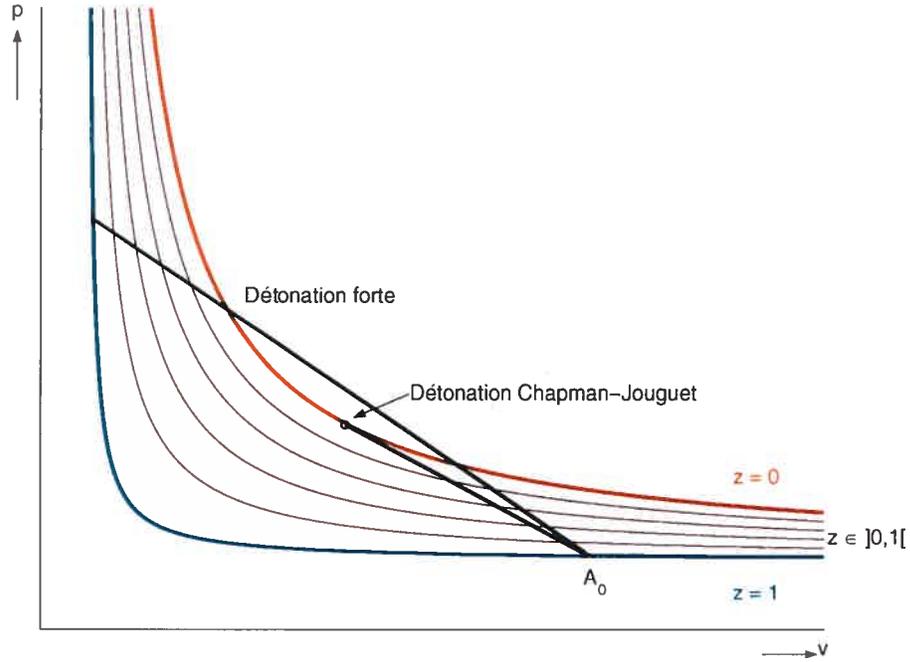


FIG. 1.5. Courbes de Hugoniot associées à diverses valeurs de Z

(1.3.1).

Sous l'hypothèse de continuité, nous avons pour $\xi < 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Z u)}{\partial x} &= -Z \rho K(T) \\ \Rightarrow -s \frac{d(\rho Z)}{d\xi} + \frac{d(\rho Z u)}{d\xi} &= -Z \rho K(T). \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

Nous pouvons réécrire (1.3.7) telle que

$$Z \left[-s \frac{d\rho}{d\xi} + \frac{d(\rho u)}{d\xi} \right] + \frac{dZ}{d\xi} \left[\rho(u - s) \right] = -Z \rho K$$

Le premier crochet est nul d'après la première des équations correspondant à (1.3.3), ce qui nous permet de finalement obtenir

$$\frac{dZ}{d\xi} = -\frac{Z}{Mv(\xi)} K(v(\xi), p(\xi), Z(\xi)). \quad (1.3.8)$$

Nous avons maintenant les outils nécessaires pour déterminer le triplet $(v(\xi), p(\xi), Z(\xi))$ pour $\xi < 0$, avec $Z(0) = 0$.

Comme nous l'avons fait remarquer plus tôt, on peut redéfinir v et p en considérant Z comme un paramètre (grâce à (1.3.5) et (1.3.6)). En substituant ces expressions dans (1.3.8), on obtient une équation différentielle ordinaire entièrement défini :

$$\begin{aligned} \frac{dZ(\xi)}{d\xi} &= -\frac{Z}{Mv(Z)} K(v(Z), p(Z), Z)(\xi) \\ Z(0) &= 0. \end{aligned} \quad (1.3.9)$$

Cette équation aux dérivées ordinaires peut être résolue numériquement en fonction de ξ , puis rapportée en coordonnées (x, t) .

La largeur de la zone de transition entre l'état brûlé et non-brûlé ($\xi \rightarrow -\infty$ et $\xi > 0$) dépend du taux de réaction, ou mathématiquement, du terme de source. On qualifie de *raide* (ou *stiff*), une détonation dont la largeur de la zone de réaction est très inférieure à l'échelle spatiale associée au mouvement du fluide. De plus, les échelles spatiales et temporelles étant du même ordre de grandeur (reliées par les contraintes des domaines de dépendance et d'influence des solutions), on peut aussi caractériser la raideur d'une détonation d'un point de vue temporel. L'échelle de temps nécessaire pour bien capter l'évolution de la réaction chimique d'une détonation raide est beaucoup plus courte que celle nécessaire pour suivre l'écoulement du gaz.

D'un point de vue numérique, pour être capable de bien séparer les échelles impliquées dans une détonation raide, nous avons besoin d'une longueur étalon. Pour ce faire, nous allons utiliser la largeur de la zone d'une demi-réaction, ou en d'autres termes, la largeur de la zone où la première moitié du gaz est brûlé :

$$L_{1/2} = - \int_{1/2}^1 \frac{M}{K(Z)} dZ. \quad (1.3.10)$$

Cette expression est obtenue en intégrant le système (1.3.9).

Pour terminer cette section, nous présentons un exemple qualitatif unidimensionnel de détonation, dans le but d'illustrer la précédente théorie.

Considérons un tube à choc de longueur infinie (de manière que les extrémités n'influencent pas l'écoulement). Ce tube est rempli d'un gaz binaire : du côté gauche de la membrane se trouve le gaz brûlé et à droite, le gaz non brûlé. Le gaz brûlé est aussi caractérisé par une pression, une densité et une température supérieures à celles du gaz non brûlé. Initialement, on brise la membrane. Les différentiels des quantités physiques sont suffisamment élevés pour déclencher une onde de choc se déplaçant dans le gaz non brûlé. Le choc réchauffe le gaz non brûlé derrière lui de sorte qu'une réaction chimique est déclenchée. La pression atteint sa valeur maximale derrière le choc. Cette valeur maximale est appelée *pression de von Neumann* et la température associée s'appelle *température de von Neumann*. Le choc étant compressif, l'ignition du gaz se traduit par une baisse de pression et de densité (voir la figure (1.6)).

À la figure (1.7), on retrouve les profils ZND d'une détonation Chapman-Jouguet ($f = 1$) pour les conditions initiales

$$(\rho, u, p, Z)_0 = (1, 0, 1, 1);$$

et les paramètres $\gamma = 1.4$, $q_0 = 25$, $E^+ = 25$. Le nombre de Damkhöler est fixé à 164, ce qui donne une largeur de demie réaction $L_{1/2} = 0.10011$. La pression de von Neumann atteint la valeur de 42.1345 et l'onde de combustion se propage à la vitesse $s = 7.1247$.

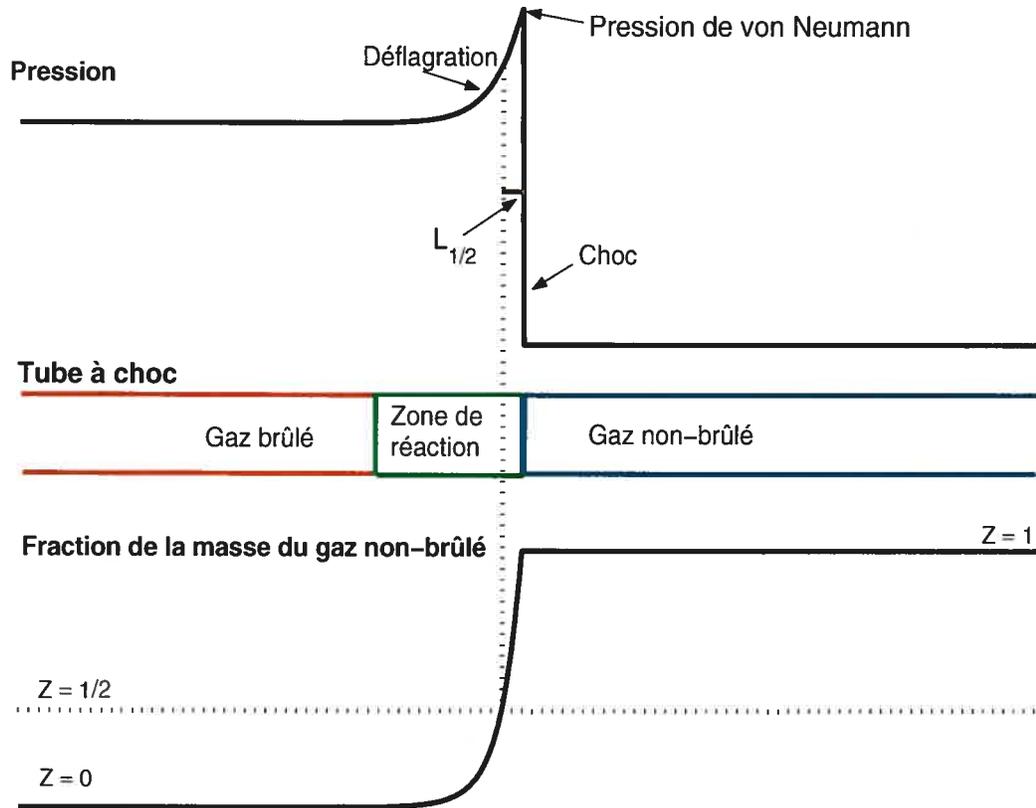


FIG. 1.6. La détonation est équivalente un choc non-réactif suivi d'une déflagration.

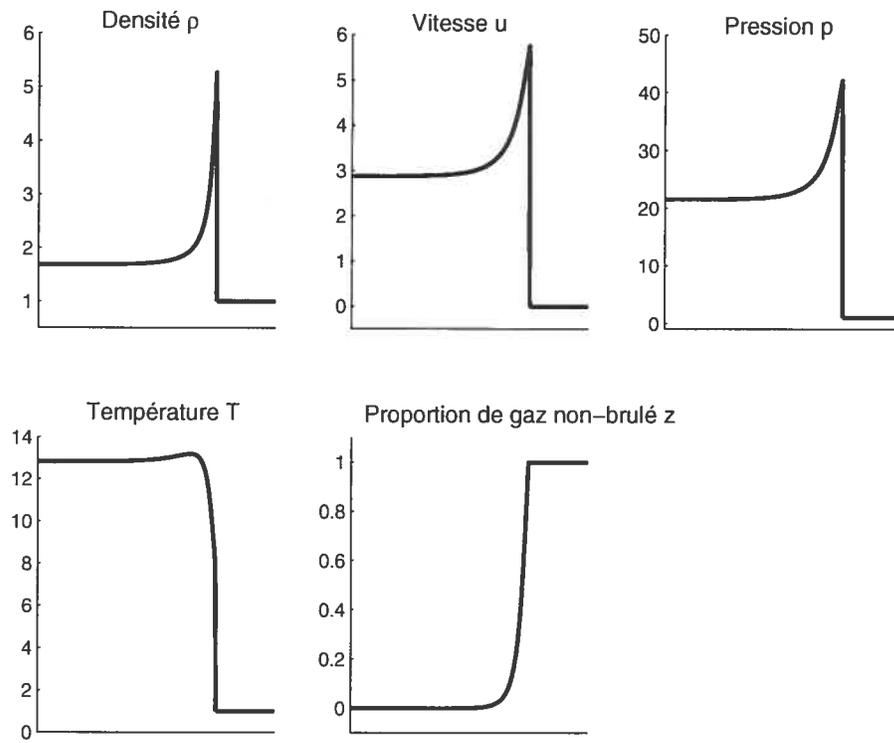


FIG. 1.7. Profils ZND typiques

Chapitre 2

ÉTUDE DES SOLUTIONS NON-PHYSIQUES

La méthode illustrée dans le précédent chapitre permet de déterminer l'état brûlé pouvant être relié à l'état non-brûlé et la structure de l'onde reliant ces deux états. Cependant, il peut devenir très coûteux d'utiliser cette méthode et dans certains cas, comme par exemple en plus d'une dimension spatiale ou pour des géométries complexes, voir impossible. Il est donc essentiel de développer des méthodes numériques basées sur d'autres méthodes que celle de la résolution de l'équation aux dérivées ordinaires (1.3.9).

Il est bien connu que les méthodes de volumes finis se comportent très bien lors de la résolution de problèmes menant à des solutions discontinues. C'est principalement pour cette raison que ces méthodes constituent la façon la plus répandue de simuler des détonations. Nous reviendrons sur les méthodes de volumes finis au chapitre 4. Pour l'instant, il suffit de retenir que toutes les méthodes de volumes finis traitant le terme de source avec séparation des opérateurs (*splitting*) ou non, produisent des solutions non-physiques lorsque qu'on tente de simuler des détonation raides avec un maillage trop grossier. Ce phénomène fut observé en premier par Colella, Majda et Roytburd [21].

Par solution non-physique, on entend une solution mathématiquement vraie enfreignant certains principes de la physique.

Avant de se consacrer au développement de schémas sous-résolus pour les détonations raides, il s'avère fort utile d'étudier les solutions non-physiques. Ce chapitre est donc consacré à l'étude des propriétés de ce type de solution non-physique. Dans un premier lieu, nous introduirons le contexte dans lequel elles apparaissent et ensuite, nous utiliserons un modèle simplifié pour comprendre leur nature non-physique. L'étude de ce modèle nous permettra de faire le lien avec le comportement des schémas diffusifs et nous conduira sur la piste de solution étudiée dans cette thèse.

2.1. PROBLÉMATIQUE DES SOLUTIONS NON-PHYSIQUES

Pour approximer efficacement une détonation, on devrait utiliser une discrétisation de l'espace assez fine pour avoir quelques points dans la zone de réaction, de même qu'un pas de temps assez petit pour "voir" la réaction chimique. Pour une combustion typique, l'échelle de temps de la réaction est très petite (de l'ordre de 10^{-6} seconde), beaucoup plus petite que l'échelle requise pour simuler la dynamique des gaz. En bref, pour pouvoir qualifier une simulation de résolue, la discrétisation spatiale doit être de taille inférieure à $L_{1/2}$ et le pas de temps plus petit que τ , pour une chimie discontinue. Sachant que la quantité $L_{1/2}$ dépend du nombre de Damkhöler, ou du paramètre τ dans le cas discontinu, et que les discrétisations spatiales et temporelles sont reliées par la condition CFL (voir chapitre 4), il est suffisant de considérer $L_{1/2}$ comme unique étalon. Ainsi, un schéma est sous-résolu si sa discrétisation ($x_{i+1} - x_i = \Delta x$) est telle que $\Delta x \in \mathcal{S}$, $\mathcal{S} = \{y \in \mathbb{R}^+ \mid y > L_{1/2}\}$.

Dans le cas d'une simulation sous-résolue, la zone de réaction n'étant pas discrétisée ($\Delta x > L_{1/2}$), nous devons sacrifier l'idée d'obtenir la structure détaillée de l'onde (comme celle illustrée à la figure 1.7, par exemple). Pour un régime de combustion raide, un schéma sous-résolu fournira, dans le meilleur des cas, le bon profil de la discontinuité se déplaçant à une vitesse correcte.

Certaines approximations fournies par des schémas conservatifs peuvent sembler

raisonnables à première vue, mais être totalement dépourvues de sens physique. La solution observée peut, dans les cas raides où la résolution est trop grossière, évoluer à une vitesse supérieure à la vitesse théorique. Ceci est évidemment, voir figure 2.1, un comportement induit par un mauvais traitement numérique. Effectivement, un raffinement du maillage est suffisant pour faire converger le schéma vers la solution physique.

La solution non-physique observée est constituée d'une onde de combustion suivie d'un choc dans le gaz brûlé. L'onde de combustion est en fait une détonation faible qui, on se le rappelle, est inadmissible physiquement pour ce modèle. D'un

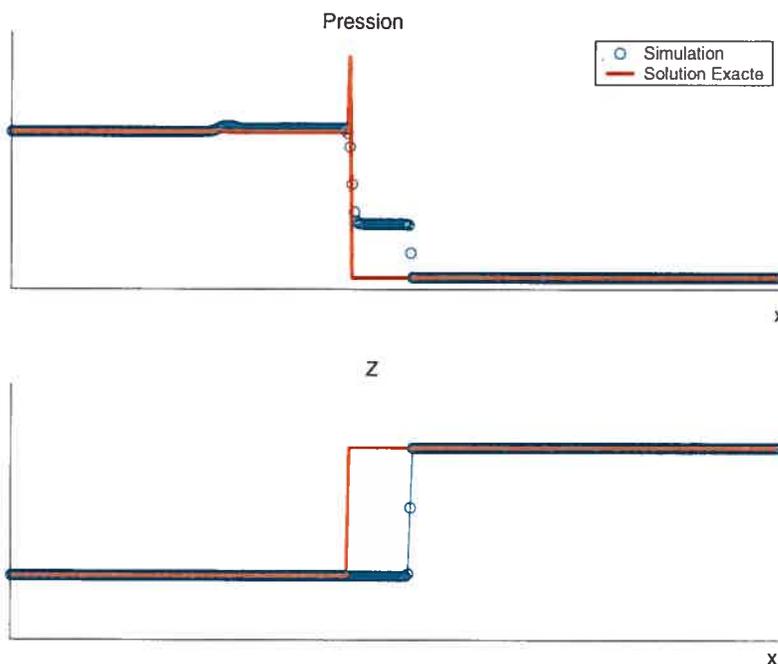


FIG. 2.1. Solution non-physique typique obtenue avec une méthode sous-résolue non adaptée.

point de vue strictement numérique, la convergence des schémas de volumes finis, vers la solution faible non-physique, est causée en premier lieu par leur caractère diffusif.

Analysons la situation en une dimension spatiale. Lors de la simulation sous-résolue d'une détonation raide, comme expliquée précédemment, les résultats observés devraient, dans les meilleurs des cas, montrer le bon profil se déplaçant à la vitesse exacte. En d'autres mots, la solution numérique devrait être constituée d'une discontinuité séparant l'état brûlé du non-brûlé, se propageant à la vitesse dictée par la théorie Chapman-Jouguet, i.e. la vitesse physique. Plus un schéma est diffusif, plus la largeur de transition du choc, nombre de points contenus dans l'espace séparant l'état de gauche de l'état de droite, est grande. Les schémas utilisés étant diffusifs, la largeur de transition associée à la détonation est non nulle. Pour comprendre les implications, considérons le profil de la pression. La diffusion crée l'aplanissement de la discontinuité qui se traduit par une augmentation de la pression inappropriée à la base de la discontinuité (voir la figure 2.2). La température étant proportionnelle à la pression, il en résulte une hausse de température au même endroit qui, si elle est assez élevée, déclenche du coup une réaction chimique brûlant le gaz. Si la détonation est raide, le gaz allumé brûlera entièrement ou presque en un seul pas de temps. La vitesse non-physique sera ainsi proportionnelle à $\Delta x/\Delta t$, ce qui est bien sûr la conséquence d'un mauvais traitement numérique.

2.2. ANALYSE DE LA SOLUTION NON-PHYSIQUE

L'objectif de cette section est de connaître les raisons du passage de la détonation forte à la faible lors de la résolution des équations d'Euler réactives. Pour ce faire, on étudiera les circonstances théoriques du passage de la détonation forte à la faible pour les équations visqueuses de Navier-Stokes réactives et leur version simplifiée, élaborée par Majda [57]. Il a été montré que pour ces modèles, dits visqueux, il existe des circonstances, traduites par des combinaisons de paramètres, où on observe des détonations faibles. Dans ces circonstances, les ondes de combustion faibles sont physiques.

En plus de résumer les caractéristiques de ces ondes, on tentera d'expliquer le lien entre les raisons théoriques de la bifurcation des profils pour le modèle de

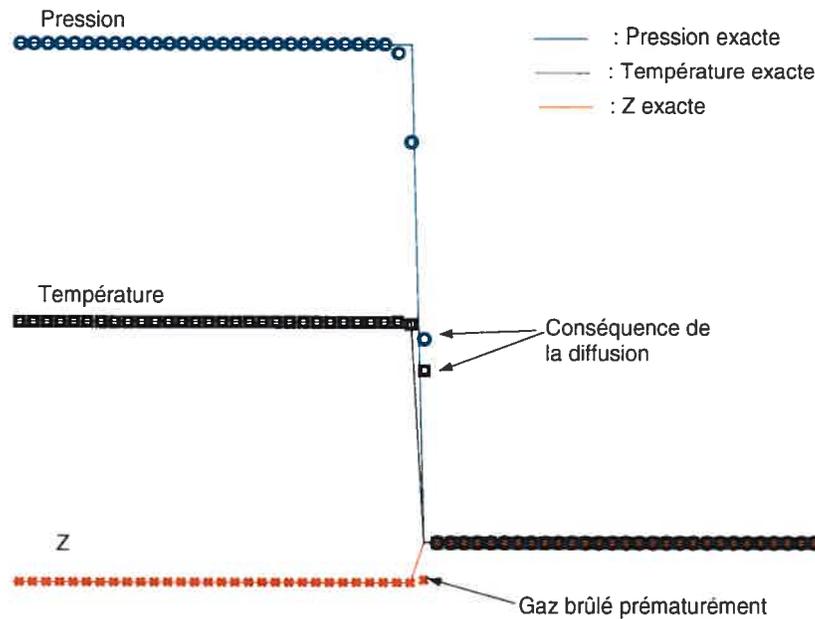


FIG. 2.2. Impact de la diffusion sur la capture de la détonation raide.

Navier-Stokes réactif et les raisons qui rendent les simulations des équations d'Euler réactives si sensibles à la variation de la discrétisation.

Considérons d'abord les systèmes d'équations de Navier-Stokes réactifs et d'Euler réactifs. Les solutions de ces deux systèmes ont en commun le fait qu'elles sont constituées d'ondes de combustion, se propageant dans un gaz réactif composé de deux types de réactants. Ces deux systèmes modélisent le même phénomène de combustion, à la différence que le deuxième se veut une réplique à grande échelle du premier, négligeant donc les effets de la viscosité, de la diffusion et des échanges de chaleur.

Les équations de Navier-Stokes réactives modélisent une combustion à petite

échelle. donc incluent les effets de transport :

$$\begin{aligned}
 \rho_t + (\rho u)_x &= 0 & (2.2.1) \\
 (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x &= \mu u_{xx} \\
 E_t + (uE + up)_x &= \left(\mu \left(\frac{u^2}{2} \right)_x \right)_x + c_\rho (\lambda T_x)_x \\
 (\rho Z)_t + (\rho u Z)_x &= -\rho K(T) Z + (D Z_x)_x
 \end{aligned}$$

où u , ρ , p , T , Z représentent respectivement la vitesse, la densité, la pression, la température du gaz, la fraction de masse du gaz non-brûlé et où μ , c_ρ , λ , D sont les coefficients de viscosité, de chaleur spécifique, de conduction de la chaleur, de diffusion entre les réactants. De plus, l'énergie spécifique totale E est telle que $E = \rho(e + q_0 Z + \frac{u^2}{2})$, avec e l'énergie spécifique interne et $q_0 > 0$ la chaleur libérée par la réaction chimique. La température T est directement proportionnelle à p/ρ et $K(T)$ est telle que

$$K(T) = K_0 \phi(T)$$

avec K_0 le taux de réaction et $\phi(T)$ une fonction d'ignition ayant pour forme une chimie d'Arrhenius ou un delta de Dirac.

En posant $\mu = \lambda = D = 0$, on obtient les équations d'Euler réactives :

$$\begin{aligned}
 \rho_t + (\rho u)_x &= 0 & (2.2.2) \\
 (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x &= 0 \\
 (E)_t + (uE + up)_x &= 0 \\
 (\rho Z)_t + (\rho u Z)_x &= -\rho K(T) Z.
 \end{aligned}$$

2.3. MODÈLE SIMPLIFIÉ POUR NAVIER-STOKES RÉACTIVES

Pour mettre en évidence les interactions entre les ondes de choc provenant de l'advection du fluide et les processus de combustion (dynamique chimique), des versions simplifiées de (2.2.1) (et donc de (2.2.2)) ont été développées. Considérons

celle étudiée par Majda [57] :

$$\begin{aligned} u_t + \left(\frac{1}{2}u^2\right)_x - q_0 Z_t &= \beta u_{xx} \\ Z_t &= -K\phi(u)Z \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

où u est une variable représentant un amalgame de la pression, la densité et la température et β représente à elle seule la viscosité, la diffusion et les effets de la conduction de la chaleur. Rappelons que nous nous intéressons au changement de la nature de l'onde de combustion reliant le gaz brûlé au gaz non-brûlé, c'est-à-dire le passage de la détonation forte à la détonation faible (physique dans ces cas-ci). Le modèle simplifié (2.3.1) imite qualitativement le comportement des équations (2.2.1) sur le plan, entre autres, des bifurcations des profils.

Remarque 2.3.1. *On retrouve aussi dans la littérature [21, 66] une autre version du modèle simplifié, où la proportion de gaz non-brûlé est évoluée dans l'espace :*

$$\begin{aligned} u_t + \left(\frac{1}{2}u^2 - q_0 Z\right)_x &= \beta u_{xx} \\ Z_x &= -K\phi(u)Z. \end{aligned}$$

Les deux versions sont qualitativement équivalentes, pourvu que la vitesse de propagation soit positive.

On retrouve dans [57] une étude théorique des circonstances provoquant de telles bifurcations : les voici résumées.

Nous cherchons une solution particulière de type ondes planes $w = (u, Z)$:

$$w(\xi) = w\left(\frac{x - st}{\beta}\right), \quad s > 0. \quad (2.3.2)$$

Fixons l'état pré-choc à $w_0 = (u_0, 1)$ et les conditions limites

$$\begin{aligned} \lim_{\xi \rightarrow -\infty} w(\xi) &= (u_1, 0) \\ \lim_{\xi \rightarrow \infty} w(\xi) &= (u_0, 1). \end{aligned}$$

En introduisant (2.3.2) dans le système (2.3.1) et en intégrant la première équation, nous obtenons, en posant $\bar{Z} = q_0 Z$ et $K_0 = \beta K$, le système

$$\begin{aligned} u' &= \frac{u^2}{2} - us - \bar{Z} + C \\ \bar{Z}' &= -K_0 \phi(u) \bar{Z}. \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

En évaluant, à la limite $\xi \rightarrow \infty$, la première équation, on fixe la constante d'intégration

$$C = -\frac{1}{2}u_0^2 + u_0 s + q_0.$$

Considérons à nouveau la première équation de (2.3.3)

$$u' = \frac{u^2}{2} - us - \bar{Z} - \frac{1}{2}u_0^2 + u_0 s + q_0.$$

On remarque qu'évaluée à limite $\xi \rightarrow -\infty$ (en laissant tomber les indices 1) :

$$0 = \frac{u^2}{2} - us - \frac{1}{2}u_0^2 + su_0 + q_0, \quad (2.3.4)$$

elle peut posséder deux solutions $u : u_* < u^*$, qui, par construction doivent être supérieures à u_0 . Cette dernière équation nous permet de déterminer la vitesse de propagation de l'onde

$$s = \frac{u^2/2 - u_0^2/2 + q_0}{u - u_0}. \quad (2.3.5)$$

Posons $\mathcal{C}(u) := u^2/2$ et $\mathcal{R}(u) = s(u - u_0) + \frac{1}{2}u_0^2 - q_0$, les courbes de Crussard et de Rayleigh pour le modèle simplifié.

De façon analogue à la théorie de Chapman-Jouguet, nous avons une détonation forte si l'état thermodynamique du gaz brûlé se trouve à l'intersection de la droite et de la courbe située au dessus du point de tangence. Si l'état final se trouve sous le point de tangence, on a une détonation faible et le point de tangence représente la détonation Chapman-Jouguet. L'analogue de la théorie ZND a aussi été développé pour ce modèle.

Ainsi, nous avons que l'état $(u_0, 1)$ peut être connecté par une onde de combustion, se propageant à la vitesse s , aux états $(u_*, 0)$ ou $(u^*, 0)$. Si ces deux états sont distincts, nous ne sommes donc pas en présence d'une détonation CJ. Alors forcément, l'état $(u_*, 0)$ est atteint avec une onde de détonation faible, tandis que

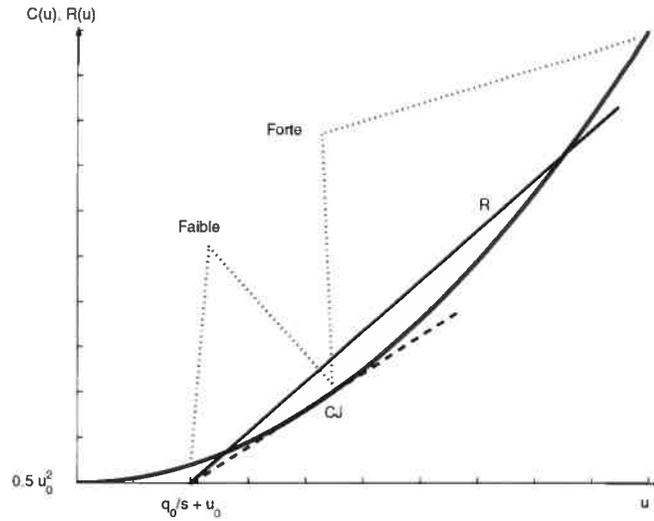


FIG. 2.3. Courbes de Crussard et Rayleigh pour le modèle simplifié

l'état $(u^*, 0)$ est relié à $(u_0, 1)$ par une détonation forte. D'après les résultats de Majda, on peut déterminer, selon la quantité de chaleur libérée q_0 , dans quelle situation nous sommes. D'abord, définissons la quantité de chaleur libérée q_{cr} critique :

soit $\min(q_0) = q' > 0$, $\exists q_{cr} > q'$ telle que

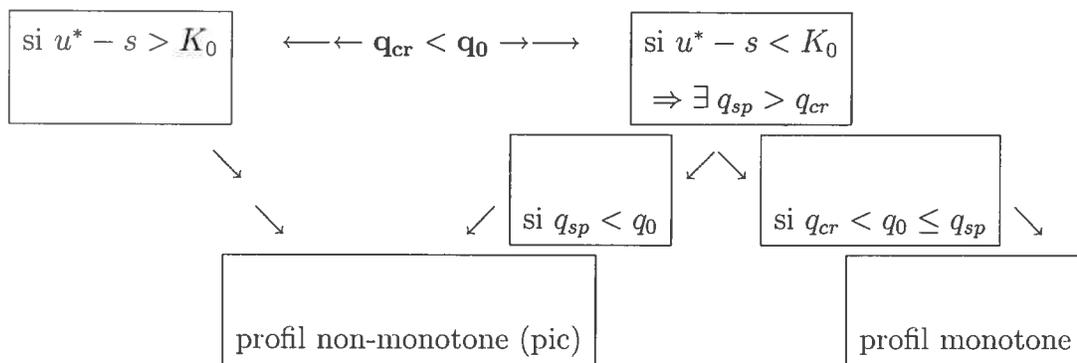
$$\frac{K_0 u_*}{s^2 \alpha} < q_{cr} < q' + \frac{K_0 u_*}{s^2} + 2 \frac{\sqrt{K_0 u_* q'}}{s}, \quad (2.3.6)$$

où α est une constante positive, définie de sorte que l'inégalité (2.3.6) soit toujours respectée.

Pour des valeurs fixes de $K_0 = \beta K$, u_* et u^* , on a (voir [57] pour les arguments) :

A)	Détonation forte
$q_{cr} < q_0$	$(u_0, 1) \xrightarrow{s} (u^*, 0)$

Structure sous-jacente à A)



B) $q_{cr} = q_0$	Détonation faible $(u_0, 1) \xrightarrow{s} (u_*, 0)$
C) $q_{cr} > q_0$	Postulat [21] : Détonation faible (par continuité de B)) $(u_0, 1) \xrightarrow{s} (u_*, 0)$

Par non-monotone, on entend un profil de u , pour un temps donné, comportant un "pic" de combustion, appelé pic de von Neumann dans le cas des équations complètes (2.2.2). Le pic en question est la jonction du maximum de u , atteint immédiatement derrière le choc, et de la zone de réaction, qui se traduit dans notre cas en une diminution du maximum de u jusqu'à u^* (voir la figure 2.4).

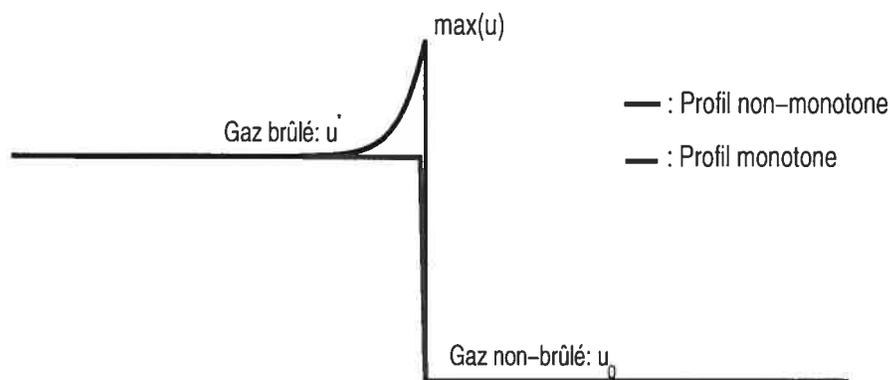


FIG. 2.4. Profils de u

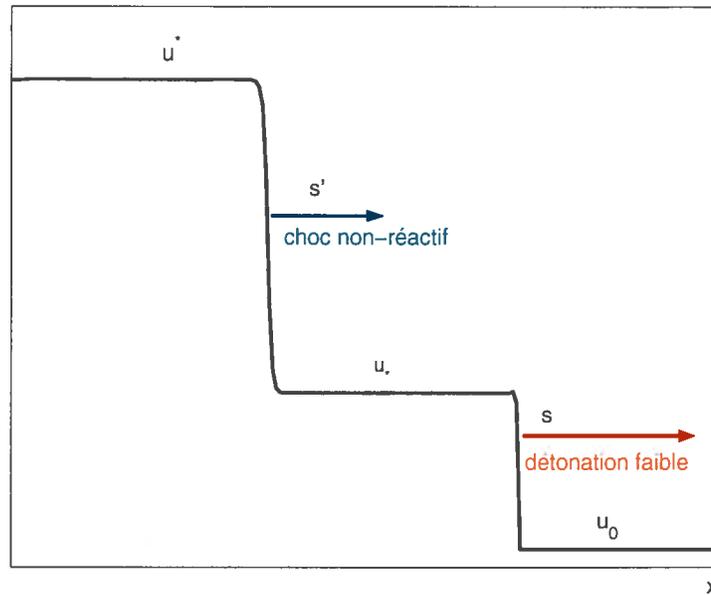


FIG. 2.5. Profil de u pour une détonation faible : cas B) et C)

Par contre, dans le cas d'une détonation faible, étant donné que $u_* < u^*$, un choc doit amener u à l'état final u^* . Ce choc non-réactif se déplace à la vitesse $s' < s$:

$$\begin{aligned} s' &= \frac{f(u^*) - f(u_*)}{u^* - u_*} \\ &= \frac{1}{2}(u^* + u_*) \end{aligned}$$

où $f(u) = \frac{1}{2}u^2$ est le flux. Le profil de la solution prend alors la forme d'un escalier (voir la figure (2.5)).

Il a été montré [21] que le profil de détonation faible est dynamiquement stable : pour une petite perturbation des conditions initiales menant à une détonation faible, l'onde retrouve rapidement sa nature.

Jusqu'ici, on a gardé le taux de réaction $K_0 = \beta K$ fixe en variant q_0 . Dans la plupart des expériences qui suivront, c'est K_0 (ou ses analogues) qui varie tandis que la quantité de chaleur dégagée est fixée. Dans ce cas, on retrouve un scénario similaire à celui décrit par A), B) et C).

Ces deux variables, K_0 et q_0 , peuvent être reliées par la relation (2.3.6) en considérant $q_{cr} = q_{cr}(K_0)$ avec q_0 constant : pour $K_0 \rightarrow 0$ on a $q_{cr} \rightarrow q'$ et quand

$K_0 \rightarrow \infty$ on obtient $q_{cr} \rightarrow \infty$. Rappelons que K_0 est un mélange d'effets de transport et de taux de réaction.

D'après (2.3.6), pour q' , s et u_* donnés, q_{cr} est borné supérieurement et inférieurement par les familles de courbes $\Pi(K_0)$ et $\pi(K_0)$ respectivement :

$$\Pi(K_0) : q' + \frac{K_0 u_*}{s^2} + 2 \frac{\sqrt{K_0 u_* q'}}{s} \quad (2.3.7)$$

$$\pi(K_0) : \frac{K_0 u_*}{s^2 \alpha}. \quad (2.3.8)$$

On voit bien (figure 2.6) qu'en augmentant K_0 , on diminue les possibilités d'avoir

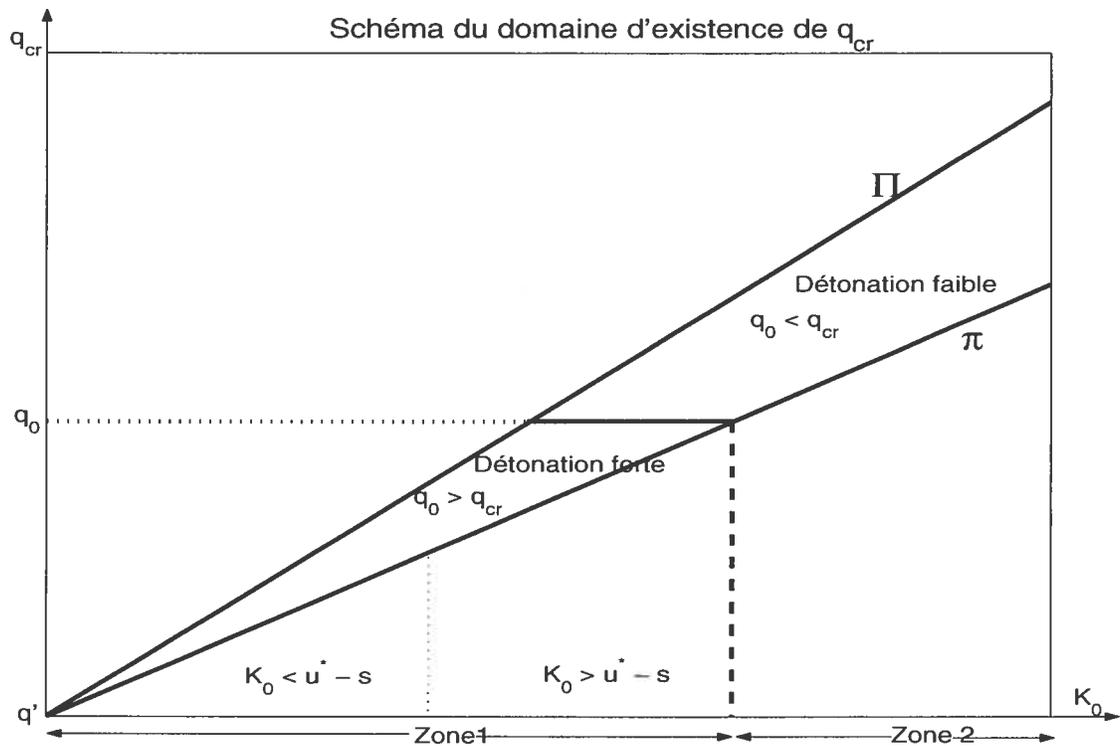


FIG. 2.6. Représentation qualitative possible du domaine d'existence de $q_{cr}(K_0)$ pour q_0 fixé : région entre Π et π . Si $K_0 \in$ Zone 1 on a une détonation forte et si $K_0 \in$ Zone 2, une détonation faible. La courbe Π est ici approximée par une droite, dans le but d'alléger l'illustration.

$q_0 > q_{cr}$ et par conséquent, on augmente les chances d'observer une détonation faible. De la même façon, en diminuant K_0 , on observe plus probablement un profil de détonation forte. Dans le cas où $q_0 > q_{cr}$, et dans le contexte où, au lieu

de garder K_0 fixe et faire varier q_0 , on fait maintenant varier K_0 tout en gardant q_0 fixé, il existe, de la même façon qu'au cas A) énoncé plus haut, des possibilités de profils monotones et non-monotones.

Remarquons finalement que si l'équation limite (2.3.4) ne possède qu'une seule solution supérieure au seuil d'ignition u_0 , c'est forcément $u^* = u$, c'est-à-dire l'onde de combustion est une détonation CJ. Pour s , q_0 et u_R donnés, il se peut donc que l'unique possibilité de relier l'état brûlé au non-brûlé soit une détonation CJ (aucune détonation faible possible).

Remarquons aussi qu'une condition nécessaire à l'apparition des détonation faibles physiques est que la température d'ignition u_{ign} soit inférieure à u_* .

2.4. ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES RÉACTIVES

On observe qualitativement le même scénario qu'avec le modèle simplifié : la structure de l'onde de combustion change selon q_0 (ou K_0) suivant le même *pattern* que dans le cas simplifié. Évidemment, les bornes sur q_{cr} sont différentes, mais la dépendance de la nature de la détonation par rapport à q_0 et K_0 , de même que la dépendance implicite de cette quantité critique de chaleur libérée (donc de la nature de l'onde de combustion) par rapport aux variables thermodynamiques et à la vitesse de l'onde sont toujours présentes. Pour obtenir des preuves et des résultats quantitatifs, consulter [21] et [35].

Le même commentaire sur l'existence des détonations faibles physiques dans le cas du modèle simplifié reste valable ici aussi. Une condition nécessaire pour leur existence est que la température d'ignition T_{ign} soit inférieure à la température atteinte après le passage d'une détonation faible.

2.5. ÉQUATIONS D'EULER RÉACTIVES

Lors d'une simulation numérique des équations d'Euler réactives, avec des conditions initiales provoquant une détonation forte, on observe un scénario semblable

à celui décrit pour le modèle simplifié. Cette fois, contrairement aux cas visqueux précédents, les bifurcations sont provoquées par le changement d'échelle de discrétisation.

Soit $L_{1/2}$ la largeur de la zone de demi-réaction, posons $\Delta x = \gamma L_{1/2}$ avec $\gamma > 0$. Pour $\gamma < 1$, le schéma est résolu : la discrétisation spatiale (et donc temporelle, compte tenu de la condition CFL) est du même ordre de grandeur que la plus petite échelle contenue dans le modèle. Les expériences (consulter par exemple [21]) montrent que pour un schéma de type volumes finis non-adapté *split* ou non, les solutions sont très sensibles à la variation de γ : il existe une valeur critique $\gamma_{cr} > 1$ telle que la solution numérique bifurque de l'état physique à non-physique. La valeur de γ_{cr} est une propriété de la méthode. Nous devons préciser ici que presque aucune méthode à ce jour ne se montre insensible aux changements d'échelles, à moins d'avoir subi des modifications à cet effet.

Pour K_0 , q_0 et $U_0 = (u_0, \rho_0, p_0, E_0)$ fixés de sorte que la solution soit composée d'une détonation forte, on résout numériquement en faisant varier γ :

Pour $\gamma < 1$ (approche résolue), on observe bien le profil prédit par la théorie ZND (même profil pour la pression et la densité, et pour la fraction de masse que ceux illustrés à la figure 1.7).

Lorsque $1 < \gamma < \gamma_{cr}$, mais très proche l'un de l'autre, on observe le profil monotone (comme, par exemple, celui illustré à la figure 2.2).

Finalement, pour $\gamma \geq \gamma_{cr}$, on a le profil en escalier (discuté à la section 2.3).

Dans le dernier cas, la vitesse $s^* > s$ de l'onde de combustion (encore une détonation faible) est dépendante des dimensions du maillage, $s^* \propto \Delta x / \Delta t$. Cette vitesse est forcément non-physique et on peut conclure que ce comportement est induit par un mauvais traitement numérique.

A') $\gamma < \gamma_{cr}$	Détonation forte $(U_R, 1) \xrightarrow{s} (U_L, 0)$
B') $\gamma = \gamma_{cr}$	Détonation faible $(U_R, 1) \xrightarrow{s^*} (U_L, 0)$
C') $\gamma > \gamma_{cr}$	Détonation faible $(U_R, 1) \xrightarrow{s^*} (U_L^*, 0)$

TAB. 2.1. Type de solution obtenue lors d'une simulation numérique typique avec discrétisation γ .

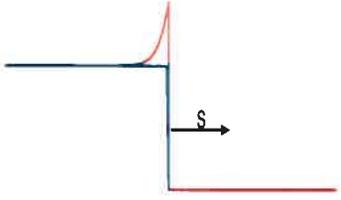
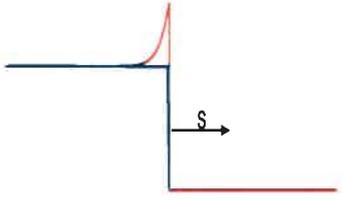
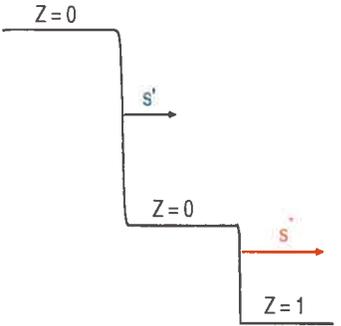
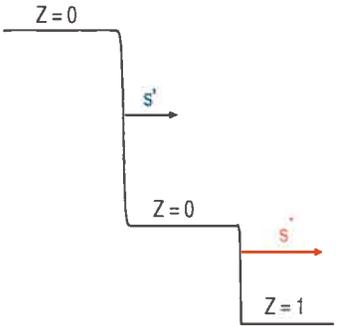
De plus, les expériences laissent supposer qu'il existe un $\gamma_{sp} < \gamma_{cr}$ tel que lorsque $\gamma < \gamma_{sp}$ le profil contient le pic de von Neumann (non-monotone) et pour $\gamma_{sp} < \gamma < \gamma_{cr}$, on obtient le profil monotone associé lui aussi à la vitesse physique s .

Le tableau récapitulatif 2.2 compare les solutions numériques obtenues avec les équations d'Euler réactives et celles obtenues avec les équations visqueuses de Navier-Stokes réactives.

2.5.1. Solution non-physique

La solution non-physique que nous observons lors d'une simulation sous-réolue est constituée d'une onde de combustion brûlant entièrement le gaz suivie d'un choc, l'onde de combustion se propageant plus rapidement que le choc.

Appelons A_0 l'état initial, A^* l'état intermédiaire brûlé et A' l'état final, de plus posons s^* la vitesse de l'onde de combustion séparant A_0 de A^* et s' la vitesse du choc séparant l'état intermédiaire A^* de l'état final A' ($s' = [F(U)]_{A^*..A'} / [U]_{A^*..A'}$). Comme d'habitude, appelons s la vitesse de l'onde de combustion de la solution physique. Nous observons que $s' < s < s^*$ (démontré dans [21], pour le modèle simplifié).

	Navier-Stokes Réactives (solution analytique)	Euler Réactives (solution numérique)
Solutions avec détonation forte	<p>Solution physique</p> <p>Profils : -Non monotone -Monotone</p> 	<p>Solution physique</p> <p>Obtenu avec un maillage résolu : $\gamma \leq \gamma_{cr}$</p> <p>Profils : -Non monotone ($\gamma < \gamma_{cr}$) -Monotone ($\gamma \cong \gamma_{cr}$)</p> 
↕ Transition ↕	Variation de q_0 et/ou K_0	Variation de γ
Solutions avec détonation faible	<p>Solution physique</p> <p>s^* : vitesse de propagation de la détonation faible s' : vitesse de propagation du choc non-réactif</p> $s' = \frac{[f(u)]}{[u]}$ 	<p>Solution non-physique</p> <p>Obtenu avec un maillage sous-résolu : $\gamma > \gamma_{cr}$</p> <p>s^* : vitesse de propagation de la détonation faible s' : vitesse de propagation du choc non-réactif</p> $s' = \frac{[f(u)]}{[u]}$ 

TAB. 2.2. Tableau récapitulatif des solutions analytiques et numériques pour les modèles visqueux et non-visqueux, respectivement.

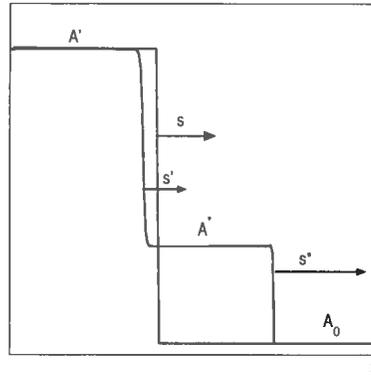


FIG. 2.7. Profil de pression non-physique en noir et physique en bleu.

L'onde de combustion reliant A_0 à A^* est une détonation, car $p_0 < p^*$ (le cas contraire aurait été une déflagration). Il s'agit maintenant de déterminer la nature de la détonation. Pour ce faire, il suffit déterminer si l'état final A^* est sous, sur ou dessus du point de tangence entre la courbe de Crussard et la droite de Rayleigh associée à s^* . Dans ces circonstances, la détonation sera respectivement faible, CJ ou forte.

Les effets nuisibles de la diffusion sur la solution peuvent être analysés sous l'angle des courbes de Crussard et Hugoniot et d'après nos observations, nous postulons que la structure de la solution non-physique se présente comme suit (voir la figure 2.8). La première figure représente la courbe de Crussard (en rouge) des états brûlés pouvant être associés à A_0 . La droite de Rayleigh R (en noir) est associée à la vitesse physique s et son intersection avec la courbe de Crussard C est l'état final A' obtenu après le passage d'une détonation forte. Cette structure représente la solution physique. Sur la même figure, la droite de Rayleigh R^* (en vert), est associée à la vitesse non-physique $s^* > s$. Elle coupe la courbe de Crussard avec centre A_0 en A^* , l'état intermédiaire de la solution non-physique. En A^* , la réaction chimique est terminée et tout le gaz est brûlé (voir le profil de Z à la figure 2.7). La position de l'état brûlé A^* , sur la courbe C , montre bien que la détonation reliant A_0 à cet état est bien une détonation faible. En effet, A^* est situé sous le point de tangence entre R^* et C .

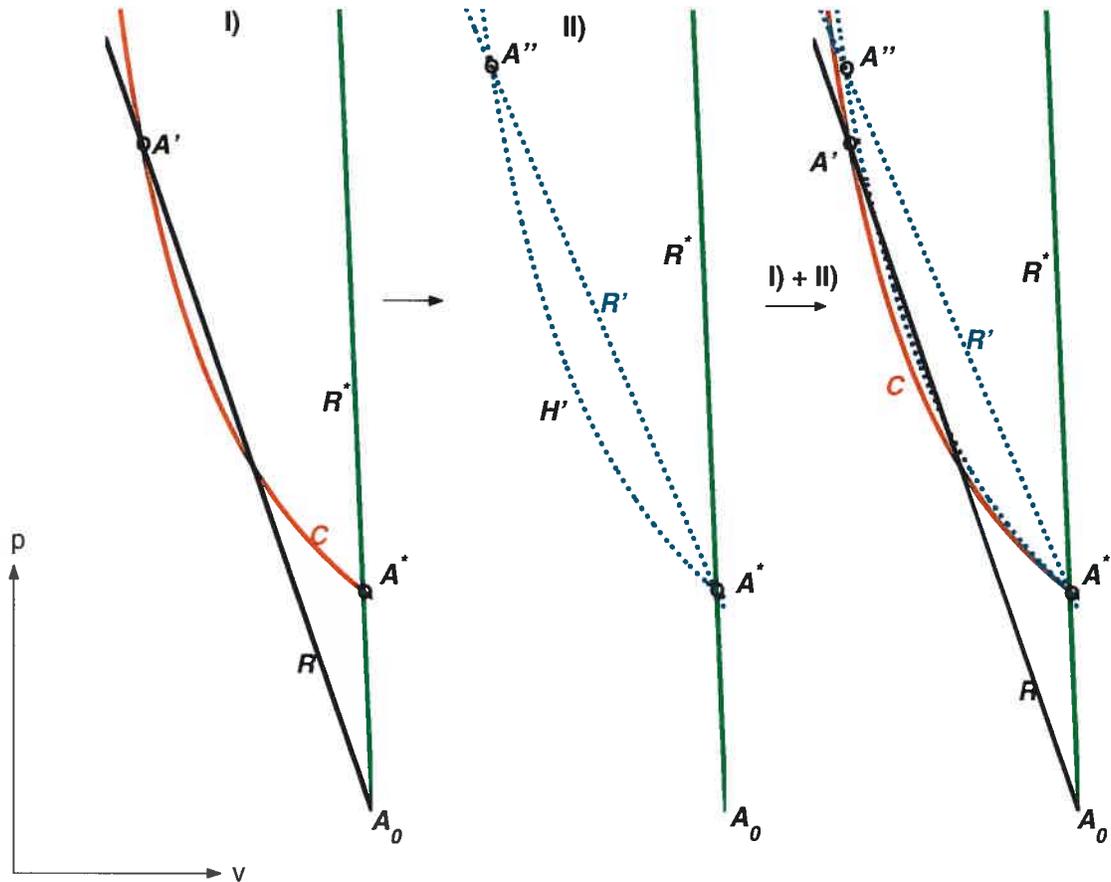


FIG. 2.8. Structure de la solution faible non-physique : une détonation faible suivie d'un choc.

Nous avons observé préalablement qu'un choc non-réactif se propageant à la vitesse s' traverse l'état A^* . Ceci se traduit simplement, dans notre structure de courbes, en la droite de Rayleigh R' , associée à la vitesse s' , coupant la courbe de Hugoniot H' (toutes deux en bleu à la figure II de 2.8) avec centre A^* au point A'' . Remarquons qu'à l'état A'' nous avons $p'' > p'$ et $v'' < v'$ (où p est la pression du gaz et v son volume spécifique). Cette observation est cohérente avec les résultats observés. En effet, pour plusieurs expériences avec maillages grossiers, l'état post-choc diffère légèrement de l'état final, loin derrière le choc. On peut voir des exemples de l'existence de l'état intermédiaire A'' dans [6] et [41], entre autres. À notre connaissance, la présence de cet état intermédiaire n'avait encore jamais été documentée.

Les courbes de la figure 2.8 proviennent d'un exemple tiré de de la thèse de Berkenbosch [7], page 144. La pression prédite en A'' par le modèle des courbes diffère de 1% de la pression observée par la simulation numérique (voir la figure 2.9). Cette légère erreur est due au manque de précision lors de l'évaluation de la vitesse de propagation de la détonation faible.

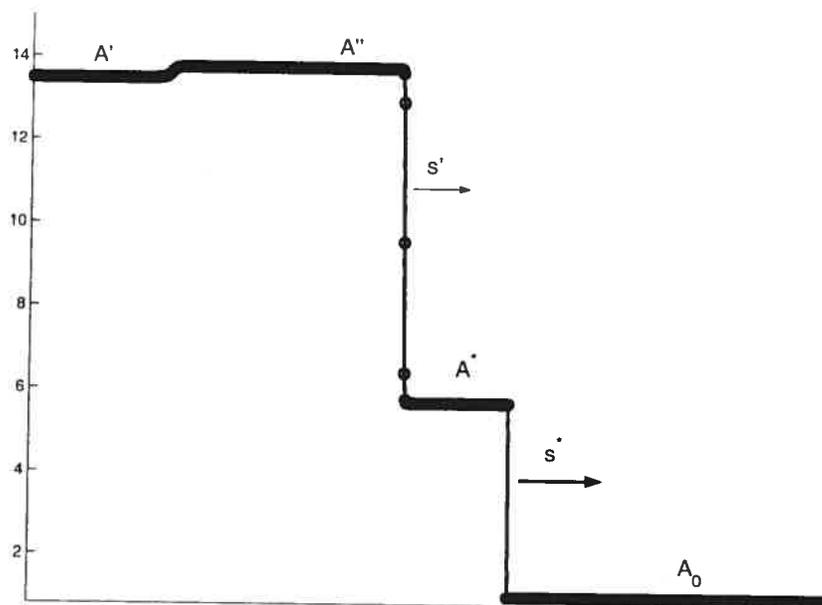


FIG. 2.9. La solution non-physique obtenue avec une méthode sous-résolue se décompose en une détonation faible suivie d'un choc non-réactif. L'état A' est relié à A'' par une raréfaction.

2.5.2. Solution physique : Bonne vitesse de propagation

Soit $\mathcal{S} = \{x \in \mathbb{R}^+ \mid x > L_{1/2}\}$, il existe un domaine $\mathcal{P} \subseteq \mathcal{S}$, variant selon la méthode conservative utilisée, tel que lorsque le pas d'espace $\Delta x \in \mathcal{P}$, la solution numérique se propage à la vitesse physique. Notre objectif est de développer une méthode où $\mathcal{P} = \mathcal{S}$, mais d'abord concentrons nous sur le sens mathématique d'une solution sous-résolue se propageant à la vitesse physique (c'est-à-dire $\Delta x \in \mathcal{P}$).

Étant donné que l'on considère une simulation sous-résolue, il est impossible de capter les détails de la zone de réaction : la solution observée se résume à une discontinuité se propageant à la vitesse s (voir la figure (2.10)). Le schéma

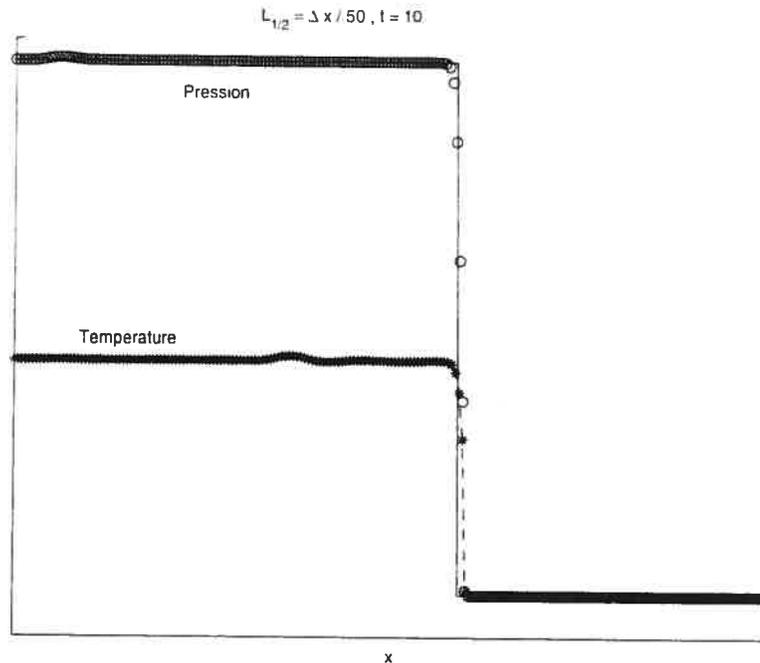


FIG. 2.10. Profils de la pression et de la température évoluant à la vitesse physique, pour une simulation sous-résolue : $\Delta x \in \mathcal{P}$

étant conservatif, la solution observée est forcément une solution mathématique faible : il existe une onde connectant l'état non-brûlé A_0 à l'état brûlé A' . On peut faire ici le parallèle entre la solution détaillée obtenue avec un maillage résolu et celle obtenue avec $\Delta x \in \mathcal{P}$ et la solution mathématique décrite par la théorie ZND et celle de Chapman-Jouguet. En effet, la solution monotone obtenue avec $\Delta x \in \mathcal{P}$ est celle décrite par le modèle de Chapman-Jouguet, i.e. le taux de réaction est infini. Nous avons vu au chapitre 1 que cette solution est bien mathématique, malgré que la combustion est considérée comme instantanée. C'est pour cette raison que nous accepterons la solution numérique monotone comme une solution physique, car nous interprétons le manque d'information causée par la grossièreté du maillage, comme étant l'équivalent de l'hypothèse que les deux états sont reliés par une seule onde de combustion (taux de réaction infini). De la même façon, la solution numérique détaillée est l'équivalent de la théorie ZND, en ce sens qu'elle nous permet de "voir" ce qui se passe au cours de la combustion.

On peut établir ici un lien entre la solution monotone et celle falsifiée par la

viscosité numérique. Pour $\Delta x \in \mathcal{S} \cap \mathcal{P}^C$ (où C indique le complément), la vitesse de propagation de l'onde de combustion augmente artificiellement dû à la diffusion numérique. Ceci se traduit par une augmentation en valeur absolue de la pente de la droite de Rayleigh partant de A_0 (voir figure (2.11)). Cette structure n'est pas une solution mathématique possible car la vitesse s^* est induite par le schéma. Nous retrouvons toutefois la structure non physique détaillée à la section précédente.

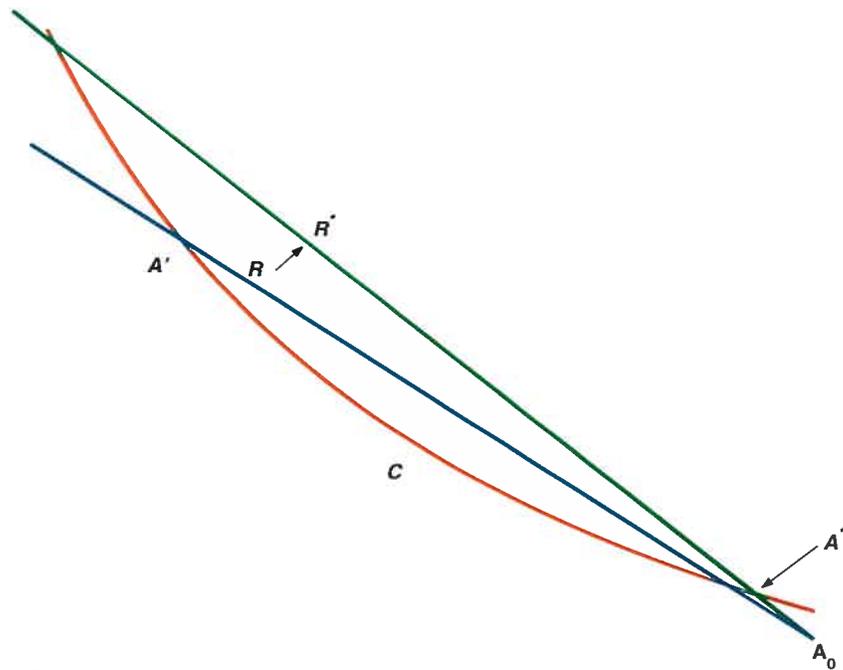


FIG. 2.11. Augmentation de la vitesse de l'onde de combustion de s à s^* .

2.6. LIEN ENTRE LES DÉTONATIONS FAIBLES PHYSIQUES ET NON-PHYSIQUES

Il existe clairement un parallèle entre le comportement de la solution numérique des équations d'Euler réactives et de celles de Navier-Stokes (2.2.1).

Il est bien connu que la capture des discontinuités n'est jamais parfaite : la viscosité numérique introduite par la méthode étale le choc sur plus d'une cellule. Cette viscosité numérique mesure à quel point la méthode approximerait mieux la

version visqueuse du système. ou en d'autres mots, la viscosité numérique pour les équations non-visqueuses joue un rôle semblable à celui de la viscosité physique pour les mêmes équations, mais visqueuses. À ce point, on ne peut s'empêcher de songer aux équations de Navier-Stokes, qui constituent la version visqueuse des équations d'Euler.

Sachant que la viscosité numérique est d'ordre $\mathcal{O}((\Delta x)^n)$, où n varie selon la méthode, une augmentation d'échelle spatiale (se traduisant par une augmentation de γ , où $\Delta x = \gamma L_{1/2}$) augmente la viscosité numérique. Augmenter la viscosité numérique lors de la résolution des équations d'Euler réactives a, en quelque sorte, des conséquences équivalentes à augmenter la viscosité physique lors de la résolution numérique des équations de Navier-Stokes réactives.

Pour bien saisir le parallèle, il est sage de retourner au modèle simplifié (2.3.1) de la section 2.3 de ce chapitre. Rappelons nous que le type d'onde de détonation constituant la solution de ce système est sensible aux variations de K_0 et de q_0 . Ainsi, une augmentation suffisante de K_0 provoque le passage de la détonation forte à faible, avec la possibilité d'existence d'un profil monotone pour la détonation forte. Le taux de réaction est directement proportionnel à la constante β , un amalgame de la viscosité, la diffusion et de la conduction de la chaleur : $K_0 = \beta K$. Ainsi, une augmentation suffisante de la viscosité du système a comme conséquence directe la bifurcation du profil de détonation.

Tel que discuté à la section 2.4, la version complète du système réduit (2.3.1) réagit de façon qualitativement semblable, c'est-à-dire qu'on retrouve la même dépendance de la nature de l'onde de détonation par rapport au taux de réaction et aussi la même dépendance implicite du taux de réaction par rapport à la viscosité. Tout ceci suppose que les simulations pour le système complet visqueux sont faites à suffisamment fine échelle pour entièrement capter les effets de la viscosité et de la diffusion. Il est maintenant clair que la viscosité numérique imite le comportement de la viscosité physique.

2.6.1. Limite de la viscosité dissipante

En considérant encore une fois le modèle simplifié et le diagramme (2.6), on voit que lorsque la viscosité tend vers zéro ($K_0 \rightarrow 0$), le profil tend vers celui de la détonation forte non-monotone. Parallèlement, la limite de la viscosité évanescante (*vanishing viscosity*) pour les équations de Navier-Stokes réactives est celle prédite par la théorie ZND. Ceci reste vrai pour une réaction très raide (à la limite de la chimie raide). Dans le cas de la simulation sous-résolue d'un cas raide, la solution des équations d'Euler réactives (contenant une détonation faible) et la limite de la viscosité diminuante pour Navier-Stokes réactives ne coïncident pas. Or, on sait que l'unique solution entropique d'un système hyperbolique de lois de conservation est celle de la viscosité évanescante [37], d'où la nature non-physique des solutions sous-résolues des équations d'Euler réactives.

Chapitre 3

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE : LES APPROCHES SOUS-RÉSOLUES

Nous avons vu au chapitre précédent que la viscosité numérique était l'un des responsables de la bifurcation des schémas vers la solution non-physique. Nous tenterons donc d'élaborer une approche sous-résolue pour résoudre les détonations raides en suivant cette ligne directrice. Nous passerons préalablement en revue les principales approches développées précédemment dans le but d'éviter les solutions falsifiées par le mauvais traitement numérique. Cette revue permettra, en autres choses, de motiver l'approche choisie.

3.1. RAFFINEMENT DU MAILLAGE

Il est bien connu que, pour un schéma avec séparation d'opérateurs (méthode des pas fractionnaires), le raffinement du maillage est suffisant pour obtenir la solution physique [21]. Les observations pour les schémas sans séparation d'opérateurs mènent aux mêmes conclusions [9], ce qui souligne la nature numérique de ce comportement.

Les méthodes de capture de discontinuités (*front tracking*) avec affinage du maillage (*mesh refinement*) au voisinage du front (nous référons au travail de A. Bourlioux [12, 13, 14]) sont élaborées suivant cette idée.

3.2. DÉDUCTIONS DU MODÈLE VISQUEUX

Nous avons vu au chapitre précédent que pour le modèle visqueux (simplifié et complet), la solution contenant une détonation faible tend vers celle constituée de la détonation forte, à mesure que l'on diminue la viscosité.

C'est sur cet argument que Colella et al. [21], pour le modèle simplifié, et Pember [63], pour le système complet, fondent leurs méthodes : ils s'assurent que la température d'ignition soit supérieure à la température atteinte après le passage de la détonation faible. De cette façon, ils brisent la condition nécessaire d'existence des détonations faibles physiques (voir la fin des sections 2.3 et 2.4 du chapitre précédent), empêchant ainsi la formation de l'onde non-physique numérique.

De plus, il est très intuitif de croire qu'une augmentation suffisante de la température d'ignition permet de rendre inoffensif l'aplanissement du choc causé par la viscosité numérique. En effet, si la température d'ignition est haute, il faudra que la pression devant le choc soit élevée pour déclencher une réaction chimique, ce qui est moins fréquent.

Berkenbosch et ses collègues [7, 8] ont relaxé certaines des conditions trouvées par Pember, de façon à fixer un intervalle optimal pour la température d'ignition (pour le modèle simplifié et complet).

Pour ne pas se restreindre à une plage limitée de problèmes, nous voudrions néanmoins développer une approche permettant toutes les valeurs possibles de température d'ignition.

3.3. TECHNIQUES DE LIMITATION

L'aplanissement du choc perturbe les variables thermodynamiques dans les cellules devant le front. Pour empêcher l'ignition prématurée du gaz contenu dans ces cellules, Engquist et Sjogreen [30] proposent une méthode de projection de la température. L'idée est de remplacer la température des cellules à risque par

celle de quelques cellules devant le front.

Bao et Jin [6], pour leur part, remplacent la température d'ignition par une suite aléatoire uniformément distribuée. Cette stratégie est limitée au cas de la chimie d'ignition seulement.

Oran et Boris [60] proposent une autre projection de température, similaire à celle de Engquist et Sjogreen. Ces mêmes auteurs suggèrent aussi de limiter la quantité d'énergie libérée dans une cellule, à chaque pas de temps.

Dans le même ordre d'idée, Helzel et ses collègues [40, 41] utilisent la solution du problème de Riemann pour les équations d'Euler (non-réactives) pour déterminer dans quelles cellules le gaz peut brûler. En effet, sachant que le gaz peut brûler seulement après le choc non-réactif, il suffit de le localiser à chaque pas de temps.

3.4. VISCOSITÉ NUMÉRIQUE

Tel que mentionné plus haut, la diffusion ajoutée artificiellement au modèle par les schémas numériques causent beaucoup de dommages lors de la capture d'une détonation raide. La capture nette des chocs et des discontinuités de contact constitue de plus un sujet de recherche ouvert. À la lumière de ces deux faits, il est justifié de vouloir développer des méthodes numériques visant la diminution de la viscosité numérique pour l'approximation des détonations raides.

Il a été observé par Colella et al. [21] que les méthodes de pas fractionnaires, utilisant un schéma de Glimm pour la résolution du système homogène, performant très bien en régime sous-résolu. Les méthodes de Glimm, introduites par Chorin (pour le contexte des termes de source) [19], basées sur un résultat de convergence de Glimm [36], ont comme principale propriété de capter les discontinuités avec zéro point intermédiaire. Ces méthodes, utilisant la solution exacte du problème de Riemann à une position aléatoire dans chaque cellule, ne sont

malheureusement pas développées à ce jour en deux et trois dimensions spatiales [20].

3.4.1. Notre approche

Notre objectif est développer des méthodes numériques sous-résolues convergeant vers l'unique solution physique lors de la résolution des équations d'Euler réactives. Ces méthodes doivent bien sur être efficaces en régime résolu. Le chemin choisi pour atteindre cet objectif est celui de la minimisation de la viscosité numérique.

3.4.1.1. *Bonne capture des discontinuités*

Nous nous fixons comme contrainte supplémentaire d'obtenir une capture bien nette des discontinuités. Un ordre de précision élevé ne garantit pas une capture précise des discontinuités, car le schéma retombe toujours au plus à l'ordre un dans le voisinage de la discontinuité. C'est pourquoi cette propriété est très recherchée, en particulier lors de simulations multi-dimensionnelles et dans les cas de géométries complexes. Nous tenons toutefois à maintenir l'ordre deux dans les régions continues.

3.4.1.2. *Évitement des Solveurs de Riemann*

Nous nous fixons comme autre contrainte, l'évitement de la résolution du problème de Riemann aux interfaces des cellules. Cette contrainte aura comme impact d'agrandir le champ d'applications des méthodes. En effet, la solution du problème de Riemann n'est pas connue explicitement pour tous les problèmes et son approximation peut être un processus très lourd. Il vaut donc mieux l'éviter.

3.4.1.3. *Ouverture à d'autres cas test*

Ceci nous amène à la dernière contrainte, celle d'avoir une famille de méthodes applicables à d'autres problèmes hyperboliques avec termes de source, raide ou non. Ainsi, cette thèse explorera les limites de l'approche dite boîte noire dans le contexte des systèmes hyperboliques non-homogènes. avec comme application ultime la détonation.

Chapitre 4

APPROXIMATION NUMÉRIQUE DE SYSTÈMES DE LOIS DE CONSERVATION AVEC TERME DE SOURCE RAIDE

Ce chapitre présente chacun des outils utilisés pour notre approximation de systèmes hyperboliques avec terme de source raide. La somme de ces outils a la propriété d'être modulaire, c'est-à-dire qu'ils peuvent être utilisés séparément ou en sous-groupe.

4.1. MÉTHODES DE VOLUMES FINIS POUR SYSTÈMES DE LOIS DE CONSERVATIONS HOMOGENES

L'approche globale choisie ici est celle des pas fractionnaires (*splitting*). Nous justifierons notre choix à la section 4.2. Pour l'instant, nous nous contenterons d'accepter qu'elle est la plus facile à mettre en oeuvre et qu'elle possède un plus grand potentiel modulaire que l'approche directe (*unsplit*). La séparation d'opérateurs, comme son nom l'indique, consiste à séparer la résolution du système hyperbolique homogène de la résolution du système d'équations aux dérivées ordinaires sous-jacent. La présente section est donc consacrée à la résolution numérique du système homogène. Pour alléger l'écriture, nous avons choisi d'exposer la théorie en une dimension spatiale. L'extension en dimensions supérieures est, du moins en théorie, assez naturelle.

4.1.1. Systèmes de lois de conservations

On exprime les lois de conservation sous leur forme intégrale :

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t) dx = f(u(x_{j-1/2}, t)) - f(u(x_{j+1/2}, t)) \quad (4.1.1)$$

avec $u(x, t) : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^p$, le vecteur de p quantités conservées et $f(u) : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^p$ le vecteur de flux. Cette équation se traduit par : le taux de variation des p quantités de u égale le flux net à travers les frontières $x_{j-1/2}$ et $x_{j+1/2}$.

En supposant que u est différentiable par rapport à (x, t) et f par rapport à u , on peut intégrer (4.1.1) sur un domaine quelconque et obtenir la forme différentielle des lois de conservation [37] :

$$u_t + f(u)_x = 0. \quad (4.1.2)$$

On qualifie le système d'équations (4.1.2) d'*hyperbolique* si la matrice Jacobienne du flux ne possède que des valeurs propres réelles $\lambda_1, \dots, \lambda_p$, et admet un système complet de vecteurs propres $\{R_1, \dots, R_p\}$ linéairement indépendants.

Un système de lois de conservation avec terme de source a la forme :

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t) dx = f(u(x_{j-1/2}, t)) - f(u(x_{j+1/2}, t)) + \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} g(u(x, t)) dx, \quad (4.1.3)$$

où $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^p$ est le vecteur de source. L'ajout de ce terme de source (ou puits) se traduit ainsi : un processus supplémentaire est impliqué, causant la perte ou le gain de matière u dans le domaine $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$.

4.1.2. Volumes finis : approche classique

Les méthodes de volumes finis sont connues pour fournir la capture la plus efficace des discontinuités et c'est pour cette raison que ces méthodes sont les plus populaires pour la résolution des détonations. En comparaison, les méthodes standard de différences finies sont reconnues pour être peu efficaces aux abords des discontinuités et peuvent même parfois conduire à des solutions complètement erronées. En effet, les schémas de différences finies ont tendance à produire des oscillations non-physiques autour des discontinuités.

Un schéma de différences finies approxime la solution en chaque point du maillage choisi de l'espace-temps (x_j, t^n) :

$$u_j^n \simeq u(x_j, t^n)$$

avec

$$u_j^0 = u_0(x_j).$$

Le domaine spatial d'une méthode de type volumes finis est divisé en cellules C_i de centre x_i et c'est la moyenne de la solution qui est approximée à chaque pas de temps sur ces cellules :

$$\bar{u}_j^n = \frac{1}{\text{vol}(C_j)} \int_{C_j} u(x, t^n) dx$$

avec

$$\bar{u}_j^0 = \frac{1}{\text{vol}(C_j)} \int_{C_j} u_0(x) dx,$$

où la notation $\text{vol}(C_j)$ signifie longueur, aire ou volume de C_j .

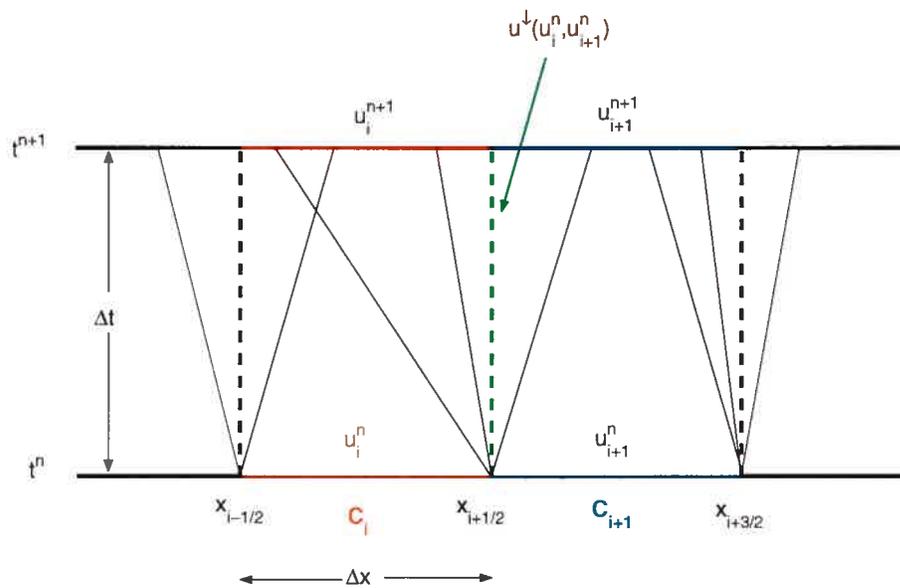


FIG. 4.1. Problèmes de Riemann aux interfaces de la cellule C_i (en une dimension).

Intégrons l'équation de conservation (4.1.1) sur l'intervalle $[t^n, t^{n+1}]$:

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t^n) dx = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j-1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt.$$

En isolant le terme en t^{n+1} et en divisant par Δx , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t^{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t^n) dx \\ &- \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j-1/2}, t)) dt \right]. \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

Les méthodes de volumes finis classiques comportent trois étapes :

- (1) Reconstruction
- (2) Évolution
- (3) Moyenne.

La première étape consiste à reconstruire une fonction polynomiale par morceaux $\tilde{u}(x, t^n)$ à partir des moyennes \bar{u}_j^n sur chaque cellule. Dans le plus simple des cas, on aura une fonction constante par morceaux : $\tilde{u}(x, t^n) = \bar{u}_j^n$, pour tout x dans C_j . Cette reconstruction mène au schéma de Godunov. La deuxième étape est illustrée par l'équation exacte (4.1.4), à la différence que les valeurs exactes sont remplacées par les reconstructions $\tilde{u}(x, t^n)$. Finalement, la dernière étape consiste simplement à définir la moyenne sur la cellule au temps t^{n+1} :

$$\bar{u}_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{u}(x, t^{n+1}) dx.$$

L'opération la plus délicate est toutefois celle de la construction des flux numériques. Le flux numérique est la valeur approchée ou exacte de

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt. \quad (4.1.5)$$

Les méthodes de volumes finis classiques supposent la résolution du problème de Riemann aux interfaces des cellules. À chaque pas de temps, la valeur du flux aux bords de la cellule C_j doit être connue :

$$f(u(x, t)) \Big|_{x \in \partial C_j}^{t \in [t^n, t^{n+1}]} \quad (4.1.6)$$

ou, suivant la notation de LeVeque [49],

$$f(u^l(\bar{u}_{j-1}^n, \bar{u}_j^n))$$

avec

$$u^*(\bar{u}_G, \bar{u}_D)$$

désignant la solution du problème de Riemann entre les états \bar{u}_D et \bar{u}_G évalué le long de $x/t = 0$, tel qu'illustré à la figure 4.1.

Voici en vrac les propriétés fondamentales des méthodes de volumes finis.

4.1.2.1. *Stabilité*

Si on veut que la solution numérique converge vers la solution analytique, le schéma doit pouvoir détecter les changements au niveau des données initiales. Pour cela, le domaine de dépendance du schéma doit absolument contenir entièrement le domaine de dépendance théorique. On doit donc imposer que la distance maximale parcourue, pendant Δt , par l'onde la plus rapide soit inférieure à Δx (voir la figure 4.1). En d'autres mots, les dimensions Δt et Δx doivent respecter la condition nécessaire

$$\max_{i,j} |\lambda_j^i| \leq \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

où $\max_{i,j} |\lambda_j^i|$ est la vitesse maximale des ondes émergeant de tous les points du domaine, ou en d'autres termes, la valeur maximale des valeurs propres de la matrice Jacobienne du flux f de dimension p ($i \in [1, p]$), évaluée aux cellules j . On appelle le *nombre CFL* (pour Courant, Friedrichs et Lewy, les premiers à avoir énoncé cette condition [23]), la quantité B telle que

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_{i,j} |\lambda_j^i| \leq B. \quad (4.1.7)$$

La condition CFL est nécessaire à la convergence et à la stabilité d'un schéma.

La stabilité numérique est la propriété qu'a une méthode numérique de fournir des résultats stables (donc bornés) lorsque la solution exacte l'est. La façon classique de déterminer les conditions sous laquelle une méthode est stable est l'analyse de von Neumann. Pour plus de détails sur cette technique, consulter

[77]. Lorsqu'une méthode n'est pas inconditionnellement instable, elle peut passer d'instable à stable en ajustant la dimension des pas d'espace et de temps. Ainsi, le nombre CFL est fixé de façon à ce que la méthode utilisée soit stable lorsque (4.1.7) est respectée.

Un schéma est *convergent à l'ordre (p, q)* s'il existe une norme $\|\cdot\|$, telle que

$$\|u(x, t^n) - \bar{u}^n\| = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q).$$

De façon générale, on utilise le théorème d'équivalence de Lax pour déterminer la convergence d'une méthode.

Théorème 4.1.1. *Pour un problème bien posé, un schéma est compatible d'ordre (p, q) + stable \Leftrightarrow convergent à l'ordre (p, q) .*

Voir [67] ou [77] pour la preuve complète.

Par *compatibilité*, on veut dire que l'erreur de troncature locale τ_j^n est telle que $\lim_{(\Delta t, \Delta x) \rightarrow 0} \tau_j^n = 0$, ou en d'autres termes, que la solution exacte est en défaut de satisfaire le schéma d'une quantité $\tau_j^n = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q)$.

4.1.2.2. Conservation et Compatibilité

La solution d'un système hyperbolique peut être discontinue, c'est-à-dire que la solution peut contenir des chocs ou des discontinuités de contact et cela, même pour des conditions initiales $u(x, t = 0) = u_0(x)$ continues. Nous devons, dans ce cas, relaxer les conditions de dérivabilité et nous contenter de *solutions faibles* [37], en général non uniques. La forme différentielle (4.1.2) est donc maintenant valide seulement dans les régions où u est continue. La forme intégrale (4.1.1) est cependant encore valide partout. C'est d'ailleurs à partir de cette forme qu'on établit les conditions de saut de Rankine et Hugoniot [37, 49, 75].

Une propriété fondamentale des schémas approximant la solution de systèmes

de lois de conservation est bien sûr la *conservation* des quantités : la matière doit être conservée pour chacune des cellules C_j . Pour ce faire, le schéma doit être construit à partir de la forme intégrale des lois de conservation (4.1.1) et non de sa forme différentielle (4.1.2). On comprend que si ce n'était pas le cas, le schéma serait fiable pour les solutions continues, mais risquerait de converger vers une solution erronée pour les cas discontinus. Une condition nécessaire à la convergence est donc la conservation.

Un tel schéma doit s'écrire sous la *forme conservative*, découlant directement de l'équation de conservation exacte (4.1.4)

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{j+1/2} - f_{j-1/2}), \quad (4.1.8)$$

où $f_{j+1/2}$ est le flux numérique approximant le flux à l'interface $j + 1/2$ (approximation de (4.1.5)). On dit que le flux numérique est *compatible* si, évalué entre deux états constants égaux, il renvoie la valeur exacte du flux physique de cet état constant : $f_{j+1/2}(u, u) = f(u)$. On dit d'un schéma qu'il est conservatif s'il peut s'écrire sous la forme conservative et si ses flux sont compatibles.

4.1.2.3. Ordre supérieur

L'étape clef pour augmenter la précision spatiale d'une méthode de volumes finis est la reconstruction. Pour faire mieux que l'ordre un, nous devons utiliser une fonction plus adéquate que la constante par morceaux : une fonction linéaire par morceaux .

Pour $x \in C_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$, considérons le polynôme :

$$\tilde{u}(x, t^n) = \bar{u}_j^n + \delta_j^n (x - x_j), \quad (4.1.9)$$

où δ_j^n est une pente dans la cellule C_j . La fonction (4.1.9) est construite de façon à ce que sa moyenne sur la cellule C_j soit \bar{u}_j^n , peu importe le choix de la pente :

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{u}(x, t^n) dx = \bar{u}_j^n.$$

L'ordre deux (ou même plus) est ainsi atteint par un choix judicieux de la pente. Malheureusement, une pente non-nulle aux abords d'une discontinuité introduit des oscillations non-physiques. Nous devons donc faire le compromis d'avoir l'ordre deux (ou plus) dans les régions continues et de se contenter de l'ordre un au voisinage des discontinuités. Les méthodes, basées sur une reconstruction avec une pente ayant la propriété de s'annuler dans le voisinage d'une discontinuité et de garantir l'ordre deux (ou plus) ailleurs, sont appelées méthodes de limitation de la pente (*slope-limiter*) ou reconstructions de type MUSCL, introduites par van Leer [80, 81, 82, 83, 84].

Pour limiter la pente, il faut d'abord pouvoir mesurer les oscillations. Pour cela, nous devons introduire le concept de *variation totale* :

$$TV(u(t)) = \sup \sum_j \|u(x_{j+1}, t) - u(x_j, t)\|,$$

où le sup est pris pour n'importe quelle partition du domaine spatial. Pour une solution classique (continûment dérivable) d'une équation scalaire de conservation, la variation totale (TV) devrait rester constante. S'il y a un choc, elle peut diminuer ; mais en aucun cas elle ne saurait augmenter. D'où l'intérêt des méthodes numériques à *variation totale non croissante* au sens suivant.

Une méthode produisant l'approximation u^{n+1} à partir de n'importe quel ensemble u^n est TVD (Total Variation Diminishing : Variation totale non croissante) si :

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n).$$

Pour faire le lien avec ce qui a été dit plus haut, on peut s'assurer que l'étape de la reconstruction est TVD (donc qu'elle n'introduira pas d'oscillations) et d'ordre supérieur à un, en choisissant un limiteur de pente approprié. Pour obtenir une liste des limiteurs de pente les plus populaires, consulter le livre de LeVeque [49]. Le choix du flux numérique peut parfois introduire des oscillations. De la même façon que lors de la reconstruction, il faut choisir les limiteurs de pentes de sorte que les flux numériques permettent au schéma de rester TVD.

Pour le cas scalaire, la propriété TVD des schémas est très importante, car dans un premier temps, les solutions faibles d'une équation scalaire sont toujours à variation totale non-croissante. Deuxièmement, on peut prouver la compacité des espaces de fonctions TVD, ce qui nous permet de conclure à la stabilité (voir [49]). Pour le cas des systèmes, les solutions faibles ne sont cependant pas obligatoirement TVD. Dans ces conditions, on ne peut pas exiger la propriété TVD d'une méthode numérique pour systèmes hyperboliques. La pratique nous permet de croire qu'il est toutefois essentiel de s'assurer qu'une méthode est TVD pour l'équation de conservation scalaire avant d'en faire l'extension pour les systèmes.

4.1.2.4. *Solution entropique*

Il existe une vaste littérature sur le problème de la non-unicité/unicité des solutions faibles, l'unicité de celle des solutions faibles qui satisfait une condition d'entropie, et sur la convergence des schémas vers cette solution unique. Le livre de Godlewski et Raviart [37] demeure une des meilleures références à ce sujet. Dans le cadre de ce travail, nous nous contenterons d'en parler que de façon qualitative.

La solution d'une équation non-linéaire (scalaire ou système) est appelée solution faible .

On dit que la fonction $u(x, t)$ est une solution faible d'une loi de conservation (4.1.2) avec $u(x, 0)$ comme condition initiale, si

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [u\phi_t + f(u)\phi_x] dx dt = - \int_0^\infty u(x, 0)\phi(x, 0) dx,$$

est vraie pour toute fonction ϕ dans C_0^1 .

Cette solution faible peut contenir des discontinuités et dans ce cas perdre son unicité. Malgré le fait qu'il puisse exister plusieurs solutions faibles pour un seul système d'équations, il n'existe cependant qu'une seule solution ayant le bon sens physique. La nature choisit toujours le chemin le plus facile : l'entropie d'un système fermé doit augmenter ou rester constante. En particulier, pour une solution

continue, l'entropie doit rester constante et elle doit sauter à une valeur plus élevée à travers un choc.

Dans le cas des systèmes, s'assurer qu'un schéma numérique fournit cette unique solution physique s'avère parfois un tour de force. Cette préoccupation est au coeur de la présente recherche. En pratique, le choix de l'unique solution entropique est possible avec une bonne connaissance de la physique du modèle.

4.1.3. Volumes finis : type central

Lors de l'évaluation du flux numérique, la solution du problème de Riemann peut être évaluée exactement ou approximée (plusieurs solveurs très efficaces ont déjà été développés à cette fin). Cependant, pour certaines applications, le problème de Riemann associé est très compliqué et on gagnerait à en éviter la résolution.

Dans ce cas, une option alternative est d'utiliser un schéma de type Lax-Friedrichs,

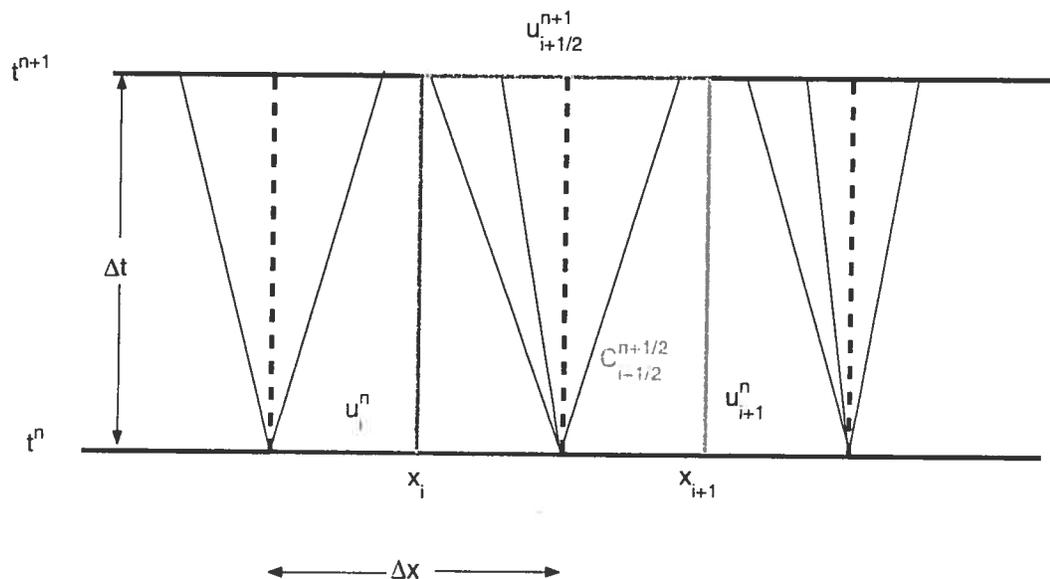


FIG. 4.2. Maillage décalé typique des méthodes de type central

à savoir un schéma de type central, proposé en premier par Nessyahu et Tadmor pour la version unidimensionnelle [59] et par Arminjon et ses collaborateurs pour les versions en dimensions supérieures [4, 5].

En raison de leur simplicité et de leur efficacité prouvée en dimensions un, deux et trois, nous utiliserons ce type de schémas.

Pour alléger l'écriture, nous travaillerons, dans un premier lieu, avec une équation scalaire en une dimension (l'extension aux systèmes est directe) :

$$u_t + f(u)_x = 0. \quad (4.1.10)$$

En utilisant la notation standard

$$\bar{u}_{j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t^{n+1}) dx,$$

et en considérant la forme intégrale de la loi de conservation (4.1.10) sur la cellule $C_{j+1/2}^{n+1/2} := [x_j, x_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$ (voir la figure 4.2), on obtient

$$\bar{u}_{j+1/2}^{n+1} = \bar{u}_{j+1/2}^n + \frac{1}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(f(u(x_j, t)) - f(u(x_{j+1}, t)) \right) dt. \quad (4.1.11)$$

On remarque (voir figure 4.1) que $C_{j+1/2}^{n+1/2}$ est décalée de $\Delta x/2$ par rapport à C_j , déplaçant ainsi le problème de Riemann à l'intérieur du domaine d'intégration. Ce décalage a aussi comme impact d'imposer un nombre CFL inférieur à 1/2. Suivant Nessyahu et Tadmor [59], on reconstruit à chaque pas de temps $t^n = n\Delta t$ une approximation linéaire par morceaux de $u(x_j, t)$

$$L_j(x, t) = u_j(t) + (x - x_j) \frac{u'_j}{\Delta x}, \quad x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2} \quad (4.1.12)$$

où u'_j est une *dérivée numérique* définie par

$$\frac{u'_j}{\Delta x} = u_x(x_j, t) + O(\Delta x).$$

Cette reconstruction nous permet d'obtenir l'ordre deux dans les régions continues.

Ceci nous amène à l'approximation numérique bien connue

$$\begin{aligned}\bar{u}_{j+1/2}^n &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j}^{x_{j+1/2}} L_j(x, t^n) dx + \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j+1/2}}^{x_{j+1}} L_{j+1}(x, t^n) dx \\ &= \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u'_j - u'_{j+1}).\end{aligned}$$

En utilisant la notation

$$F_{j+1/2}(t) = \frac{1}{\Delta x} [f(u(x_j, t)) - f(u(x_{j+1}, t))], \quad (4.1.13)$$

on peut réécrire (4.1.11) comme

$$\bar{u}_{j+1/2}^{n+1} = \bar{u}_{j+1/2}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{j+1/2}(t) dt. \quad (4.1.14)$$

Cette relation est la solution, sur l'intervalle $[t^n, t^{n+1}]$, de l'équation différentielle

$$\left. \frac{d\bar{u}}{dt} \right|_{j+1/2} = F_{j+1/2}(t). \quad (4.1.15)$$

Cette dernière expression est appelée *forme semi-discrète* [62].

La méthode de Nessyahu et Tadmor (NT) [59] est obtenue à l'aide d'une quadrature du point médian d'ordre deux :

$$\begin{aligned}\bar{u}_{j+1/2}^{n+1} &= \bar{u}_{j+1/2}^n + \Delta t F_{j+1/2}(t^{n+1/2}) \\ &= \bar{u}_{j+1/2}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [f(u(x_{j+1}, t^{n+1/2})) - f(u(x_j, t^{n+1/2}))]\end{aligned} \quad (4.1.16)$$

où le prédicteur au temps $t^n + \Delta t/2$ est défini par une projection de Taylor

$$u(x_j, t^{n+1/2}) = u(x_j, t^n) - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\Delta x} f'_j,$$

avec f'_j une dérivée numérique définie par

$$\frac{1}{\Delta x} f'_j = \left. \frac{\partial}{\partial x} f(u(x, t)) \right|_{x=x_j}.$$

Plusieurs autres stratégies de type Runge-Kutta (R-K) ont déjà été développées

(voir par exemple [62]) pour résoudre la forme semi-discrète (4.1.15) :

$$\begin{aligned}\bar{u}_{j+1/2}^{n+k/N} &= \bar{u}_{j+1/2}^n + \frac{k}{N} \Delta t F_{j+1/2}(t^n) \\ \bar{u}_{j+1/2}^{n+1} &= \bar{u}_{j+1/2}^n + \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} \alpha_k F_{j+1/2}(t^{n+k/N}),\end{aligned}\tag{4.1.17}$$

$k = 0, 1, 2, \dots, N$. Cette approche nous permet l'extension à des ordres de précision en temps supérieurs (la précision spatiale est améliorée en augmentant l'ordre du polynôme d'interpolation (4.1.12)). On trouve une revue exhaustive de ces stratégies (et les extensions pour les systèmes de lois d'équilibre (*balance laws*)) dans le rapport de Russo [72].

La version à pas fractionnaires, de l'approche à deux étapes de Pareschi [61], a particulièrement attiré notre attention. Appliquée à un système homogène, cette méthode devient simplement une généralisation du schéma NT. Tandis que cette version conserve toute les bonnes propriétés du schéma NT (2^e ordre de précision, variation totale non croissante, prolongement possible en dimensions supérieures,...), elle permet un degré de liberté supplémentaire, soit la possibilité de choisir la position temporelle du prédicteur. De plus, cette méthode, utilisée dans sa version non homogène, est applicable aux problèmes raides de relaxation.

Résolvons l'équation différentielle ordinaire (4.1.15) à l'aide d'une méthode R-K à deux pas

$$\bar{u}_{j+1/2}^{n+1} = \bar{u}_{j+1/2}^n + \Delta t (\mu F_{j+1/2}(t^n) + \nu F_{j+1/2}(t^{n+\alpha})).\tag{4.1.18}$$

De manière à se concentrer uniquement sur l'intégration en temps, considérons l'analogue de (4.1.18) pour l'équation linéaire $y_t = Ay$:

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t (\mu Ay^n + \nu Ay^{n+\alpha})\tag{4.1.19}$$

avec le pas de prédiction

$$y^{n+\alpha} = y^n + \alpha \Delta t Ay^n.\tag{4.1.20}$$

Pour obtenir le deuxième ordre de précision, nous procédons par la façon classique pour obtenir les paramètres pour une méthode R-K (consulter le chapitre 5 pour

les détails). Nous trouvons ainsi (pour $\alpha \neq 0.1$)

$$1 - \mu = \nu = \frac{1}{2\alpha}.$$

En utilisant (4.1.18) avec la notation (4.1.13) et le prédicteur usuel des schémas de type décalés, on obtient la forme finale (en laissant tomber les barres) :

$$\begin{aligned} u_j^{n+\alpha} &= u_j^n - \lambda \alpha f'_j, \\ u_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u'_j - u'_{j+1}) \\ &\quad + \frac{\lambda}{2\alpha} \left((2\alpha - 1)(f(u_j^n) - f(u_{j+1}^n)) + (f(u_j^{n+\alpha}) - f(u_{j+1}^{n+\alpha})) \right), \end{aligned} \quad (4.1.21)$$

où $\lambda = \Delta t / \Delta x$. On peut voir que cette forme simplifiée pour systèmes homogènes du schéma original décalé de Pareschi (que nous appellerons PC (prédicteur-correcteur)) est une généralisation du schéma NT. En effet, en posant $\alpha = 1/2$, on retrouve la forme (4.1.16).

Le schéma peut être écrit sous sa forme conservative,

$$\begin{aligned} u_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u'_j - u'_{j+1}) \\ &\quad - \lambda \left(\frac{1}{2\alpha} \left((2\alpha - 1)f(u_{j+1}^n) + f(u_{j+1}^{n+\alpha}) \right) - \frac{1}{2\alpha} \left((2\alpha - 1)f(u_j^n) + f(u_j^{n+\alpha}) \right) \right), \end{aligned}$$

où $u_{j+1/2}^{n+1}$ est approximé par $\frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u'_j - u'_{j+1})$. Nous voyons que le flux numérique est compatible. En effet, soit $f_{j+1/2}(u^n, u^{n+\alpha}) = (2\alpha - 1)f(u_{j+1}^n) + f(u_{j+1}^{n+\alpha})$, le flux numérique, on a que $f_{j+1/2}(u, u) = f(u)$. La méthode est bien conservative.

En suivant les mêmes étapes que dans l'article de Nessyahu et Tadmor [59] et en utilisant des dérivées numériques non-oscillatoires de type TVD, on peut voir que la propriété TVD est conservée, sans coût supplémentaire.

4.2. TRAITEMENT DE LA SOURCE

Les équations d'Euler réactives forment un système hyperbolique avec terme de source tel (4.1.3). Il existe deux approches classiques pour résoudre ce type de

problème. La première est la séparation d'opérateurs ou méthodes des pas fractionnaires. dans laquelle on résout le système hyperbolique homogène séparément du système d'équations ordinaires sous-jacent contenant le terme de source. La deuxième approche est la méthode directe, c'est-à-dire sans séparation d'opérateurs.

4.2.1. Méthode directe

La façon directe est la plus pertinente du point de vue physique : elle tient compte du système comme d'un tout, les possibles effets du couplage sont conservés. Cette façon s'avère aussi être la plus délicate à mettre en oeuvre, particulièrement dans le cas de systèmes raides. La présence de plusieurs échelles temporelles dans le système est très contraignante du point de vue de la stabilité. Le pas de temps d'une telle méthode explicite devra être du même ordre de grandeur que l'échelle relative au terme de source. Or, dans le cas de la détonation raide par exemple, l'échelle de temps associée à la réaction chimique est très petite (jusqu'à l'ordre de 10^{-6} fois celle de l'advection du gaz). Ainsi, l'option d'une méthode explicite directe est quasi non envisageable.

Il reste bien sûr les méthodes directes implicites ou semi-implicites. Dans bien des cas, le traitement semi-implicite est suffisant : le terme de source est traité implicitement, tandis que le flux est traité explicitement. Dans le cas de la détonation raide cependant, l'approche directe semi-implicite semble faire bifurquer les schémas vers la solution non-physique plus facilement que dans le cas du traitement de la source implicite pour un contexte à pas fractionnaires. À notre connaissance, aucune étude n'a été effectuée pour comparer les performances des solveurs semi-implicites et implicites à pas fractionnaires (à part celle de Falco-vitz et Ben-Artzi [10], dans un contexte particulier). La raison est bien simple : à notre connaissance, aucun solveur semi-implicite n'est assez robuste en régime sous-résolu pour le cas de la détonation raide. Dans la section 4.2.4.1, nous avons tenté une comparaison, dans le contexte des méthodes PC.

4.2.1.1. *Méthodes de volumes finis directes de type central pour systèmes hyperboliques avec terme de source*

Nous présentons ici, dans les grandes lignes, la construction d'une méthode directe de type central pour système avec un terme de source. Nous référons encore une fois au rapport de Russo pour obtenir plus de détails à propos de cette méthodologie.

En reprenant la forme intégrale d'un système de lois de conservations avec terme de source (4.1.3) sur la cellule $C_{j+1/2}$:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t) dx = f(u(x_j, t)) - f(u(x_{j+1}, t)) + \int_{x_j}^{x_{j+1}} g(u(x, t)) dx,$$

où cette fois $u, f, g : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ sont des scalaires (encore une fois pour simplifier l'écriture).

En intégrant cette équation sur $[t^n, t^{n+1}]$ et en réarrangeant les termes, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t^{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t^n) dx & (4.2.1) \\ &- \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_j, t)) dt \right] \\ &+ \frac{1}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_j}^{x_{j+1}} g(u(x, t)) dx dt. \end{aligned}$$

En utilisant la même notation qu'à la section 4.1.3

$$F_{j+1/2}(t) = \frac{1}{\Delta x} [f(u(x_j, t)) - f(u(x_{j+1}, t))], \quad (4.2.2)$$

$$G_{j+1/2}(t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j}^{x_{j+1}} g(u(x, t)) dx, \quad (4.2.3)$$

on a

$$\bar{u}_{j+1/2}^{n+1} = \bar{u}_{j+1/2}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{j+1/2}(t) dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} G_{j+1/2}(t) dt.$$

Cette dernière équation peut s'exprimer sous la forme semi-discrète

$$\left. \frac{d\bar{u}}{dt} \right|_{j+1/2} = F_{j+1/2}(t) + G_{j+1/2}(t). \quad (4.2.4)$$

Divers schémas très stables de type Runge-Kutta, basés sur une discrétisation implicite de G et explicite de F , ont déjà été élaborés pour résoudre (4.2.4) :

$$\begin{aligned} u_{j+1/2}^{n+k/N} &= u_{j+1/2}^n + \frac{k}{N} \Delta t F_{j+1/2}(t^n) + \frac{k}{N} \Delta t G_{j+1/2}(t^{n+k/N}) \\ u_{j+1/2}^{n+1} &= u_{j+1/2}^n + \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} \alpha_k F_{j+1/2}(t^{n+k/N}) + \Delta t \sum_{k=1}^N \beta_k G_{j+1/2}(t^{n+k/N}). \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

$k = 0, 1, 2, \dots, N$. On gagne cependant à minimiser le nombre d'évaluations implicites (N) [55].

Ici encore, nous choisissons d'illustrer cette approche par l'exemple de la méthode prédicteur-correcteur développée par Pareschi [61] :

$$\begin{aligned} u_j^{n+\alpha} &= u_j^n - \lambda \alpha f_j' + \alpha \Delta t g(u_j^{n+\alpha}) \\ u_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u_j' - u_{j+1}') \\ &+ \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(f(u_j^n) - f(u_{j+1}^n)) + (f(u_j^{n+\alpha}) - f(u_{j+1}^{n+\alpha})) \right] \\ &+ \frac{\Delta t}{2(1-\alpha)} \left[\frac{1}{2}(g(u_j^{n+\alpha}) + g(u_{j+1}^{n+\alpha})) + (1 - 2\alpha)g(u_{j+1/2}^{n+1}) \right]. \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

Encore ici, le choix de $\alpha = 1/3$ est suggéré par Paraschi. Les évaluations implicites de la source peuvent être problématiques. En effet, de façon générale la fonction g n'est pas linéaire, donc les évaluations implicites nécessitent l'emploi d'un solveur non-linéaire, comme par exemple Newton. Nous référons, à ce sujet, au livre de Deuffhard [26], qui traite des solveurs de Newton dans le contexte des systèmes d'équations différentielles et aux dérivées partielles. La pratique nous a cependant amené à nous méfier de l'introduction de tels solveurs dans des algorithmes comme (4.2.6). Nous avons remarqué que cette introduction avait tendance, dans certains cas, à déstabiliser le tout. À notre connaissance, aucune recherche n'a été faite dans ce sens. Les cas classiques de systèmes avec termes de source, pouvant être raides, utilisés pour tester les méthodes directes de type central (voir par exemple [55, 61]) sont les équations de Broadwell et le modèle thermodynamique pour un gaz monoatomique (*extended thermodynamics for a monatomic gas*). Dans les deux cas, la source est linéaire en fonction de u . De plus, la convergence des méthodes algébriques non-linéaires n'étant pas instantanée, elles augmentent de

façon non-négligeable le temps de calcul. Nous croyons donc que l'accord entre le solveur non-linéaire et le schéma direct est la difficulté fondamentale de l'élaboration d'une bonne méthode directe pour les systèmes hyperboliques avec termes de source, en particulier pour la détonation.

Nous avons développé la version en deux dimensions spatiales cartésiennes de l'algorithme (4.2.6), ce qui généralise et complète le travail présenté par Pareschi dans son article. L'algorithme et quelques résultats numériques se trouvent au chapitre suivant.

4.2.2. Séparation d'opérateurs (Méthode des pas fractionnaires)

La méthode de la séparation d'opérateurs est la plus intéressante du point de vue de l'exécution. Elle permet de combiner les schémas les plus efficaces pour traiter les systèmes hyperboliques aux meilleurs solveurs d'équations différentielles ordinaires. De plus, contrairement à la méthode directe, nous évitons la coûteuse inclusion d'un solveur implicite dans un schéma direct. Le terme de source peut être traité implicitement, mais cela à moindre coût, car les flux ne sont pas impliqués.

Les deux méthodes de séparation d'opérateurs les plus populaires sont celles de Godunov et de Strang. Appelons \mathcal{F} (pour le transport du Fluide) un solveur quelconque pour la partie homogène du système

$$u_t + f(u)_x = 0 \tag{4.2.7}$$

et \mathcal{R} (pour la Réaction) un autre solveur quelconque pour le système d'équations différentielles ordinaires sous-jacent :

$$u_t = g(u). \tag{4.2.8}$$

La méthode de Godunov¹ est la plus naturelle.

¹Pour cette section, la méthode de Godunov réfère à la séparation d'opérateurs de Godunov, non à la méthode de volumes finis.

On y résout le système homogène (4.2.7) avec le solveur \mathcal{F} . pour un pas de temps complet Δt , et on résout ensuite le système (4.2.8) avec le solveur \mathcal{R} pour ce même pas de temps Δt . en prenant comme conditions initiales la solution obtenue avec \mathcal{F} . De façon schématisée, le schéma de Godunov s'exprime ainsi

$$u^{n+1} = \mathcal{R}^{\Delta t} \circ \mathcal{F}^{\Delta t} \circ u^n. \quad (4.2.9)$$

La combinaison inverse est aussi possible. Nous verrons à la section 4.2.3 pourquoi nous préférons cet ordre.

La séparation d'opérateur de Godunov est exacte pour des flux et des sources linéaires avec opérateurs commutatifs, c'est-à-dire que l'action de séparer les opérateur n'introduit pas d'erreurs supplémentaires. Dans ces conditions, la précision totale du schéma sera donc la plus basse des deux solveurs.

On peut représenter un système linéaire par

$$u_t = Au_x + Cu = Bu + Cu,$$

avec $B = \partial_x A = A\partial_x$. Des flux et sources à opérateurs linéaires commutatifs sont alors tels que

$$CB = BC \text{ ou } AC = CA.$$

On peut donc conclure que la méthode de Godunov est exacte pour toute équation scalaire linéaire. Dans les autres cas, la méthode de Godunov est d'ordre un. La démonstration est directe et peut être trouvée dans tout bon livre d'analyse numérique, par exemple celui de LeVeque [49] ou celui de Dautray et Lions [24].

L'idée de la méthode de Strang est de partitionner les opérateurs de façon à obtenir l'ordre deux [78]. Elle est schématisée ainsi

$$u^{n+1} = \mathcal{R}^{\Delta t/2} \circ \mathcal{F}^{\Delta t} \circ \mathcal{R}^{\Delta t/2} \circ u^n. \quad (4.2.10)$$

Encore ici, l'ordre peut être inversé, mais celui-ci (4.2.10) est préférable pour la détonation.

La méthode de Strang permet de passer à l'ordre deux en temps. Bien sûr, si une des méthodes \mathcal{F} ou \mathcal{R} est d'ordre inférieur à deux, l'ordre total du schéma restera plus petit que deux. D'un autre côté, il est donc inutile de choisir des solveurs d'ordre supérieur à deux en temps, car la séparation d'opérateurs limite le tout. Contrairement au splitting de Godunov, la méthode de Strang ne peut être exacte en aucun cas. On réfère encore ici à Dautray et Lions [24] ou la thèse de Berkenbosch [7].

Le tableau 4.1 résume la précision de ces deux méthodes de séparation d'opérateurs, dans différents contextes.

Méthode	Caractéristiques	$\mathcal{O}(\Delta t)$	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	Exacte
Godunov	Système linéaire	✓		
	Opérateurs commutatifs	✓		
	Linéaire + Op. commutatifs			✓
Strang	Système linéaire		✓	
	Opérateurs commutatifs		✓	
	Linéaire + Op. commutatifs		✓	

TAB. 4.1. Erreurs causées exclusivement par la séparation d'opérateurs.

A priori, il semble plus sage de choisir l'approche de Strang. C'est vrai pour les cas non-raides. Étant donné que la précision de tout schéma baisse autour d'une discontinuité, le splitting de Strang ne nous permettra donc pas d'obtenir une meilleure capture des discontinuités. De plus, il faut être prudent lors de l'implémentation de la méthode de Strang avec un solveur \mathcal{F} à pas de temps variable (fixé de façon optimale par la condition CFL). En effet, il faut prévoir la dimension de Δt , selon la condition CFL, avant l'application du premier solveur de réaction $\mathcal{R}^{\Delta t/2}$, sans oublier que celui-ci peut modifier l'état du fluide de sorte que le pas de temps fixé précédemment ne soit plus optimal.

4.2.2.1. *Séparation d'opérateurs pour les méthodes PC*

Voyons dans notre contexte de méthode prédicteur-correcteur (PC) comment appliquer le splitting. Pour alléger l'écriture, nous prendrons le cas de Godunov. En combinant PC avec la solution de $u_t = g(u)$:

$$\text{Prédiction} : \mathcal{F}^P : u_j^n \rightarrow (u_j^{n+\alpha})^*$$

$$\mathcal{R}^P : (u_j^{n+\alpha})^* \rightarrow u_j^{n+\alpha}$$

$$\text{Correction} : \mathcal{F}^C : (u_j^n, u_j^{n+\alpha}) \rightarrow (u_{j+1/2}^{n+1})^*$$

$$\mathcal{R}^C : (u_{j+1/2}^{n+1})^* \rightarrow u_{j+1/2}^{n+1}$$

Les exposants P et C identifient les opérateurs pour la prédiction et la correction. Remarquons que rien ne nous oblige à utiliser les mêmes opérateurs pour la prédiction que pour la correction. Il est important de voir la prédiction et la correction comme deux entités séparées. Comme le nom le dit, le prédicteur sert uniquement à enrichir le correcteur.

Par exemple, si on effectue une séparation d'opérateurs sur le schéma de Pareschi avec terme de source (4.2.6), on obtient :

$$(u_j^{n+\alpha})^* = u_j^n - \lambda \alpha f'_j \tag{4.2.11}$$

$$u_j^{n+\alpha} = (u_j^{n+\alpha})^* + \Delta t \alpha g(u_j^{n+\alpha})$$

$$(u_{j+1/2}^{n+1})^* = \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u'_j - u'_{j+1})$$

$$+ \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(f(u_j^n) - f(u_{j+1}^n)) + (f(u_j^{n+\alpha}) - f(u_{j+1}^{n+\alpha})) \right]$$

$$u_{j+1/2}^{n+1} = (u_{j+1/2}^{n+1})^* + \frac{\Delta t}{2(1-\alpha)} \left[\frac{1}{2}(g(u_j^{n+\alpha}) + g(u_{j+1}^{n+\alpha})) + (1-2\alpha)g(u_{j+1/2}^{n+1}) \right].$$

Nous avons ici que \mathcal{F}^P est une méthode d'Euler explicite et \mathcal{R}^P , une Euler implicite.

L'implémentation d'un splitting de Strang n'implique aucune difficulté supplémentaire, à part celle liée au pas de temps, mentionnée plus haut.

4.2.3. Séparation d'opérateurs dans les cas raides

L'analyse classique d'erreurs associées à la séparation d'opérateurs n'est plus tout à fait valable dans le cas de systèmes raides. Nous basons la première partie des résultats présentés dans cette section sur le travail de Sportisse [76].

Considérons un système linéaire

$$u_t = Bu + Cu, \quad (4.2.12)$$

qui, on le sait, peut représenter un système hyperbolique linéaire. Supposons que l'opérateur C représente un processus se produisant à une échelle de temps beaucoup plus courte que le processus modélisé par B . En d'autres mots, qu'on puisse représenter C tel que

$$C = \frac{\chi(\varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{\chi_0}{\varepsilon} + \chi_1,$$

où χ_0 et χ_1 représentent, respectivement, les opérateurs rapide et lent de χ . Le paramètre positif ε est très petit, tendant vers zéro. En reprenant la notation habituelle, désignons par \mathcal{F} le solveur de la partie non-raide et par \mathcal{R} , celui de la partie contenant la raideur :

$$\mathcal{F} : u_t = Bu$$

$$\mathcal{R} : u_t = Cu.$$

Comme le but de ce travail est de simuler des détonations raides avec un maillage grossier, nous nous intéressons donc au cas où $\Delta t \gg \varepsilon$. On comprend que l'analyse classique des erreurs pour $\Delta t \rightarrow 0$ n'est plus valable, car le pas de temps est beaucoup plus grand que l'échelle de temps la plus rapide.

Il est démontré dans [76] que, dans les cas où $\chi_0 \neq 0$ (χ_1 nul ou non), il est préférable de garder le solveur associé à l'opérateur contenant la raideur pour la fin. En résumé, voici les résultats susceptibles de nous intéresser le plus. Dans les cas raides, avec maillage grossier, on a que :

- Les schémas de Godunov $\mathcal{R}^{\Delta t} \circ \mathcal{F}^{\Delta t}$ et Strang $\mathcal{R}^{\Delta t/2} \circ \mathcal{F}^{\Delta t} \circ \mathcal{R}^{\Delta t/2}$, sont tous deux d'ordre un.

- Les schémas de Godunov $\mathcal{F}^{\Delta t} \circ \mathcal{R}^{\Delta t}$ et Strang $\mathcal{F}^{\Delta t/2} \circ \mathcal{R}^{\Delta t} \circ \mathcal{F}^{\Delta t/2}$, donnent des résultats faibles (inférieurs à l'ordre un).
- Dans les cas non-raides ($\chi_0 = 0$), l'ordre n'a plus d'importance et les schémas de Strang retrouvent l'ordre deux.

L'analyse est effectuée pour des systèmes linéaires seulement. Nous pouvons cependant présumer que les choses ne s'améliorent pas pour le cas non-linéaire, i.e. le schéma de Strang ne regagne pas l'ordre deux et l'ordre des solveurs porte encore à conséquence.

On peut alors conclure que si notre but est de simuler un système raide sur maillage grossier, le choix entre Godunov et Strang n'a pas de conséquence, mais l'ordre des opérateurs en a. Nous croyons toutefois qu'une bonne connaissance du modèle à simuler doit primer lors du choix de la méthode de séparation d'opérateurs. Pour illustrer ce fait, étudions le cas des systèmes de relaxation, en particulier celui des équations de Broadwell [16].

4.2.3.1. *Le cas des systèmes de relaxation*

Les équations de Broadwell modélisent la cinétique d'un gaz raréfié

$$\begin{aligned} \rho_t + m_x &= 0 \\ m_t + z_x &= 0 \\ z_t + m_x &= \frac{1}{\varepsilon}(\rho^2 + m^2 - 2\rho z). \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

La quantité ρ représente la densité, m le momentum et $z = f + g$, la somme des densités de masse des particules de gaz se déplaçant à la vitesse de 1 et -1. La signification physique détaillée de ce modèle peut être trouvée dans [16]. Mentionnons toutefois que la variable z des équations de Broadwell n'a pas la même signification que pour les équations d'Euler réactives. Le paramètre ε désigne la distance moyenne qu'une particule parcourt avant d'entrer en collision avec une autre particule (*mean free path*/libre parcours moyen).

À la limite $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$z = \frac{\rho^2 + m^2}{2\rho}$$

et le système à l'équilibre est déterminé par

$$\begin{aligned} \rho_t + (\rho u)_x &= 0 \\ (\rho u)_t + \left(\frac{1}{2}(\rho + \rho u^2) \right)_x &= 0, \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

avec $m = \rho u$.

Un schéma élaboré pour la résolution des équations de Broadwell, doit approximer le système réduit (4.2.14), lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. Nous appelons les systèmes d'équations qui possèdent une limite à l'équilibre, systèmes de lois d'équilibre de relaxation (*balance laws of relaxation type*). Pour une définition complète d'un système de relaxation, consulter les travaux de Whitham [86] et de Liu [56]. Mentionons toutefois que les équations d'Euler réactives ne forment pas un système de relaxation.

Mise à part la raideur du système, la principale difficulté lors de l'élaboration d'une méthode pour un système d'équilibre de relaxation est la compatibilité avec l'état d'équilibre à la limite.

Prenons l'exemple du schéma PC avec terme de source, plus particulièrement sa version à pas fractionnaires (4.2.11)

$$\begin{aligned} (u_j^{n+\alpha})^* &= u_j^n - \lambda \alpha f'_j \\ u_j^{n+\alpha} &= (u_j^{n+\alpha})^* + \Delta t \alpha g(u_j^{n+\alpha}) \\ (u_{j+1/2}^{n+1})^* &= \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(u'_j - u'_{j+1}) \\ &\quad + \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(f(u_j^n) - f(u_{j+1}^n)) + (f(u_j^{n+\alpha}) - f(u_{j+1}^{n+\alpha})) \right] \\ u_{j+1/2}^{n+1} &= (u_{j+1/2}^{n+1})^* + \frac{\Delta t}{2(1-\alpha)} \left[\frac{1}{2}(g(u_j^{n+\alpha}) + g(u_{j+1}^{n+\alpha})) + (1-2\alpha)g(u_{j+1/2}^{n+1}) \right]. \end{aligned}$$

Supposons un cas très raide $\varepsilon \ll 1$ et notons $u_\varepsilon, f_\varepsilon$ les vecteurs u et f à l'équilibre (4.2.14) (tels que $g(u_\varepsilon) = 0$) et $f_\varepsilon(u_\varepsilon)$ le vecteur f sous sa forme à l'équilibre

évalué à l'état d'équilibre. En faisant tendre ε vers zéro pour les deux prédicteurs du schéma, on obtient

$$(u_\varepsilon^*)_j^{n+\alpha} = (u_\varepsilon)_j^n - \lambda\alpha(f_\varepsilon)'_j \quad (4.2.15)$$

$$(u_\varepsilon^*)_{j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2}((u_\varepsilon)_j^n + (u_\varepsilon)_{j+1}^n) + \frac{1}{8}((u_\varepsilon)'_j - (u_\varepsilon)'_{j+1}) \\ + \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(f_\varepsilon(u_j^n) - f_\varepsilon(u_{j+1}^n)) + f_\varepsilon(u_j^{n+\alpha}) - f_\varepsilon(u_{j+1}^{n+\alpha}) \right]. \quad (4.2.16)$$

À l'équilibre, $g(u) = g(u_\varepsilon) = 0$ et donc

$$(u_\varepsilon)_j^{n+\alpha} = (u_\varepsilon^*)_j^{n+\alpha}, (u_\varepsilon)_{j+1/2}^{n+1} = (u_\varepsilon^*)_{j+1/2}^{n+1}.$$

Étant donné que les quantités $u_j^{n+\alpha}$ et $u_{j+1}^{n+\alpha}$ de (4.2.16) doivent être évaluées lors du pas de prédiction (qui est une prédiction à l'équilibre), nous obtenons donc que

$$(u_\varepsilon)_j^{n+\alpha} = (u_\varepsilon)_j^n - \lambda\alpha(f_\varepsilon)'_j \\ (u_\varepsilon)_{j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2}((u_\varepsilon)_j^n + (u_\varepsilon)_{j+1}^n) + \frac{1}{8}((u_\varepsilon)'_j - (u_\varepsilon)'_{j+1}) \\ + \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(f_\varepsilon(u_j^n) - f_\varepsilon(u_{j+1}^n)) + f_\varepsilon((u_\varepsilon)_j^{n+\alpha}) - f_\varepsilon((u_\varepsilon)_{j+1}^{n+\alpha}) \right].$$

Ce nouveau schéma est compatible avec le système à l'équilibre $(u_\varepsilon)_t + (f_\varepsilon(u_\varepsilon))_x = 0$, à part pour le premier pas de temps : la présence de $f_\varepsilon(u)$ dans la correction brise l'équilibre. En effet, en général, nous avons $f_\varepsilon(u) \neq f_\varepsilon(u_\varepsilon)$. Pour $n > 0$, cette inégalité n'a plus beaucoup d'impact, car le pas de temps précédent a été influencé par la relaxation, i.e. $f_\varepsilon(u^n) \simeq f_\varepsilon(u_\varepsilon^n)$. Or, dans le cas où le vecteur de conditions initiales u^0 n'est pas à l'équilibre

$$z^0 \neq \frac{(\rho^0)^2 + (m^0)^2}{2\rho^0},$$

nous avons pour le premier pas de temps :

$$f_\varepsilon(u^0) \neq f_\varepsilon(u_\varepsilon^0).$$

Autrement dit, le schéma ne constitue pas une projection de l'état d'équilibre pour le premier pas de temps, introduisant une erreur d'ordre plus ou moins Δt . Malheureusement, cette erreur est traînée tout au long de la simulation. On peut voir l'impact de cette erreur à la figure 4.3 : on observe une variation non-physique

des quantités à $x \cong 0$. En effet, on remarque une baisse de densité et une augmentation du momentum dans le voisinage de $x = 0$. Pour de plus grandes valeurs de ε , ces fluctuations existent dans la solution analytique. Toutefois, leur importance devrait diminuer avec ε et surtout, disparaître pour $\varepsilon < \Delta t$.

Ce problème de couche initiale est commun pour ce type de schéma. Une solution [17, 61] est d'effectuer une extrapolation de Richardson après le premier pas de temps, permettant de passer à l'ordre 2.

De notre côté, nous avons remarqué que la simple utilisation de la méthode de Strang réglait le problème. Avec Strang, l'étape de la correction devient

$$\begin{aligned} \text{Correction} & : \mathcal{R}_{\Delta t/2}^C : (u_j^n, u_j^{n+\alpha}) \rightarrow (u_j^{n+1})^* \\ & \mathcal{F}_{\Delta t}^C : ((u_j^{n+1})^*, u_j^{n+\alpha}) \rightarrow (u_{j+1/2}^{n+1})^* \\ & \mathcal{R}_{\Delta t/2}^C : (u_{j+1/2}^{n+1})^* \rightarrow u_{j+1/2}^{n+1}. \end{aligned}$$

De cette façon, on voit que l'advection est faite sur un fluide déjà en partie à l'équilibre.

Comme nous l'avons mentionné plus haut, le choix entre la méthode de Godunov et de Strang dans les cas raides dépend du modèle étudié. Dans le cas d'un système de relaxation par exemple, la séparation d'opérateurs de Strang est le meilleur choix.

Pour illustrer ce qui vient d'être énoncé, considérons l'exemple suivant

Exemple 4.2.1.

$$(\rho, m, z)_0 = \begin{cases} (2.0, 1.0, 1.0), & x < 0.2; \\ (1.0, 0.13962, 1.0), & x \geq 0.2, \end{cases}$$

avec conditions aux bords de type miroir.

On remarque que les conditions initiales ne sont pas à l'équilibre. Le détail, sur la figure 4.4, de la figure 4.3, montre une saillie près de la position initiale du choc. Les conditions initiales n'étant pas à l'équilibre, cette saillie est causée par la couche initiale, i.e. la mauvaise projection à l'équilibre au premier pas de temps. Comme prévu, elle est moins prononcée pour le splitting de Strang que pour le splitting de Godunov (figure 4.4).

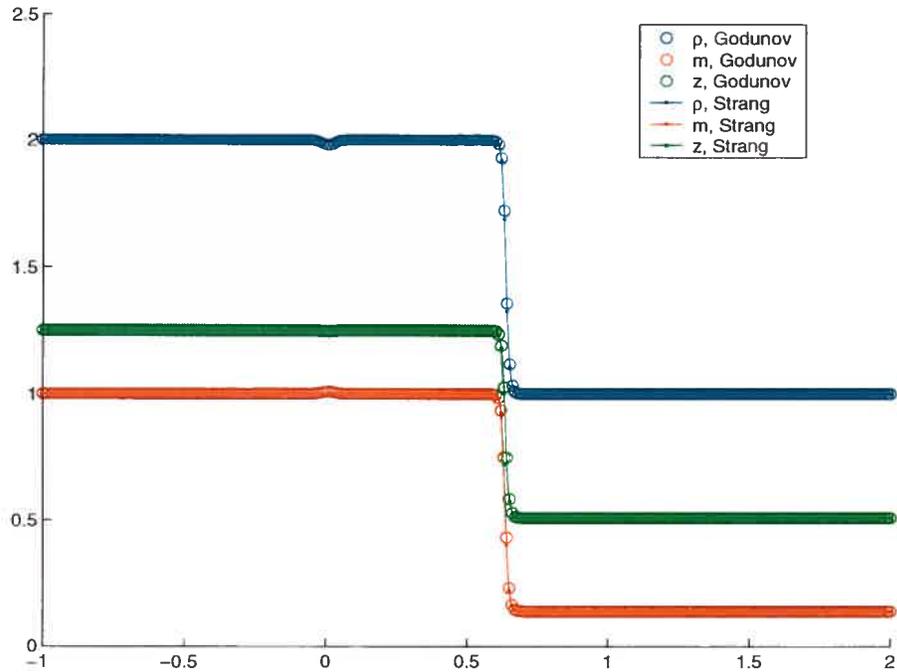


FIG. 4.3. $\varepsilon = 1.e - 8$, $t = 0.5$, $\alpha = 1/3$ (valeur optimale dans les cas raides [61]), $CFL = 1/3$ et $\Delta x = 0.01$.

4.2.4. Séparation d'opérateurs pour la détonation

Nous avons vu au premier chapitre que la dernière équation du système d'Euler réactif peut être synthétisée par

$$Z_t + uZ_x = -ZK(T). \quad (4.2.17)$$

Comme Z (et par conséquent p) est la seule variable non-conservée, l'opérateur \mathcal{R} est, dans ce cas, l'opérateur chargé de la résolution de l'équation aux différences finies

$$Z_t = -ZK(T). \quad (4.2.18)$$

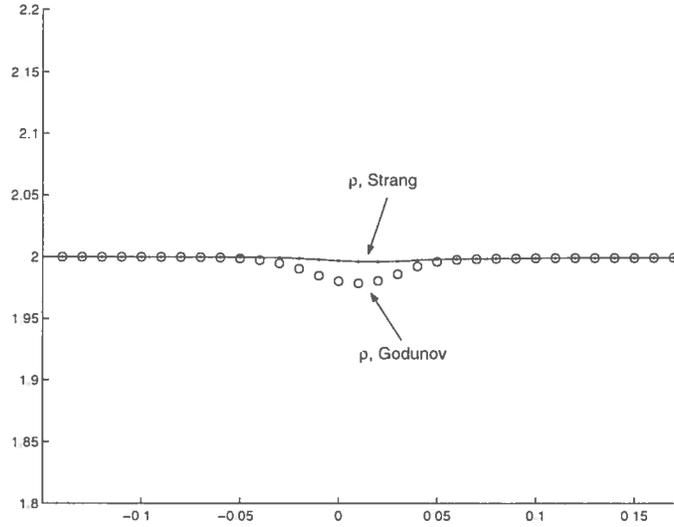


FIG. 4.4. Zoom sur $\rho(x, t)$.

En supposant que la température reste constante pendant la réaction, l'équation (4.2.18) devient linéaire et par le fait même, peut être résolue exactement.

Cette supposition, largement acceptée dans la littérature, semble être physiquement sans grande conséquence. En effet, lors de la réaction chimique, la température reste soit au-dessus, soit au-dessous de la température d'ignition. Si $T < T_{ign}$, $Z_t = 0$ et Z étant constant, T l'est aussi. D'un autre côté, si $T > T_{ign}$, Z va diminuer et donc T va augmenter [48], restant au-dessus de T_{ign} .

En acceptant nous aussi cette hypothèse, l'opérateur de réaction devient

$$\mathcal{R} : Z^* \rightarrow Z^{n+k} = Z^* e^{-k\Delta t K(T^*)}, \quad k = \alpha, 1. \quad (4.2.19)$$

4.2.4.1. Comparaison des approches directes et à pas fractionnaires pour la détonation

Pour comparer les diverses approches discutées dans ce chapitre pour résoudre la détonation, nous allons considérer un cas test d'ignition [40], que nous utiliserons à plusieurs reprises.

Exemple 4.2.2. *Considérons le cas d'un tube à choc rempli d'un gaz entièrement brûlé à gauche d'une membrane et non-brûlé à droite. L'état du gaz non-brûlé (0)*

$$(\rho, u, p, Z)_0 = (0.887565, -0.577350, 0.191709, 1)$$

est choisi de sorte que l'état brûlé (1) soit

$$(\rho, u, p, Z)_1 = (1.4, 0, 1, 0),$$

lorsqu'une onde CJ ($f = 1$), se propageant à la vitesse de $s = 1$, sépare les deux états. Les autres paramètres sont $\gamma = 1.4$, $q_0 = 1$ et $T_{ign} = 0.22$ (soit 1.86% du gaz non-brûlé : $T_{ign} = T_0 + 1.86T_0/100$).

Nous avons vu au chapitre 2, qu'une simulation sous-résolue peut être définie par $\Delta x \in \mathcal{S}$, $\mathcal{S} = \{y \in \mathbb{R}^+ \mid y > L_{1/2}\}$. De plus, la solution d'une simulation sous-résolue d'une détonation raide résulte en une solution non-physique. Mais en pratique, la résolution nécessaire pour ne pas bifurquer vers la solution non-physique est d'au moins 2 à 3 points dans la zone de demi-combustion $L_{1/2}$. Il existe donc une zone grise de discrétisation résolue, où il est possible d'obtenir la solution non-physique. Cette zone dépend de la méthode choisie, et peut, pour certaines méthodes peu visqueuses, ne pas exister.

Rappelons-nous que plus le rapport $\beta = 1/\gamma = L_{1/2}/\Delta x$ est petit, moins la simulation est résolue (voir la figure 4.5).

Étant donné que $L_{1/2}$ varie dans le même sens que τ (voir la définition de $L_{1/2}$ (1.3.10)), diminuer τ en laissant Δx fixe, fera diminuer le rapport β et rendra donc la discrétisation plus grossière. Il existe donc un τ_{min} , propre à chaque méthode numérique, qui rendra le rapport β trop petit pour que le schéma puisse fournir la solution physique. En d'autres termes, pour $\tau < \tau_{min}$, le schéma sera incapable de fournir la solution physique, étant donné la présence de trop de diffusion. Plus ce τ_{min} sera petit, et par conséquent, plus le rapport $\beta = L_{1/2}/\Delta x$ sera petit, plus la méthode sera efficace en régime sous-résolu. Ainsi rarement le rapport β n'est inférieur à 2, à moins d'avoir préalablement modifié la méthode pour le cas

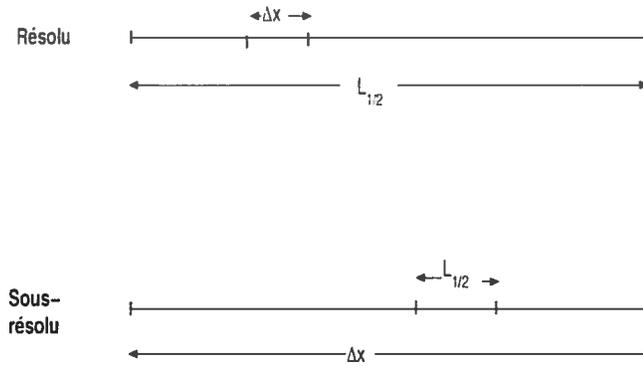


FIG. 4.5. Proportions spatiales pour les simulations résolues et sous-réolues.

particulier de la détonation.

Nous ferons varier τ , de façon à trouver la limite τ_{min} . Pour déterminer si τ est trop petit pour le maillage choisi, on détecte le commencement de la formation du plateau caractéristique à la détonation faible (voir par exemple la figure 2.7). Le tout est géré par un algorithme de point médian : Soit τ^{n-1} et τ^n , les τ étudiés aux expérimentations t_E^{n-1} et t_E^n , si par exemple $\tau^n < \tau^{n-1}$ et si τ^n fait bifurquer le schéma vers la solution non-physique, alors le τ de la prochaine expérimentation sera $\tau^{n+1} = \tau^n + (\tau^{n-1} - \tau^n)/2$.

Pour une méthode donnée, plus τ_{min} peut être petit et par conséquent plus les rapports $\tau_{min}/\Delta t_{moyen}$ et $L_{1/2}/\Delta x$ sont petits, plus une méthode est robuste en régime sous-résolu. L'exercice présent nous permettra donc de choisir la méthode de base pour résoudre les détonations raides. Les chapitres suivants seront consacrés à l'amélioration de cette méthode.

Nous choisissons $\alpha = 1/3$, $\Delta x = 0.01$ et Δt varie selon une CFL de 0.3, résultant en un Δt moyen autour de 0.0021. Chaque simulation est effectuée pour 1000 pas de temps, soit une durée totale d'environ 2.1 secondes.

Dans le but d'étudier le comportement de la séparation d'opérateurs et de la méthode directe, dans le cadre des méthodes PC, nous comparons la méthode directe (4.2.6) et la méthode à pas fractionnaires, pour des solveurs implicites \mathcal{R}^P et \mathcal{R}^C tels que ceux proposés par Pareschi (4.2.11) et un solveur \mathcal{R} de solution exacte (4.2.19).

Méthode PC	τ_{min}	$\tau_{min}/\Delta t_{moyen}$	$L_{1/2}/\Delta x$
Unsplit, non-linéaire	0.14359	67.8175	5.0967
Unsplit, linéaire	0.12786	60.1383	4.5382
Split, Solveurs implicites	0.095868	44.5566	3.4028
Split, Solveur exact	0.087463	44.3744	3.1044

TAB. 4.2. Performance des méthodes PC, pour différents traitements de la source : Valeurs limites pour lesquelles le schéma fournit encore la solution physique (i.e. pour $\tau_{min} - \varepsilon, \forall \varepsilon > 0$, le schéma converge vers la solution non-physique).

Dans cet exemple, les schémas dits unsplit sont les méthodes directes PC (4.2.6). La version linéaire considère la température constante à travers le pas de temps, contrairement à la version non-linéaire. Le schéma unsplit linéaire pour la variable non-conservée ρZ se résume à (de (4.2.6)) :

$$\begin{aligned}
(\rho Z)_j^{n+\alpha} &= (\rho Z)_j^n - \lambda \alpha (\rho Z u)'_j - \alpha \Delta t (\rho Z)_j^{n+\alpha} K(T_j^n) \\
(\rho Z)_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{2}((\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n) + \frac{1}{8}((\rho Z)'_j - (\rho Z)'_{j+1}) \\
&+ \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)((\rho Z u)_j^n - (\rho Z u)_{j+1}^n) + (\rho Z u)_j^{n+\alpha} - (\rho Z u)_{j+1}^{n+\alpha} \right] \\
&- \frac{\Delta t}{2(1-\alpha)} \left[\frac{1}{2}((\rho Z K(T))_j^{n+\alpha} + (\rho Z K(T))_{j+1}^{n+\alpha}) + (1-2\alpha)(\rho Z)_{j+1/2}^{n+1} K(T_j^{n+\alpha}) \right].
\end{aligned} \tag{4.2.20}$$

On voit que les termes implicites peuvent être facilement isolés lors de la résolution.

Pour la version non-linéaire, nous devons évaluer la température, une variable qui est non-linéaire en Z (voir 1.1.3). Le schéma unsplit non-linéaire fait donc appel à un solveur de Newton, ce qui augmente considérablement le temps de calcul. Il a été mentionné à la section 4.2.1, que les schémas unsplit semblent plus prompts à converger vers la solution non-physique. Les résultats obtenus ici vont dans ce sens (voir la figure 4.6).

Le solveur split implicite (4.2.11) traite le terme implicite en supposant la température constante au cours du pas de temps. Ce schéma est ainsi la version à pas fractionnaires du solveur unsplit linéaire (4.2.20). Dans ces deux cas, nous avons utilisé le splitting de Godunov.

De plus, on voit que les résultats fournis par la résolution exacte de la réaction chimique, dans le cas split, sont nettement meilleurs que ceux de l'approximation implicite. En effet, pour une même discrétisation, il fournit une solution physique, contrairement au solveur implicite. Intuitivement, ce résultat semble relié au fait que les méthodes implicites sont généralement plus dissipatives que leur version explicite [77].

Ces résultats confirment la supériorité du choix du solveur exact de la réaction chimique (4.2.19).

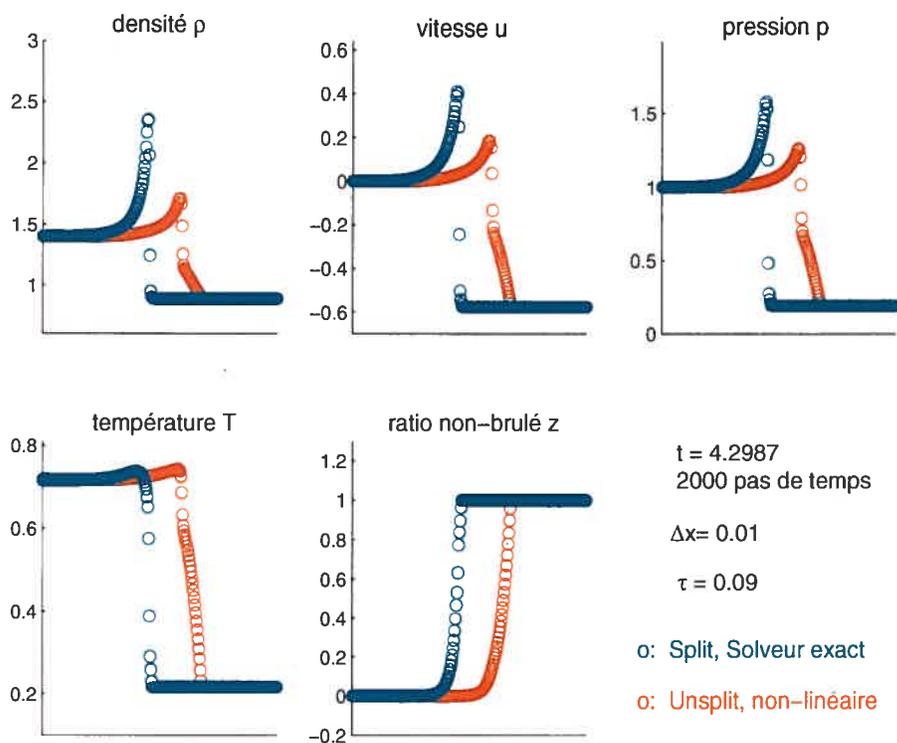


FIG. 4.6. Solutions obtenues pour le meilleur solveur (split, solveur exact) et le pire (unsplit non-linéaire), pour la valeur limite $\tau_{min} = 0.09$. On observe la naissance du profil non-physique pour le schéma unsplit non-linéaire.

Chapitre 5

APPROXIMATION NUMÉRIQUE DE SYSTÈMES DE LOIS DE CONSERVATION EN 2 DIMENSIONS AVEC TERME DE SOURCE RAIDE

5.1. EXTENSION DU SCHÉMA PC EN 2 DIMENSIONS

La méthode de prédicteur-correcteur de Pareschi [61], présentée au chapitre précédent, n'a jamais été développée en deux dimensions, malgré son potentiel. Nous présenterons dans cette section notre extension de la méthode unsplit prédicteur-correcteur de Pareschi ainsi que sa version split, appelée PC au chapitre précédent.

Considérons un système de lois de conservations, en deux dimensions spatiales, avec terme de source :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} u(x, y, t) dx dy &= \int_{y_j}^{y_{j+1}} (f(u(x_i, y, t)) - f(u(x_{i+1}, y, t))) dy \\ &+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} (h(u(x, y_j, t)) - h(u(x, y_{j+1}, t))) dx \\ &+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} g(u(x, y, t)) dx dy, \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

avec $u(x, y, t) : \mathbb{R}^2 \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^d$, le vecteur de d quantités conservées, $f(u), h(u) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ les vecteurs de flux pour les directions x et y respectivement et $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ est le vecteur de source. On considère ainsi la conservation de la matière u dans le volume de contrôle $V = [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}] \equiv C \times [t^n, t^{n+1}]$.

En intégrant l'équation (5.1.1) sur $[t^n, t^{n+1}]$ et en utilisant la notation

$$\bar{u}_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} u(x, y, t^{n+1}) dx dy.$$

on obtient

$$\begin{aligned} \bar{u}_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} u(x, y, t^n) dx dy \\ &+ \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left\{ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} \left(f(u(x_i, y, t)) - f(u(x_{i+1}, y, t)) \right) dt dy \right. \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(h(u(x, y_j, t)) - h(u(x, y_{j+1}, t)) \right) dt dx \\ &\left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} g(u(x, y, t)) dt dx dy \right\}. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Dans un premier temps, concentrons-nous sur la première partie de l'expression (5.1.2).

$$\begin{aligned} \int_C u(x, y, t^n) dx dy &= \int_{C \cap C_{i,j}} u(x, y, t^n) dx dy + \int_{C \cap C_{i+1,j}} u(x, y, t^n) dx dy \quad (5.1.3) \\ &+ \int_{C \cap C_{i,j+1}} u(x, y, t^n) dx dy + \int_{C \cap C_{i+1,j+1}} u(x, y, t^n) dx dy, \end{aligned}$$

où C , $C_{i,j}$, $C_{i+1,j}$, $C_{i,j+1}$ et $C_{i+1,j+1}$ sont des sous-domaines du maillage d'espace, illustrés à la figure 5.1.

On développe le premier terme de l'équation (5.1.3), en approximant $u(x_i, y_j, t^n)$ par une fonction linéaire par morceaux

$$\bar{u}_{i,j}^n + \frac{\dot{u}_{i,j}}{\Delta x} (x - x_j) + \frac{\dot{u}_{i,j}}{\Delta y} (y - y_j),$$

où, tout comme en une dimension, l'ordre deux est obtenu en posant :

$$\dot{u}_{i,j} = u_x(x_i, y_j, t^n) \Delta x + O(\Delta x^2),$$

$$\dot{u}_{i,j} = u_y(x_i, y_j, t^n) \Delta y + O(\Delta y^2).$$

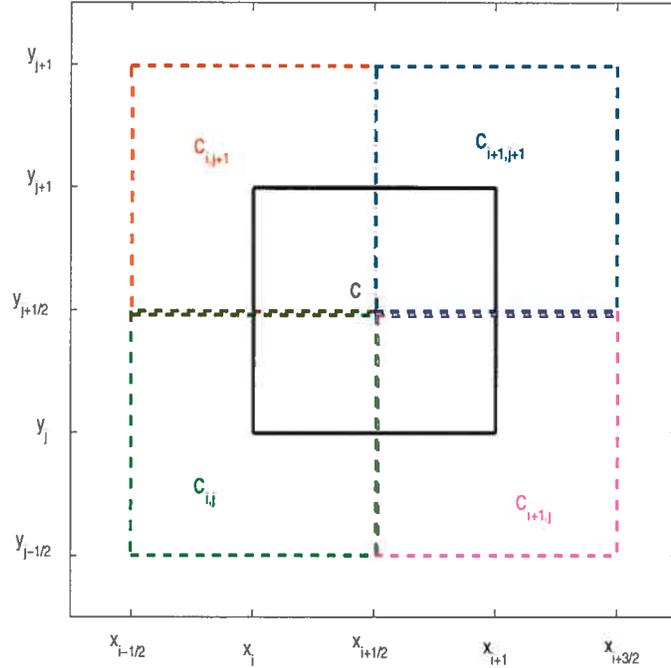


FIG. 5.1. Divisions du domaine d'espace centré en $(x_{i+1/2}, y_{j+1/2})$.

$$\begin{aligned} \int_{C \cap C_{i,j}} u(x, y, t^n) dx dy &= \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \int_{y_j}^{y_{j+1/2}} \left(\bar{u}_{i,j}^n + \frac{\dot{u}_{i,j}}{\Delta x} (x - x_j) + \frac{\dot{u}_{i,j}}{\Delta y} (y - y_j) \right) dx dy \\ &= \Delta x \Delta y \left(\frac{\bar{u}_{i,j}^n}{4} + \frac{1}{16} (\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{i,j}) \right). \end{aligned}$$

En évaluant de façon similaire les trois autres intégrales de (5.1.3), on obtient

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} u(x, y, t^n) dx dy &= \frac{1}{4} \left(\bar{u}_{i,j}^n + \bar{u}_{i+1,j}^n + \bar{u}_{i,j+1}^n + \bar{u}_{i+1,j+1}^n \right) \\ &+ \frac{1}{16} \left(\dot{u}_{i,j} - \dot{u}_{i+1,j} + \dot{u}_{i,j+1} - \dot{u}_{i+1,j+1} \right) \\ &+ \frac{1}{16} \left(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{i+1,j} - \dot{u}_{i,j+1} - \dot{u}_{i+1,j+1} \right). \end{aligned}$$

Pour évaluer la deuxième partie de l'expression générale (5.1.2) de $\bar{u}_{i+1/2,j+1/2}^{n+1}$, on procède comme en une dimension.

En posant

$$R_{i+1/2,j+1/2}(t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left\{ \int_{y_j}^{y_{j+1}} (f(u(x_i, y, t)) - f(u(x_{i+1}, y, t))) dy + \int_{x_i}^{x_{i+1}} (h(u(x, y_j, t)) - h(u(x, y_{j+1}, t))) dx \right\}. \quad (5.1.4)$$

$$G_{i+1/2,j+1/2}(t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} g(u(x, y, t)) dx dy \quad (5.1.5)$$

on peut alors réécrire (5.1.2) sous la forme

$$\frac{d\bar{u}}{dt} \Big|_{i+1/2,j+1/2} = R_{i+1/2,j+1/2}(t) + G_{i+1/2,j+1/2}(t). \quad (5.1.6)$$

Encore une fois, on peut approximer l'edo (5.1.6) à l'aide d'un schéma Runge-Kutta :

$$\begin{aligned} \bar{u}_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} &= \bar{u}_{i+1/2,j+1/2}^n + \Delta t \left(\nu R_{i+1/2,j+1/2}(t^n) + \xi R_{i+1/2,j+1/2}(t^{n+\alpha}) \right) \\ &+ \Delta t \left(\beta G_{i+1/2,j+1/2}(t^n) + \gamma G_{i+1/2,j+1/2}(t^{n+\alpha}) + \delta G_{i+1/2,j+1/2}(t^{n+1}) \right). \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Pour fixer les paramètres ν, ξ, β, γ et δ en fonction de α , on considère l'analogie de (5.1.7) pour l'équation linéaire

$$y_t = Ry + Gy, \quad (5.1.8)$$

où $y \in \mathbb{R}^N$ et R et G sont des matrices réelles constantes de dimensions N par N :

$$\begin{aligned} y(t^{n+1}) &= y(t^n) + \Delta t R \left(\nu y(t^n) + \xi y(t^{n+\alpha}) \right) \\ &+ \Delta t G \left(\beta y(t^n) + \gamma y(t^{n+\alpha}) + \delta y(t^{n+1}) \right). \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

Pour fixer les constantes, on développe les termes de (5.1.9) en série de Taylor, que l'on compare au développement de la solution de (5.1.8), de façon à obtenir l'ordre deux en temps.

En développant $y(t^{n+\alpha})$ jusqu'à l'ordre trois en sachant que $y_{tt} = (R + G)^2 y(t^n)$, on obtient

$$y(t^{n+\alpha}) = y(t^n) + \alpha \Delta t (R + G) y(t^n) + \alpha^2 \Delta t^2 (R + G)^2 y(t^n) + O(\Delta t^3) \quad (5.1.10)$$

En utilisant (5.1.10), la relation (5.1.9) peut s'exprimer comme suit

$$y(t^{n+1}) = y(t^n) + \Delta t((\nu + \xi)R + (\beta + \gamma + \delta)G)y(t^n) + \Delta t^2(\nu\alpha R^2 + \nu\alpha RG + (\alpha\gamma + \delta)GR + (\alpha\gamma + \delta)G^2)y(t^n) \quad (5.1.11)$$

Maintenant en comparant (5.1.11) avec le développement en série de Taylor jusqu'à l'ordre trois de la solution de l'é.d.o. (5.1.8)

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t(R + G)y^n + \frac{\Delta t^2}{2}(R^2 + RG + GR + G^2)y^n + O(\Delta t^3), \quad (5.1.12)$$

on obtient le système suivant :

$$\begin{aligned} \nu + \xi &= 1 \\ \beta + \gamma + \delta &= 1 \\ \alpha\xi &= 1/2 \\ \alpha\gamma + \delta &= 1/2. \end{aligned}$$

Ce type de schéma doit pouvoir résoudre des systèmes raides. Il est bien connu, pour des questions de stabilité, qu'il est préférable de traiter implicitement le terme qui représente l'échelle de temps la plus courte. Dans notre cas, il est souhaitable d'avoir un schéma entièrement implicite en G et donc de poser $\beta = 0$.

De cette façon, l'unique solution, pour α fixé est

$$\begin{aligned} \nu &= 1 - \frac{1}{2\alpha}, \xi = \frac{1}{2\alpha} \\ \gamma &= \frac{1}{2(1-\alpha)}, \delta = \frac{1-2\alpha}{2(1-\alpha)}. \end{aligned}$$

La dernière étape consiste à évaluer $R_{i+1/2,j+1/2}(t)$ et $G_{i+1/2,j+1/2}(t)$, pour t fixé.

En appliquant la quadrature du trapèze et en employant la notation $f(u(x_i, y_j, t^n)) = f_{i,j}^n$, on l'obtient l'approximation d'ordre deux suivante

$$\begin{aligned} R_{i+1/2,j+1/2}(t) &= \frac{1}{2\Delta x} (f_{i,j} - f_{i+1,j} + f_{i,j+1} - f_{i+1,j+1}) \\ &\quad + \frac{1}{2\Delta y} (h_{i,j} - h_{i,j+1} + h_{i+1,j} - h_{i+1,j+1}) \end{aligned}$$

et

$$G_{i+1/2,j+1/2}(t) = \frac{1}{4} \left(g_{i,j} + g_{i,j+1} + g_{i+1,j} + g_{i+1,j+1} \right).$$

Le schéma PC2 prend finalement la forme

$$\begin{aligned} \bar{u}_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{4} \left(\bar{u}_{i,j}^n + \bar{u}_{i+1,j}^n + \bar{u}_{i,j+1}^n + \bar{u}_{i+1,j+1}^n \right) \\ &+ \frac{1}{16} \left(\dot{u}_{i,j} - \dot{u}_{i+1,j} + \dot{u}_{i,j+1} - \dot{u}_{i+1,j+1} \right) \\ &+ \frac{1}{16} \left(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{i+1,j} - \dot{u}_{i,j+1} - \dot{u}_{i+1,j+1} \right) \\ &+ \frac{\lambda}{4\alpha} \left[(2\alpha - 1) (f_{i,j}^n - f_{i+1,j}^n + f_{i,j+1}^n - f_{i+1,j+1}^n) \right. \\ &\quad \left. + (f_{i,j}^{n+\alpha} - f_{i+1,j}^{n+\alpha} + f_{i,j+1}^{n+\alpha} - f_{i+1,j+1}^{n+\alpha}) \right] \\ &+ \frac{\mu}{4\alpha} \left[(2\alpha - 1) (h_{i,j}^n + h_{i+1,j}^n - h_{i,j+1}^n - h_{i+1,j+1}^n) \right. \\ &\quad \left. + (h_{i,j}^{n+\alpha} + (h_{i+1,j}^{n+\alpha} - h_{i,j+1}^{n+\alpha} - h_{i+1,j+1}^{n+\alpha})) \right] \\ &+ \frac{\Delta t}{8(1-\alpha)} \left[(g_{i,j}^{n+\alpha} + g_{i,j+1}^{n+\alpha} + g_{i+1,j}^{n+\alpha} + g_{i+1,j+1}^{n+\alpha}) \right. \\ &\quad \left. + (1-2\alpha)(g_{i,j}^{n+1} + g_{i,j+1}^{n+1} + g_{i+1,j}^{n+1} + g_{i+1,j+1}^{n+1}) \right], \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

où $\lambda = \Delta t / \Delta x$ et $\mu = \Delta t / \Delta y$. La prédiction au temps $t^{n+\alpha}$ est fixée en discrétisant $u_t = -f(u)_x - h(u)_y + g(u)$:

$$u_{i,j}^{n+\alpha} = u_{i,j}^n - \alpha \lambda f_{i,j} - \alpha \mu h_{i,j} + \alpha \Delta t g_{i,j}^{n+\alpha}. \quad (5.1.14)$$

5.2. RÉSULTATS NUMÉRIQUES POUR LA DÉTONATION

5.2.1. Équations d'Euler avec gravitation

Nous avons choisi d'étudier le cas d'un écoulement compressible avec gravitation pour tester l'ordre de convergence de la méthode PC2. En effet, pour ce cas simple d'avection avec conditions initiales continues, la solution analytique est connue.

Les équations d'Euler bi-dimensionnelles avec gravité dans la direction y ont la

forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y &= 0 & (5.2.1) \\
 (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y &= 0 \\
 (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + p)_y &= -\rho g \\
 E_t + (u(E + p))_x + (v(E + p))_y &= -\rho v g.
 \end{aligned}$$

avec l'équation d'état

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

Exemple 5.2.1. *Cet exemple est tiré du rapport technique de Deiterding [25]. On considère un domaine carré $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x, y \in [0, 2]\}$ avec les conditions initiales $(\rho, p, u, v)_0 = (\rho_r(r), 1.0, 1.0, 1.25)$.*

La densité radiale est définie par

$$\rho_r(r) = \begin{cases} \rho_a + \rho_b \left[\sin\left(\frac{r}{R}\pi + \frac{\pi}{2}\right) + 1 \right], & 0 \leq r < R; \\ \rho_a, & R \leq r \end{cases} \quad (5.2.2)$$

avec

$$r(x, y) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2},$$

où $x_0 = y_0 = 0.75$, $R = 0.5$, $\rho_a = 1.0$, $\rho_b = 0.05$, $g = 1$ et $\gamma = 1.39$.

Dans ce cas, la solution exacte se traduit en une advection de la densité initiale :

$$\begin{aligned}
 \rho(x, y, t) &= \rho_0\left(x - u_0 t, y - v_0 t + \frac{1}{2} g t^2\right) \\
 u(x, y, t) &= u_0 \\
 v(x, y, t) &= v_0 - g t \\
 p(x, y, t) &= p_0.
 \end{aligned}$$

Pour cet exemple, nous utilisons PC2 tel qu'il est décrit en (5.1.13), c'est-à-dire sans séparation d'opérateurs. L'ordre de convergence, qui est théoriquement 2, est calculée avec la norme L_1 de l'erreur globale sur la densité :

$$\|E_\rho\|_1 = \int_D |\rho_{\text{exacte}} - \rho_{PC2}| dD.$$

Le nombre CFL est fixé à 0.3, tandis que $\alpha = 1/3$. Les termes implicites sont évalués à l'aide de deux itérations de Newton.

Δx	$\ E_\rho\ _1$	Ordre de convergence
0.05	1.17212659e-03	
0.025	3.17734630e-04	1.883234
0.0125	8.46301174e-05	1.908579
0.00625	2.2163276e-05	1.93300

TAB. 5.1. Performance de la méthode PC2 : les ordres de convergence obtenus vérifient la théorie.

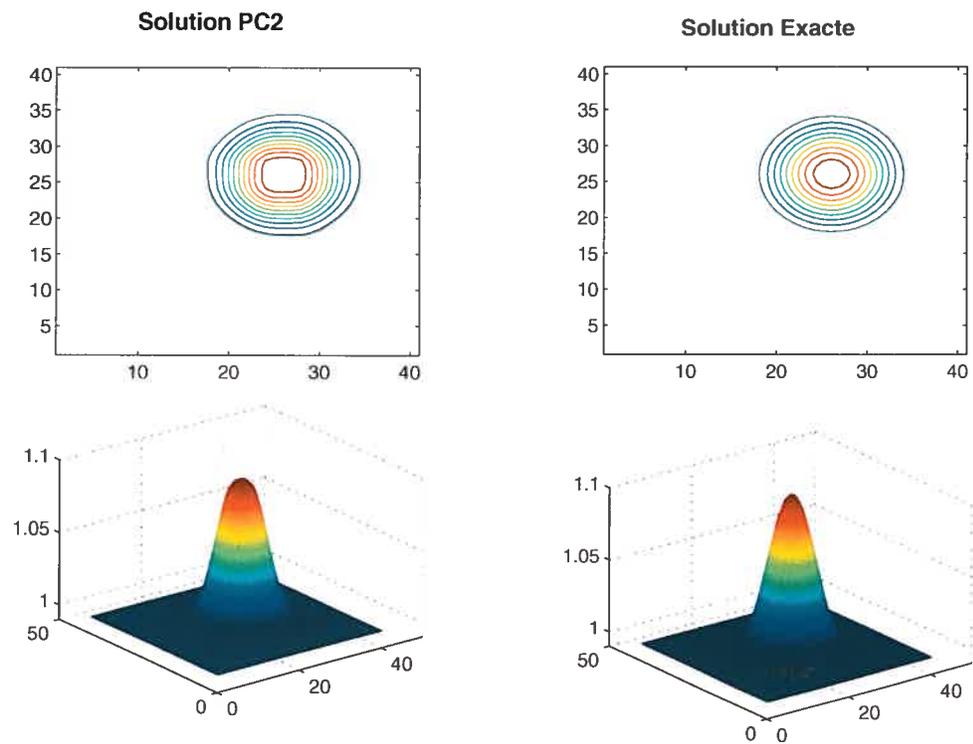


FIG. 5.2. Densité à $t = 0.5$, pour $\Delta x = 0.05$.

5.2.2. Onde de détonation évoluant dans un tube

Les équations modélisant la détonation en deux dimensions spatiales sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
 \rho_t + (\rho u)_x + (\rho v)_y &= 0 & (5.2.3) \\
 (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x + (\rho uv)_y &= 0 \\
 E_t + ((E + p)u)_x + ((E + p)v)_y &= 0 \\
 (\rho Z)_t + (\rho u Z)_x + (\rho v Z)_y &= -\rho Z K(\rho, p).
 \end{aligned}$$

Pour le cas de la détonation, nous utilisons ce schéma sous sa forme split, en considérant la solution exacte de l'EDO sous-jacente $u_t = g(u)$. On évite de cette façon les coûteuses évaluations implicites qui, comme il a été montré au chapitre précédent pour le cas unidimensionnel, ajoutent artificiellement de la viscosité à la solution, la faisant bifurquer plus rapidement vers l'état non-physique.

Exemple 5.2.2. *Cet exemple est tiré de l'article de Bao et Jin [6]. On considère un tunnel de dimensions $[0, 300] \times [0, 50]$. Les conditions imposées aux murs supérieur et inférieur sont de type parois rigides (solid walls).*

Les conditions initiales sont définies par

$$(\rho, p, u, v, Z) = \begin{cases} (1.0, 1.0, 0.0, 0.0, 1.0), & x \geq \xi; \\ (3.64282, 54.8244, 6.2489, 0.0, 0.0), & x < \xi \end{cases} \quad (5.2.4)$$

où

$$\xi(y) = \begin{cases} 10, & |y - 25| \geq 15; \\ 25 - |y - 25|, & |y - 25| < 15. \end{cases} \quad (5.2.5)$$

Pour cet exemple, la chimie est discontinue, c'est-à-dire que

$$K(T) = \begin{cases} 1/\tau, & T \geq T_{ign}; \\ 0, & T < T_{ign}, \end{cases} \quad (5.2.6)$$

où $T_{ign} = 3.0$, $\tau = 1$, $q_0 = 50$, $f = 1.6$ et $\gamma = 1.2$.

La discrétisation spatiale est $\Delta x = \Delta y = 1$, de sorte que $L_{1/2} = 0.87254\Delta x$.

La figure 5.3 illustre les contours de pression à divers moments. On voit bien les points de triple contact (*triple points*), se déplaçant en directions opposées, se réfléchir sur les murs pour ensuite entrer en collision, et ainsi de suite. Les points de triples contacts restent en mouvement, tout au long de la simulation, selon un pattern similaire à celui observé lors d'expérimentations [15]. Cette propriété est un excellent indicateur de l'efficacité de PC2 pour résoudre les équations d'Euler réactives. Remarquons que l'échelle spatiale choisie, $L_{1/2} = 0.87254\Delta x$, correspond à nettement moins que les deux à trois cellules dans la zone de demi-réaction requises pour obtenir une bonne simulation d'une détonation. Ceci constitue un autre indicateur de la robustesse de PC2.

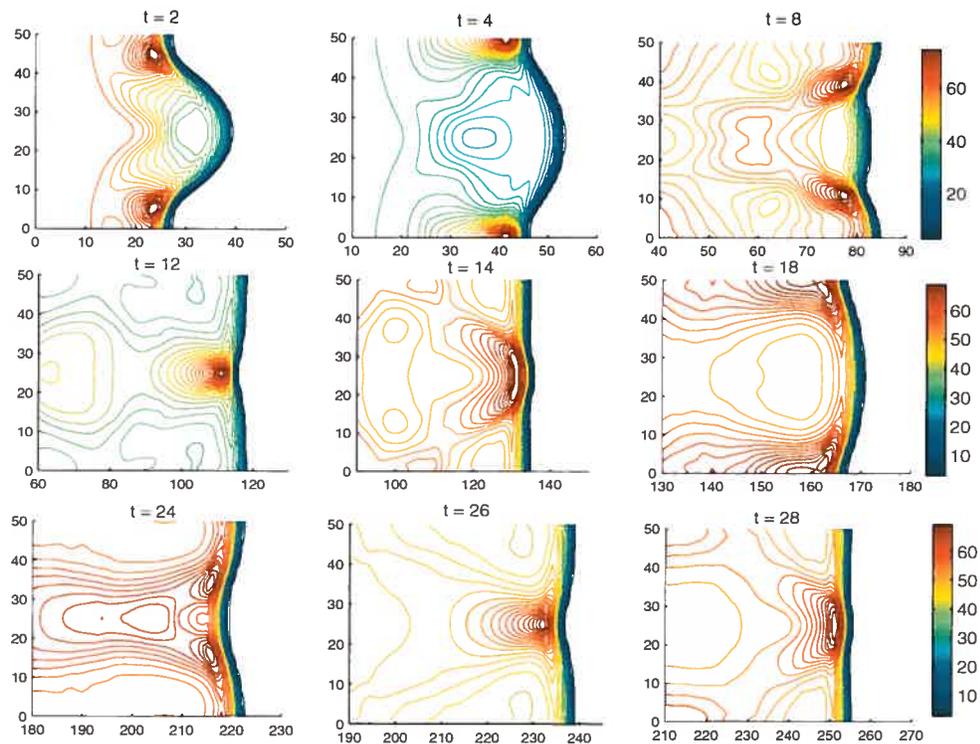


FIG. 5.3. Contours de pression, pour $\Delta x = \Delta y = 1$.

Chapitre 6

INTRODUCTION À LA COMPRESSION ARTIFICIELLE

Le chapitre 3 propose l'élaboration d'une méthode numérique minimisant la viscosité numérique introduite par les schémas de volumes finis pour le système hyperbolique homogène. Il a été montré au chapitre 2, que cette viscosité nuisait à la capture de la détonation, de façon à faire converger le schéma vers la solution non-entropique. À l'heure actuelle, un des outils les plus puissants pour enrayer la dissipation est la compression artificielle (ACM, pour *Artificial Compression Method*). En effet, l'ACM assure une capture des discontinuités en 1 point. Pour l'instant, la compression artificielle n'a jamais été utilisée ni adaptée pour résoudre le problème des solutions non-physiques pour la détonation.

Nous introduirons, dans ce chapitre, les concepts de base de cette méthode, proposée en 1978 par Harten [38]. Pour une étude approfondie de cette approche, nous suggérons les travaux de Rouch [68, 70].

6.1. LARGEUR DE CAPTURE D'UNE DISCONTINUITÉ

Sod [77] démontra que la largeur de capture d'une discontinuité, c'est-à-dire le nombre de mailles de largeur Δx sur lesquelles la discontinuité s'étale, est fonction du temps et non de l'espace. En d'autres termes, à un temps t^n , si la méthode capte la discontinuité sur 5 mailles de largeur Δx , elle la capterait également sur 5 mailles pour une discrétisation de $\Delta x/10$, à t^n . Si on pouvait diminuer ce nombre

de points de capture périodiquement, indépendamment de la discrétisation, on pourrait obtenir une capture plus nette et plus juste des discontinuités. C'est sur cette considération que Harten fonda sa méthode.

La diffusion numérique d'un schéma est sa capacité de mieux approximer l'équation augmentée d'un terme diffusif

$$u_t + f(u)_x = \frac{\partial(\beta(u)\partial_{x^{q+1}}u)}{\partial x} \cong \beta \frac{\partial^{q+2}u}{\partial x^{q+2}}, \quad (6.1.1)$$

si $\beta(u)$ est approximativement constant, et où $q + 2$ est pair. Supposons qu'un schéma soit précis à l'ordre q pour la version homogène de l'équation (6.1.1), mais précis à l'ordre $q + 2$ pour l'équation augmentée. On dit alors que le *coefficient de diffusion numérique* de la méthode est $\beta(u)$.

Pour la suite, supposons encore une fois u scalaire. Pour reprendre la notation de Sod, appelons $W(u_G, u_D)$ la largeur de capture d'une discontinuité entre les états u_G et u_D :

$$W(u_G, u_D) = \int_{u_G}^{u_D} \frac{\beta(u)}{|g(u) - C|} du. \quad (6.1.2)$$

Où la fonction $g(u)$ est ici définie comme étant le flux selon le système de coordonnées se déplaçant avec le front

$$g(u) = f(u) - su,$$

où s est la vitesse de la discontinuité, définie par les relations de Rankine-Hugoniot

$$s = \frac{f(u_D) - f(u_G)}{u_D - u_G}. \quad (6.1.3)$$

Avec le flux $g(u)$, les conditions de Rankine et Hugoniot (6.1.3) deviennent

$$\tilde{s} = \frac{g(u_D) - g(u_G)}{u_D - u_G} = \frac{(f(u_D) - f(u_G)) - s(u_D - u_G)}{u_D - u_G} = 0,$$

ce qui nous permet de définir $C = g(u_D) = g(u_G)$.

Dans le système de référence original, un choc satisfait l'inégalité d'entropie stricte (large) :

$$\frac{f(u) - f(u_G)}{u - u_G} \geq s \geq \frac{f(u) - f(u_D)}{u - u_D}.$$

En introduisant $f(u) = g(u) + su$, ceci conduit à

$$\frac{g(u) - g(u_G)}{u - u_G} \geq 0 \geq \frac{g(u) - g(u_D)}{u - u_D},$$

d'où $(g(u) - g(u_G))\text{sign}(u - u_G) \geq 0$. Cependant, pour $u \in \text{int}(u_G, u_D)$ on a $\text{sign}(u - u_G) = \text{sign}(u_D - u_G)$, d'où l'inégalité d'entropie suivante, dans le système de référence mobile :

$$(g(u) - C)\text{sign}(u_D - u_G) > 0 \quad (6.1.4)$$

pour un choc et

$$(g(u) - C)\text{sign}(u_D - u_G) = 0 \quad (6.1.5)$$

pour une discontinuité de contact, pour tout $u \in \text{int}(u_G, u_D)$. On remarque que le terme $g(u) - C$ est aussi présent dans la définition de la largeur de capture d'une discontinuité. Plus $|g(u) - C|$ est grand, plus $W(u_G, u_D)$ est petit et par conséquent, plus la capture est nette. Il est évident qu'augmenter la quantité $|g(u) - C|$ est équivalent à diminuer la largeur de capture. L'inégalité stricte dans la condition d'entropie (6.1.4) suggère donc que les chocs sont généralement mieux captés que les discontinuités de contact. La capture nette des discontinuités de contact constitue un plus grand défi que celle des chocs. L'action de l'ACM est cependant la même dans les deux cas, car l'équation (6.1.2) est valable pour les chocs et les contacts.

6.2. FLUX DE COMPRESSION ARTIFICIELLE

On suppose que la solution $u(x, t)$ ne prend aucune valeur comprise dans l'intervalle ouvert $\text{int}(u_G, u_D)$. Considérons la fonction $h(u, t)$ satisfaisant les conditions suivantes

- (1) $h(u, t) \equiv 0$ pour $u(t)$ à l'extérieur de l'intervalle ouvert (u_G, u_D)
- (2) $h(u, t)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) > 0$ pour $u(t)$ dans l'intervalle ouvert (u_G, u_D) .

Cette fonction h est appelée *flux de compression artificielle* et la figure 6.1 illustre son comportement.

Théorème 6.2.1. *La solution de l'équation homogène*

$$u_t + f(u)_x = 0$$

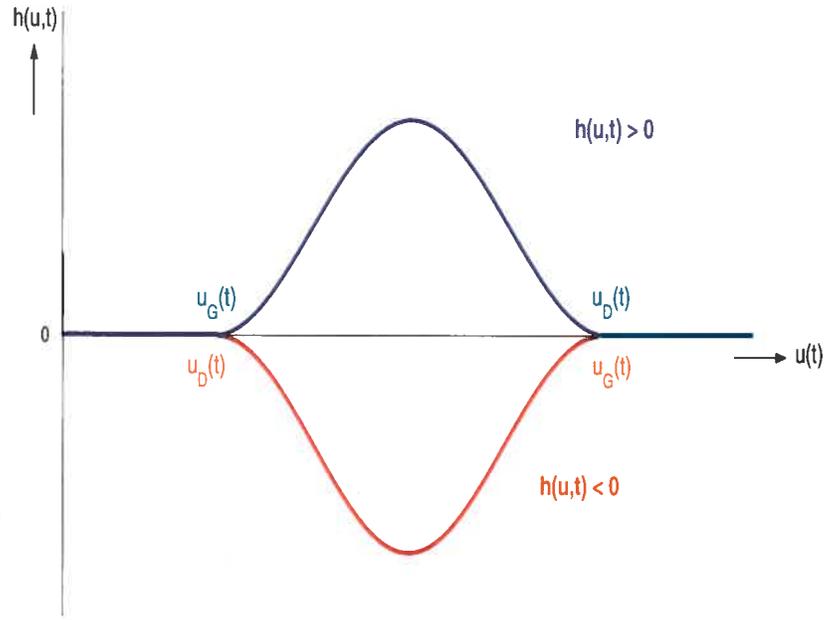


FIG. 6.1. Profils possibles pour le flux de compression.

satisfait aussi l'équation augmentée

$$u_t + (f(u) + h(u, t))_x = 0. \quad (6.2.1)$$

Nous croyons que la démonstration de ce théorème est utile à la compréhension de la compression artificielle. Elle est tirée également du livre de Sod [77].

DÉMONSTRATION. Posons $\tilde{f}(u) = f(u) + h(u, t)$ le flux de l'équation augmentée (6.2.1). Les conditions de R-H deviennent

$$\begin{aligned} \tilde{f}(u_D(t)) - \tilde{f}(u_G(t)) &= f(u_D(t)) + h(u_D(t), t) - (f(u_G(t)) + h(u_G(t), t)) \\ &= f(u_D(t)) - f(u_G(t)) \text{ par la propriété 1} \\ &= s(t)(u_D(t) - u_G(t)). \end{aligned}$$

Ainsi la discontinuité séparant les états $u_G(t)$ et $u_D(t)$, se propageant à la vitesse $s(t)$, est une solution admissible pour (6.2.1).

Il reste à démontrer que cette solution est entropique. Posons

$$\tilde{g}(u) = \tilde{f}(u) - s(t)u.$$

une fonction de flux dans le repère se déplaçant avec la discontinuité définie plus haut.

Nous avons que

$$\begin{aligned} \tilde{g}(u_G(t)) &= \tilde{f}(u_G(t)) - s(t)u_G(t) \\ &= f(u_G(t)) + h(u_G(t), t) - s(t)u_G(t) \\ &= f(u_G(t)) - s(t)u_G(t) \text{ par la propriété 1} \\ &= g(u_G(t)) = C \text{ par la définition de } C \end{aligned}$$

De la même façon, nous avons bien $\tilde{g}(u_D(t)) = g(u_D(t)) = C$.

Vérifions maintenant l'inégalité ouverte d'entropie pour (6.2.1)

$$\begin{aligned} (\tilde{g}(u) - C)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) &= (\tilde{f}(u) - s(t)u - C)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) \\ &= (f(u) + h(u, t) - s(t)u - C)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) \\ &= (g(u) + h(u, t) - C)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) \\ &= (g(u) - C)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) \\ &\quad + h(u, t)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) \end{aligned} \tag{6.2.2}$$

Pour tout $u \in \text{int}(u_G, u_D)$, le premier terme de la dernière expression est strictement supérieur ou égal à zéro (par (6.1.4) et (6.1.5)) et le dernier est strictement positif par la propriété 2 de la définition de h . Nous avons ainsi que, pour le flux augmenté d'un flux de compression artificielle, dans le repère se déplaçant avec la discontinuité, l'inégalité stricte d'entropie (6.1.4) pour (6.2.1) est toujours respectée pour tout $u \in \text{int}(u_G, u_D)$

$$(\tilde{g}(u) - C)\text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) > 0 \tag{6.2.3}$$

et ceci, indépendamment du fait que la discontinuité considérée est une onde de choc ou de contact, grâce à la propriété 2 de $h(u, t)$ et à (6.2.2). \square

Une conséquence importante de cette inégalité est qu'une discontinuité de contact pour l'équation

$$u_t + f(u)_x = 0$$

devient un choc pour l'équation augmentée (6.2.1) et qu'un choc reste un choc. C'est pour cette raison que l'on dit que l'addition d'un flux de compression augmente l'entropie d'une discontinuité.

D'après (6.2.2) et la propriété 2 de $h(u, t)$, nous avons alors en tout temps que

$$(\tilde{g}(u) - C) \text{sign}(u_D - u_G) > (g(u) - C) \text{sign}(u_D - u_G) \geq 0,$$

d'après (6.1.4) et (6.1.5), et donc que

$$|\tilde{g}(u) - C| > |g(u) - C| \geq 0,$$

pour tout $u \in \text{int}(u_G, u_D)$, diminuant, par le fait même, la largeur de capture de la discontinuité, d'après (6.1.2).

6.3. MISE EN OEUVRE DE L'ACM

Nous avons maintenant un outil permettant une capture plus nette des discontinuités et n'altérant pas la solution. Il reste à introduire cet outil dans nos solveurs.

Étant donné que

$$\max_u |f(u)_u + h(u)_u| \geq \max(\max_u |f(u)_u|, \max_u |h(u)_u|),$$

la condition CFL nécessaire pour résoudre numériquement l'équation augmentée

$$u_t + (f(u) + h(u, t))_x = 0$$

est plus restrictive que celle nécessaire pour la résolution des deux équations séparément. L'approche la plus économique est alors la séparation d'opérateurs (partition du flux, i.e. une approche de type pas fractionnaires)

$$(1) \mathcal{F}^f : u^n \rightarrow (u^{n+k})^*$$

$$(2) \mathcal{F}^h : (u^{n+k})^* \rightarrow u^{n+k},$$

en gardant la même notation \mathcal{F} pour le solveur de l'équation homogène : les indices f et h indiquent le flux traité.

Remarque 6.3.1. *Cette séparation d'opérateurs met en évidence l'aspect "plug-in" de l'ACM. On peut adjoindre l'ACM à n'importe quelle méthode pour systèmes hyperboliques homogènes, sans toutefois l'altérer ni modifier sa mise en oeuvre.*

Nous avons discuté largement de la résolution numérique de l'équation

$$\mathcal{F}^f : u_t + f(u)_x = 0$$

à la section 4.1.2, alors concentrons nous sur celle de

$$\mathcal{F}^h : u_t + h(u, t)_x = 0. \quad (6.3.1)$$

De la propriété 1 de la définition de h , découle que

$$\frac{h(u_D(t)) - h(u_G(t))}{u_D(t) - u_G(t)} = 0,$$

ce qui implique que la discontinuité est stationnaire, c'est-à-dire que $s(t) = 0$. Une conséquence directe de ce fait est que le nombre CFL peut être aussi grand que 1. D'ailleurs, pour tous les calculs qui suivront, le nombre CFL sera toujours fixé à 1. Le premier pas de temps (prédicteur), associé à \mathcal{F}^f , diffuse la discontinuité tout en la propageant. Pour le deuxième pas de temps (correcteur), la discontinuité diffusée par le pas prédicteur est alors compressée mais sans être propagée. Le pas correcteur ne modifie donc pas le temps physique correspondant à la solution obtenue au cours du pas prédicteur. La durée $\widetilde{\Delta t}$ du pas correcteur, qui ne joue aucun rôle physique, est appelé "pas de temps muet" (*dummy*).

Il est important de souligner que peu importe la méthode de volumes finis choisie pour \mathcal{F}^f , l'intégration de (6.3.1) doit se faire point par point, c'est-à-dire que l'on doit opter pour des méthodes de différences finies au lieu des méthodes de volumes finis. Notons aussi que le choc étant stationnaire, l'erreur associée au schéma de différences finies \mathcal{F}^h n'est pas propagée dans le temps. Tout comme

Harten [38], nous choisissons la méthode amont (*upwind*) :

$$u_j^{n+k} = (u_j^n)^* - k\widetilde{\Delta t}(H_{j+1/2} - H_{j-1/2}),$$

où

$$H_{j+1/2} = \frac{1}{2}(h_{j+1}^n + h_j^n) - \frac{1}{2}|h_{j+1}^{n*} - h_j^{n*}| \text{sign}(u_{j+1}^{n*} - u_j^{n*}),$$

où $\widetilde{\Delta t}$ indique le pas de temps muet et $h_j^{n*} \equiv h((u_j^n)^*)$. Le choix de la méthode amont est motivé par les théorèmes de Harten stipulant que, sous la condition CFL définie pour h , le schéma amont préserve la monotonie et converge vers un profil de capture à un seul point.

6.4. CHOIX DU FLUX DE COMPRESSION

Étant donné qu'en pratique, la position de la discontinuité et les états $u_G(t)$ et $u_D(t)$ sont inconnus, il faut modifier la définition de h de façon à ce qu'elle soit basée sur u_j^n .

Un flux de compression numérique $h(u, t)$ doit satisfaire les conditions suivantes :

$$(1) \quad h(u, t) = \mathcal{O}(\Delta x)$$

$$h(u(x + \Delta x, t), t) - h(u(x, t), t) = \mathcal{O}(\Delta x^2), \text{ pour } u \text{ à l'extérieur d'une zone de discontinuité } (u_G(t), u_D(t)).$$

$$(2) \quad h(u, t) \text{sign}(u_D(t) - u_G(t)) \geq 0 \text{ dans une zone de discontinuité } (u_G(t), u_D(t)).$$

Un cas classique scalaire est $h_j^n = u_{j+1}^n - u_j^n$. Le flux suivant, proposé par Harten pour un système à d équations, tient compte de la direction

$$h_j^n = \alpha_j^n D0_j^n \tag{6.4.1}$$

où

$$\alpha_j^n = \max \left[0, \min_{1 \leq i \leq d} \left\{ \frac{\min(Dp_{i,j}^n, Dm_{i,j}^n) \text{sign}(Dp_{i,j}^n)}{|Dp_{i,j}^n| + |Dm_{i,j}^n|} \right\} \right],$$

où $Dp_{i,j}^n = u_{j+1}^n - u_j^n$ pour la i^e composante de u , $Dm_{i,j}^n = u_j^n - u_{j-1}^n$ pour la i^e composante de u , $D0_j^n = u_{j+1}^n - u_{j-1}^n$ sont des opérateurs de différences. C'est d'ailleurs celui que nous utilisons.

6.5. DÉTECTION DES DISCONTINUITÉS

La force de la compression artificielle est potentiellement aussi sa faiblesse [54]. L'ACM ne fait pas la différence entre les extrema continus et les discontinuités, c'est-à-dire que des régions à fort gradient peuvent être interprétées comme des discontinuités et être compressées. L'ACM pourrait, par exemple, compresser une raréfaction. Il y a donc un danger de *surcompression*.

Cette constatation suggère d'ajouter de l'information à l'ACM pour lui indiquer quand ne pas compresser. Une approche populaire est d'utiliser la régularité de la solution. Ceci peut être fait par l'entremise des limiteurs de pente (voir la remarque 6.5.1) ou simplement par des indicateurs de régularité basés, par exemple, sur les dérivées premières, deuxièmes ou plus. Cette approche demande malheureusement beaucoup d'ajustements et n'est pas particulièrement fiable.

Remarque 6.5.1. *Le nom d'ACM peut aussi être appliqué à une approche basée sur les limiteurs de pentes au lieu des flux de compression. Ce concept a été développé par Harten [39] et ensuite raffiné par Lie et Noelle [54], dans le contexte du schéma NT. L'idée est de définir la zone de valeurs que peuvent prendre les limiteurs de pente sans détruire le caractère TVD du schéma. De cela, découle une classification des limiteurs connus et la création d'un nouveau type de limiteurs surcompressifs, appelés ACM, provenant de l'élargissement de la zone TVD.*

Cette approche a le défaut majeur de nécessiter un traitement distinct pour les discontinuités de contacts et les chocs. Cela implique que l'implémentation de cette approche nécessite la décomposition en variables caractéristiques. Ceci entre en contradiction avec l'avantage principal des schémas de type central, i.e. d'éviter la résolution du problème de Riemann et par conséquent, la décomposition en variables caractéristiques.

La méthode développée par Rouch [68, 70] suggère un détecteur de discontinuité (DDD) basé sur l'entropie des solutions. Le DDD est un opérateur booléen, fonctionnant de façon indépendante, diminuant le domaine d'action du flux de compression artificielle. Pour les cas scalaires, le DDD peut être basé sur la condition d'Oleinik [37]. Pour les systèmes, on doit utiliser les caractéristiques du modèle étudié.

Si on prend le cas qui nous intéresse, soit la détonation, nous savons que le choc a lieu dans le gaz non-brûlé. Le choc est précisément ce que nous voulons compresser, alors l'opérateur DDD fournira une réponse affirmative pour $Z = 1$ et négative pour $Z < 1 - \varepsilon$, où le ε est représentatif de l'empatement de la méthode. Le DDD associe une variable booléenne à chaque point du maillage (le même pour chaque composante du vecteur de matière u) : 0 si $Z < 1 - \varepsilon$ et 1 sinon. En d'autres mots, le DDD empêche la compression dans le medium brûlé, ce qui correspond à la physique du problème.

Sans DDD, l'action de l'ACM, avec les schémas PC, a tendance à produire des oscillations non-physiques dans le gaz brûlé. Comme il sera discuté dans le chapitre 9, les détonations sont, la plupart du temps, instables. Les valeurs thermodynamiques oscillent au front de l'onde de combustion, laissant une trace dans le gaz non-brûlé. L'ACM a tendance à lire ces oscillations comme des discontinuités et à les compresser, augmentant conséquemment leur amplitude. Même dans les cas sous-résolus, quelques unes de ces oscillations peuvent être perçues, s'exposant là encore à une surcompression. Cette observation motive l'utilisation d'un DDD fondé sur la quantité de gaz non-brûlé.

Remarque 6.5.2. *Une attention particulière doit être portée au traitement des conditions aux bords. Les oscillations causées par un mauvais traitement seront potentiellement amplifiées par la compression artificielle.*

Pour le traitement des conditions aux bords, dans un contexte de schéma de type central, l'augmentation du domaine par des cellules fantômes (ghost cells), proposée par Levy et Tadmor [53], est l'approche pour laquelle nous avons opté.

Chapitre 7

CAPTURE SOUS-RÉSOLUE DE LA DÉTONATION SANS VISCOSITÉ NUMÉRIQUE

Ce chapitre est consacré à l'application des outils permettant de minimiser la viscosité numérique. En effet, au chapitre 2 et 3, nous avons conclu que l'approche choisie pour simuler des détonations avec maillage grossier serait de minimiser la viscosité numérique qui est responsable de l'étalement du choc non-réactif, précurseur de la combustion.

Nous avons comme objectif, outre la capture de la solution physique, d'obtenir une capture bien nette des discontinuités, tout en maintenant la précision à l'ordre deux dans les régions lisses. Les méthodes de volumes finis de type central, comme NT (4.1.16) et, de façon plus générale PC (4.1.21), respectent ces conditions. De plus, l'ajout de la compression artificielle permet une capture des discontinuités sur une seule cellule. Comme nous l'avons souligné à la remarque 6.3.1, du chapitre précédent, l'ACM est indépendante de la méthode choisie pour résoudre le problème homogène.

L'ACM est optimale lorsque qu'elle est combinée au détecteur de discontinuités entropique. C'est à cette étape que nous devons introduire de l'information sur la physique du problème. Heureusement, le DDD est situé à l'extérieur de la

méthode de volume finis et de l'ACM. L'ACM n'alourdit donc pas l'implémentation des volumes finis et peut être désactivée si le problème le permet.

Les différentes approches pour résoudre le problème de la convergence des schémas vers la solution non-physique ont été résumées au chapitre 3. Soulignons que notre approche [69] se démarque pour deux raisons majeures des autres méthodes développées dans le passé. La première est qu'elle explore à fond l'hypothèse que la viscosité numérique est responsable du comportement erroné des schémas. À part les méthodes de Glimm adaptées au cas de la détonation, aucune autre méthode n'explore cette issue. La deuxième nouveauté est que notre méthode n'est pas cantonnée à la résolution de la détonation. Elle est encapsulée pour permettre facilement de l'appliquer à d'autres problèmes.

7.1. VISCOSITÉ NUMÉRIQUE MINIMALE

La compression artificielle jumelée à un détecteur de discontinuité permet une capture de discontinuité en seulement un point. Toute l'information relative à la discontinuité étant contenue dans une seule cellule, l'étalement se retrouve réduit à sa valeur minimale. En effet, pour qu'une méthode reste conservative, elle doit obligatoirement étaler la discontinuité sur au moins une cellule (voir l'article de Jeltsch et Klingenstein [44]).

Pour s'en convaincre, citons un simple argument géométrique. Pour que la position réelle de la discontinuité $x_{G,D}$, séparant l'état de gauche du droit, soit reflétée dans la solution numérique il faut au moins une cellule. En effet, si à chaque pas de temps, la discontinuité tombe sur l'interface d'une cellule, la position réelle est rapportée soit à l'interface ou soit au centre de la cellule. S'il y a une valeur intermédiaire, la position réelle de la discontinuité peut couvrir toute la cellule (voir la figure 7.1).

Remarque 7.1.1. *Dans le cas des méthodes de Glimm (voir chapitre 3), la solution, après une reconstruction sur chaque cellule et une évolution dans le temps, est associée aléatoirement à un point dans la cellule. Contrairement aux méthodes*

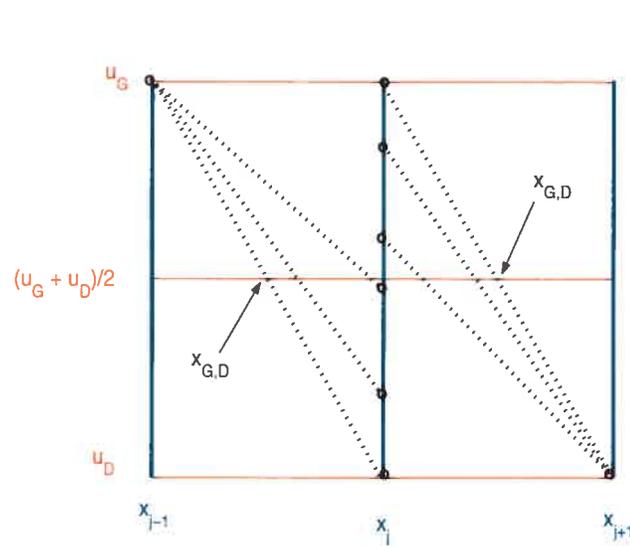


FIG. 7.1. Projection de la position $x_{G,D}$ de la discontinuité, pour une capture en un point. Pour représenter la position $x_{G,D}$ de la discontinuité entre l'état u_G et u_D , une seule cellule est suffisante, i.e. l'information sur la position d'une discontinuité peut être contenu dans une cellule, mais pas moins.

de volumes finis classiques, où l'on considère la moyenne de la solution sur chaque cellule, les méthodes de Glimm ne font pas intervenir de valeurs intermédiaires lors de la capture d'une discontinuité. En conséquences, ces méthodes ne sont pas totalement conservatives, mais convergent toutefois en moyenne avec probabilité 1.

L'utilisation de l'ACM réduit ainsi l'étalement à sa valeur minimale, tout en restant conservative. Cet outil est donc parfait pour tester l'hypothèse de la viscosité numérique développée au chapitre 2, c'est-à-dire que l'étalement du choc empêche la capture efficace des détonations avec un maillage grossier et donc qu'une méthode sans viscosité numérique convergerait vers la solution physique.

Avant d'exposer les résultats, nous tenons à mettre en évidence l'aspect modulateur de l'approche ACM.

7.2. ENCAPSULATION

L'encapsulation de l'approche est illustrée à la figure 7.2. Dans un premier temps, le problème homogène est résolu. La méthode de compression artificielle peut ou non être jointe au solveur de type central. Pour obtenir de meilleurs résultats dans le cas de la détonation raide, l'ACM doit être combinée avec un DDD, pour faire la différence entre une discontinuité et un extremum local. Ensuite, l'équation aux différences ordinaires associée au terme de source est résolue avec le solveur préféré. Dans le cas des détonations, la solution exacte est choisie.

Notre approche est bien encapsulée pour être appliquée à d'autres problèmes que la détonation, avec ou sans terme de source, raide ou non. La raideur du système peut être traitée par le solveur d'équations aux dérivées ordinaires et/ou par le solveur de volumes finis (par exemple PC).

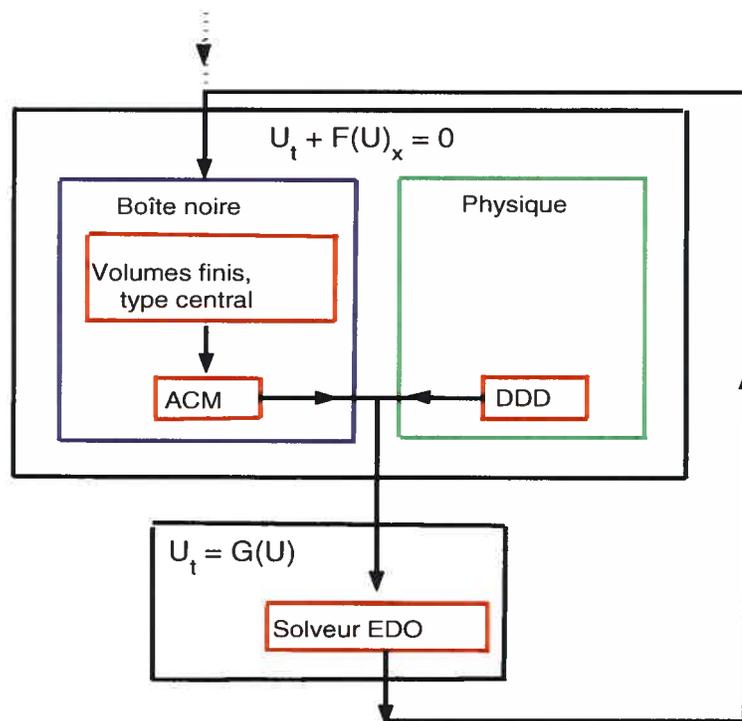


FIG. 7.2. Encapsulation de l'approche volumes finis de type central avec le duo ACM et DDD

7.3. RÉSULTATS EN 1D

Pour être en mesure de juger des résultats obtenus de façon quantitative, on utilise la vitesse moyenne de propagation de l'onde de combustion :

$$S_Z^n = -\frac{\Delta x}{n\Delta t} \sum_{i=-\infty}^{\infty} (Z_i^{n+1} - Z_i^n). \quad (7.3.1)$$

Par exemple, si $Z_i^{n+1} - Z_i^n = -1$, alors le front est passé à travers la cellule i entre t^n et t^{n+1} . On comptabilise ainsi le nombre de cellules ayant brûlé pendant la simulation et on en fait la moyenne par rapport au maillage utilisé. Cette moyenne converge vers s , la vitesse de propagation de la détonation, pour $n \rightarrow \infty$ [7]. La pertinence de cet outil de mesure augmente en fonction du nombre de pas de temps utilisés.

Dans cette section, nous étudierons 4 cas test : un faisant intervenir une chimie d'Arrhenius et trois avec une chimie d'ignition. Pour chacun de ces cas, la méthode PC, avec $\alpha = 1/3$, et séparation d'opérateurs Godunov est utilisée.

7.3.1. Chimie d'Arrhenius

Le taux de réaction d'Arrhenius est décrit par

$$K(T) = \begin{cases} K_0 \exp(-E^+/T), & T \geq T_{ign}; \\ 0, & T < T_{ign}. \end{cases} \quad (7.3.2)$$

où K_0 est une constante propre au taux de réaction et E^+ est l'énergie d'activation. La température d'ignition est fixée à 1% de plus que la température non-brûlée, de façon à éviter une ignition causée par du bruit numérique dans le medium non-brûlé.

Exemple 7.3.1. *Cet exemple est un cas classique de détonation forte où les longueurs caractéristiques, $c = \sqrt{\gamma p/\rho}$ et $L_{1/2}$, ont été normalisées à $\sqrt{\gamma}$ et 1. Ce cas est employé, entre autres, par Bourlioux [12] pour l'étude des instabilités. Nous reprendrons cet exemple dans le dernier chapitre pour l'étude multiéchelle.*

$$(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1),$$

$$K_0 = 165.6762. E^+ = 50. q_0 = 50. \gamma = 1.2.$$

Le degré de poussée (voir (1.2.14)) est fixé à $f = 1.74$, de sorte que la détonation soit stable.

L'onde de combustion se propage à une vitesse de $s = 8.9823$ et le gaz brûlé est caractérisé par $(\rho, p, u, Z)_1 = (3.9086, 61.0399, 6.6842, 0)$ avec une température et une pression de von Neumann de 7.6502 et 73.2563.

À la figure 7.3, les résultats numériques obtenus avec l'approche ACM et DDD sont comparés à la solution exacte (trait continu en noir). La discrétisation choisie est de $\Delta x = 2100 = 2.1 \times 10^3 L_{1/2}$, ce qui ne permet pas de résoudre la réaction chimique. Le profil observé en témoigne par l'absence du pic de von Neumann. La solution exacte exhibée ici consiste en la position du choc, l'échelle utilisée étant trop grossière pour pouvoir observer le pic de von Neumann. Les conditions initiales sont constituées des deux états constants (1) et (0) séparés par une discontinuité. Les mêmes résultats sont observés pour des conditions initiales contenant le profil ZND, mais nous croyons cependant qu'il est plus réaliste, étant donné la discrétisation, de débiter avec un profil de type plateaux.

La capture du choc en un point (voir le profil de pression par exemple) est l'oeuvre de la compression artificielle. Malgré la discrétisation employée, le profil est exact sans aucune restriction quant à la température d'ignition. De plus, rappelons que le schéma PC de volumes finis ne requiert pas la solution du problème de Riemann pour les équations d'Euler.

La vitesse moyenne calculée pour 4000 pas de temps est de $S_Z^n = 8.9894$, ce qui mène à une erreur relative de 7.9044×10^{-4} (ou 0.07904%) sur la vitesse obtenue par la théorie de Chapman-Jouguet, ce qui est très précis.

La figure 7.4 compare les résultats obtenus avec ACM et DDD (en bleu) et sans (en rouge). Pour le cas sans compression, on observe clairement la solution non-physique, caractérisée par un plateau, conséquence de la formation de deux ondes

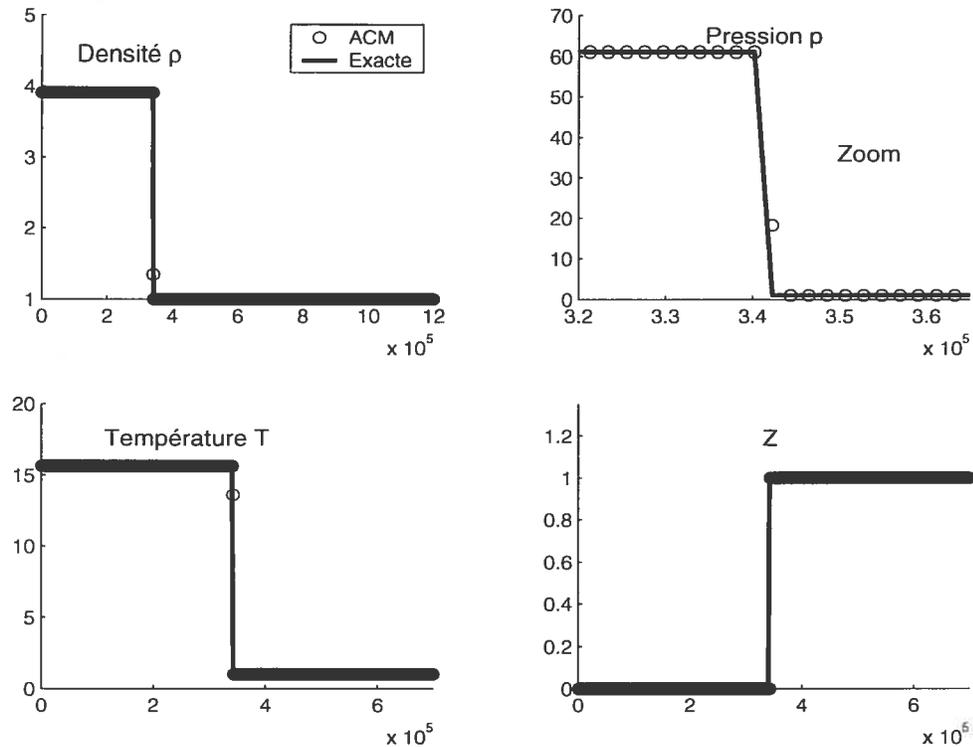


FIG. 7.3. Exemple 7.3.1, avec PC et ACM, $\Delta x = 2100 = 2.1 \times 10^3 L_{1/2}$, CFL= 0.4, $t = 38135.99$ (500 pas de temps).

se propageant à une vitesse différente. La plus rapide étant la détonation faible non-physique et la plus lente, l'onde de choc non-réactif reliant le gaz brûlé à son état final. La vitesse moyenne de propagation est de $S_Z^n = 13.79775$, une quantité qui est approximativement égale au ratio $\Delta x / (2\Delta t)$. Ceci est bien sûr la conséquence d'un traitement numérique non-adéquat, car cette vitesse indique qu'une demie cellule est brûlée à chaque pas de temps.

7.3.2. Chimie d'ignition

Le comportement de la loi d'Arrhenius peut être imité par une chimie d'ignition

$$K(T) = \begin{cases} 1/\tau, & T \geq T_{ign}; \\ 0, & T < T_{ign}, \end{cases} \quad (7.3.3)$$

où τ représente l'échelle de temps de la réaction chimique.

Exemple 7.3.2. *Cet exemple consiste lui aussi en une détonation forte, mais avec une chimie d'ignition. Malgré le fait que la chimie continue d'Arrhenius*

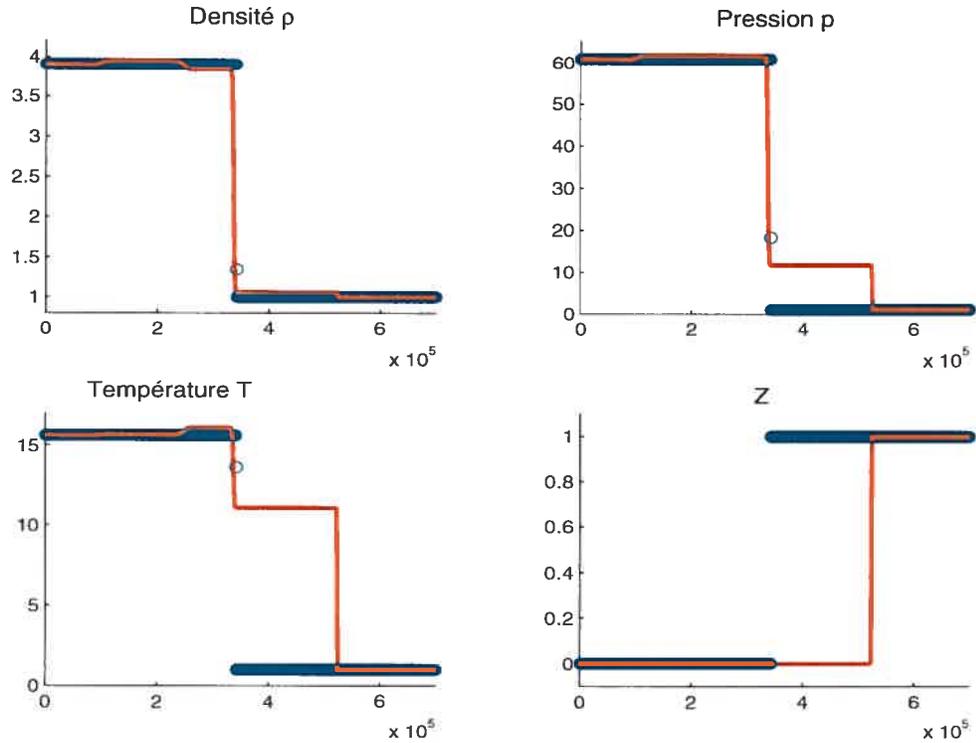


FIG. 7.4. Exemple 7.3.1, $\Delta x = 2100 = 2.1 \times 10^3 L_{1/2}$, $t = 38135.99$ (500 pas de temps). En rouge, sans ACM ni DDD.

soit plus proche de la réalité, la chimie discontinue d'ignition s'avère être un test numérique plus sévère.

$$(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1),$$

$$q_0 = 50, \gamma = 1.2, f = 1.6.$$

L'état brûlé est donné par $(\rho, p, u, Z)_1 = (3.64282, 54.8244, 6.2489, 0)$, avec une température et une pression de von Neumann de 7.1136 et 67.3548. La vitesse de propagation est de 8.6134.

Le but de l'expérience est d'étudier les limites des méthodes PC avec et sans l'ACM et DDD, pour une discrétisation fixée à $\Delta x = 0.25$.

Pour ce cas, nous avons voulu trouver le τ minimum (τ_{\min}) pour lequel les versions avec et sans ACM fournissent encore la solution physique (voir la section 4.2.4.1 du chapitre 4 pour une définition de τ_{\min}).

Dans les travaux de Berkenbosch [7], il est démontré que la température d'ignition joue un rôle primordial sur la détermination de τ_{\min} . En effet, plus on augmente la température d'ignition, moins l'étalement du choc aura un effet néfaste. Selon des arguments basés sur le modèle visqueux (voir le chapitre 2 et la section 3.2 du chapitre 3), la condition selon laquelle on ne peut observer de solutions non-physiques est que la température d'ignition soit supérieure à la température atteinte après le passage d'une détonation faible (T_{faible}). Ceci empêche clairement la création d'une détonation faible caractérisée par la température T_{faible} . Étant donné que l'on résout ce problème en séparant les opérateurs (l'advection et ensuite la réaction chimique), on peut relaxer cette condition en imposant que la température d'ignition additionnée de l'augmentation de la température pendant la réaction chimique soit supérieure à T_{faible} : $T_{faible} < T_{ign} + (T_i^{n+1} - T_i^*)$, où T_i^* est la température atteinte après l'advection du gaz ($F : Z^n \rightarrow Z^*$), dans la zone de discontinuité. Cette condition se traduit par

$$T_{faible} < T_{ign} + (\gamma - 1)q_0 Z_i^* (1 - \exp(-\Delta t/\tau)). \quad (7.3.4)$$

La température après le passage de la détonation faible est facilement obtenue grâce aux relations de Crussard et de Rayleigh de la théorie Chapman-Jouguet, exposée au chapitre 1. Pour cet exemple, $T_{faible} = 11.2454$ et pour les cas très raides, $1 - \exp(-\Delta t/\tau) \cong 1$. La relation (7.3.4) devient

$$T_{ign} > 11.2454 - 10Z_i^*. \quad (7.3.5)$$

De plus, étant donné que le maillage est décalé on a toujours, pour la capture en 1 point dans les cas très raides, que $Z_i^* < 1/2$. Ceci peut s'expliquer à l'aide du raisonnement suivant. Supposons les conditions suivantes :

$$Z_j^n = \begin{cases} 0, & j \leq J; \\ 1, & j > J. \end{cases}$$

Dans les cas raides, où tout le gaz de la cellule brûle pendant la chimie, on retrouve ces conditions au début de chaque pas de temps. Sachant que la dernière équation du système d'Euler réactif se réduit à $Z_t + uZ_x = -ZK(T)$, on peut approximer (à l'ordre 1) la proportion de gaz non-brûlé après l'advection (avec séparation

d'opérateurs) par

$$Z_{j+1/2}^* = \begin{cases} 0. & j < J: \\ \bar{Z}_{J+1/2} - \lambda \bar{u}_{J+1/2} (Z_{J+1}^n - Z_J^n) = 1/2 - \lambda \bar{u}_{J+1/2} \leq 1/2. & j = J: \\ 1. & j > J. \end{cases} \quad (7.3.6)$$

Ceci implique qu'avec la compression artificielle, la température d'ignition minimale pour laquelle on n'observera jamais de solution non-physique est d'au moins 6.2454. Ce serait donc de tricher que de choisir une température d'ignition supérieure à 6.2454, pour ce cas test. En effet, pour une température d'ignition au delà de 6.2454, aucune solution non-physique n'est possible.

Le tableau 7.1 illustre les échelles de temps limites, i.e. τ_{\min} , pour une discrétisation fixée à $\Delta x = 0.25$ et $CFL = 0.4$, pour trois températures d'ignition différentes, pour les méthodes avec et sans ACM.

On remarque que l'ACM permet une résolution environ trois fois plus grossière.

T_{ign}	τ_{\min}	$\Delta t_{moyen} / \tau_{\min}$	$\Delta x / L_{1/2}$	ACM
1.01	0.01446	0.6589	19.8208	Oui
	5.5472	0.0016678	0.051651	Non
3.00	0.009927	0.9595	28.8617	Oui
	0.02762	0.3443	10.3725	Non
5.00	0.005318	1.7911	53.8764	Oui
	0.01070	0.8883	16.6312	Non

TAB. 7.1. Performance des méthodes PC, pour différentes températures d'ignition, avec $\Delta x = 0.25$, pour l'exemple 7.3.2.

Pour la température d'ignition minimale, i.e. 1% de plus que la température du gaz non-brûlé, l'approche ACM est la seule à pouvoir fonctionner en régime sous-résolu. Remarquons que l'approche ACM fournit une solution physique pour un pas d'espace de près de 20 fois plus grand que la zone de demi-réaction.

Comme prévu, plus la température de seuil (T_{ign}) augmente, plus les méthodes

sont robustes en régime sous-résolu. Les températures d'ignition limites, pour lesquelles les schémas avec et sans ACM fournissent la solution physique pour tout τ , sont entre 5 et 6 avec ACM et entre 6 et 7 sans (tel que prévu par l'analyse précédente). Consulter la figure 7.5 pour un résumé des performances des deux méthodes.

Mentionnons finalement que le test où la température d'ignition est fixée à 1.01 constitue, sans contredit, le test le plus sévère. C'est pour cette raison que nous fixerons, pour les 2 exemples à venir $T_{ign} = 1.01 \max(T_0)$ (où T_0 est la température du gaz non-brûlé).

7.3.3. Collision d'ondes

L'exemple suivant permet de tester la robustesse de notre approche en présence d'autres ondes que la détonation.

Exemple 7.3.3. *Il est question de la collision entre une détonation et une raréfaction [6]. Les paramètres sont les mêmes qu'à l'exemple précédent, mais avec les conditions initiales*

$$(\rho, p, u, Z)_0 = \begin{cases} (2.0, 40.0, 4.0, 0), & x \leq 10; \\ (3.64282, 54.8244, 6.2489, 0), & 10 < x \leq 20; \\ (1, 1, 0, 1), & 20 < x. \end{cases} \quad (7.3.7)$$

Dans cet exemple, il y a une détonation (la même qu'à l'exemple précédent), une raréfaction et une discontinuité de contact se propageant vers la droite et une raréfaction se déplaçant vers la gauche. Le but est de vérifier la capacité de l'approche ACM à gérer les interactions avec d'autres ondes non-réactives.

La température d'ignition a été fixée à 1.01, pour rendre le test le plus difficile possible. L'interaction avec la raréfaction perturbe la capture de la détonation, car l'échelle de temps minimale requise pour l'approche ACM avec une discrétisation de $\Delta x = 0.25$ est $\tau_{min} = 1/66 = 0.01515$, comparativement au cas sans raréfaction où $\tau_{min} = 0.01446$.

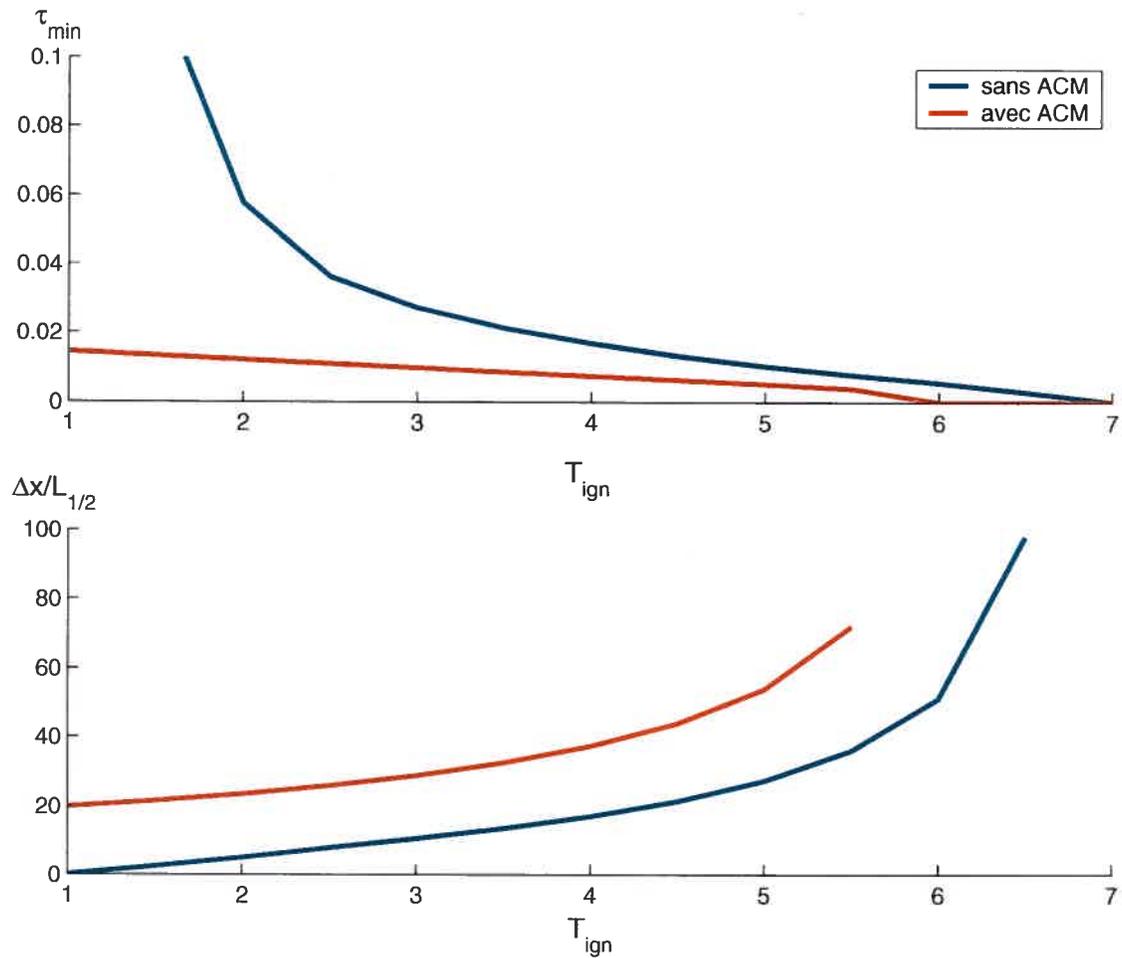


FIG. 7.5. Performance des deux approches en fonction de la température d'ignition. Les coupures de $\Delta x / L_{1/2}$ indiquent qu'à partir de cette température d'ignition, le schéma fournit toujours la solution physique (τ_{min} t.q. $L_{1/2} \simeq 0$).

On compare les résultats obtenus avec ACM sous-résolue ($\Delta x = 18.91038L_{1/2}$) avec ceux de la simulation sans ACM pour une discrétisation résolue de $\Delta x = 0.0005 = 0.037821L_{1/2}$, soit plus de 26 points dans la zone de demi-réaction.

On a, à la figure 7.6, la solution au temps $t = 2$, soit avant la collision et, à la figure 7.7, la solution à $t = 8$, soit après la collision. Cette expérience est la même que celle présentée par Bao et Jin [6], à la différence qu'ils ont choisi une température d'ignition supérieure à la nôtre, soit $T_{ign} = 3$, rendant du coup l'expérience

moins difficile. Malgré cela, contrairement à leurs résultats, nous n'observons aucune oscillation derrière la détonation.

On remarque que la discontinuité de contact située derrière la détonation (dans le gaz brûlé) est captée en plus d'un point. Ceci s'explique par le fait que le détecteur de discontinuités empêche de compresser dans le gaz brûlé : il ne permet la compression que dans le gaz non-brûlé, étant donné que le choc non-réactif s'y trouve. En d'autres mots, il indique au constructeur de flux de compression de ne pas agir lorsque le gaz est brûlé.

L'approche ACM permet donc l'interaction avec d'autres ondes non-réactives. Notre solution ACM ne dépend pas des conditions initiales, c'est-à-dire que le solveur s'adapte sans effort à une modification de la solution du problème de Riemann pour la version homogène du système d'Euler réactif. Cette propriété de flexibilité ouvre la voie à une multitude d'applications. Ceci constitue un avantage évident comparativement à d'autres méthodes, telles que celle proposée par Helzel et al [40, 41]. Dans leur cas, on permet au gaz de brûler seulement dans une zone déterminée par la solution du problème de Riemann pour la version homogène du système d'Euler réactif. Cette zone correspond à la portion située entre le choc et la discontinuité de contact. En changeant les conditions initiales, le problème de Riemann est modifié. Dans ce cas, il est pertinent de se demander si, lors d'interaction avec d'autres ondes non-réactives, il est suffisant d'empêcher le gaz de brûler entre le choc et la discontinuité de contact pour éviter la solution non-physique. Ce genre de question soulève le manque de flexibilité de la méthode.

7.3.4. Interaction avec un profil oscillatoire

Cet exemple est semblable aux deux précédents, à la différence que la détonation évolue dans un milieu non-brûlé à densité non-constante.

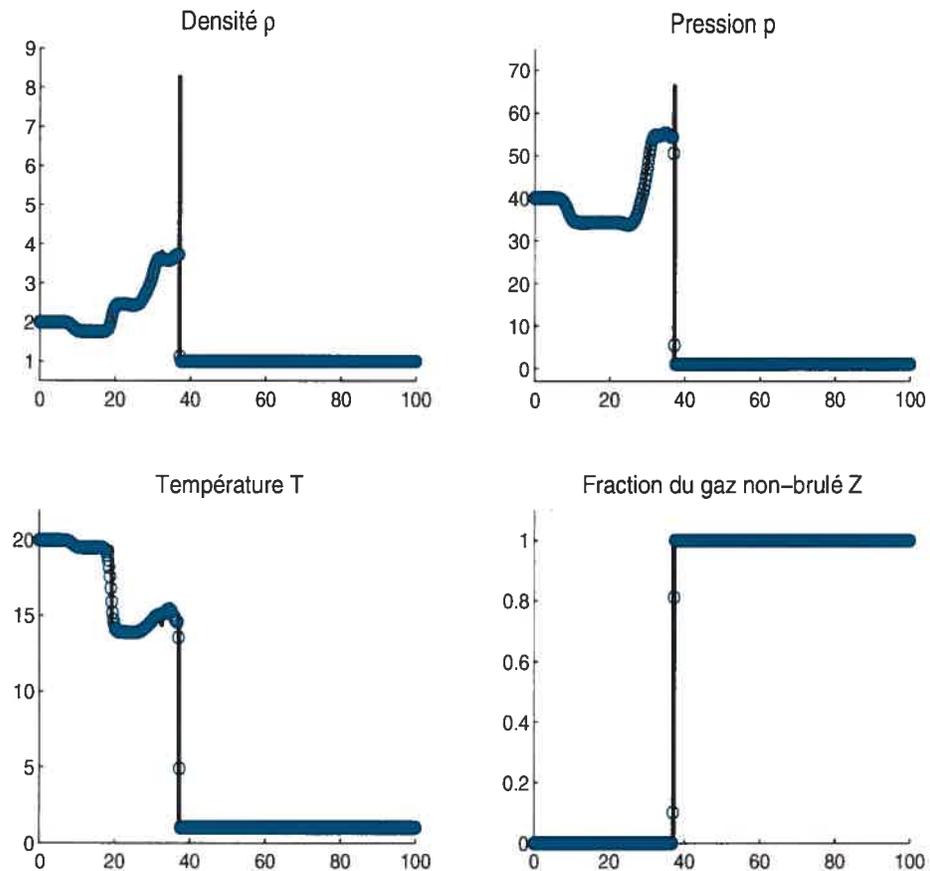


FIG. 7.6. Exemple 7.3.3, $\tau = 1/66$, à $t = 2$, avant la collision entre la détonation et la rarefaction. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.037821L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = 0.25 = 18.91038L_{1/2}$, 210 pas de temps. On observe majoritairement que la solution avec ACM et DDD (bleu), car elle approxime parfaitement la solution "exacte".

Exemple 7.3.4. *L'exemple est aussi tiré des travaux de Bao et Jin [6]. Les conditions initiales sont définies par*

$$(\rho, p, u, Z)_0 = \begin{cases} (1.79463, 21.53134, 3.01511, 0), & x \leq \pi/2; \\ (\rho(x), 1, 0, 1), & \pi/2 < x, \end{cases} \quad (7.3.8)$$

avec $\rho(x) = 1 + 0.5 \sin(2x)$, où $\Delta x = \pi/400$. Le degré de poussée (voir (1.2.14)) a été choisi à $f = 1$ de façon à ce que la densité du gaz brûlé ne puisse atteindre

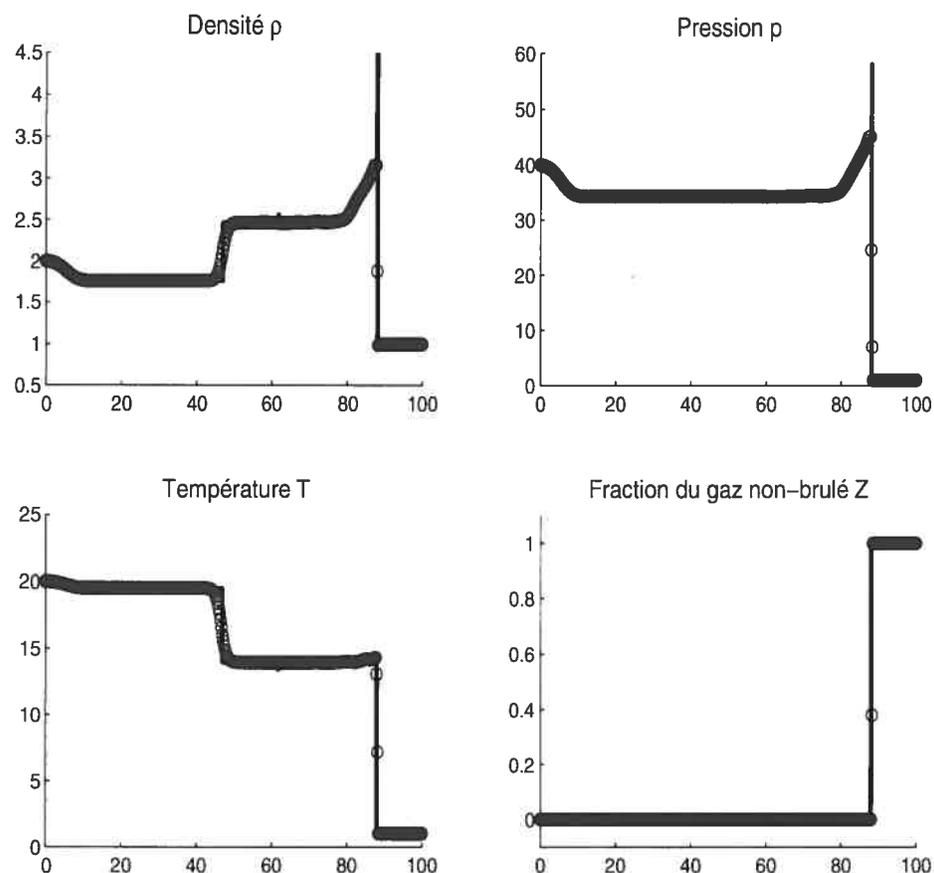


FIG. 7.7. Exemple 7.3.3, $\tau = 1/66$, à $t = 8$, après la collision de la détonation et de la rarefaction. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.037821L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = 0.25 = 18.91038L_{1/2}$, 210 pas de temps. On observe majoritairement que la solution avec ACM et DDD (bleu), car elle approxime parfaitement la solution "exacte".

une valeur inférieure à celle du gaz non-brûlé. Le reste des paramètres sont les mêmes que pour les deux exemples précédents. Ce profil exagérément oscillatoire a pour but de tester la capacité de l'approche ACM d'évoluer dans un gaz qui n'est pas au repos. De plus, le cas d'un gaz non-brûlé avec densité non-constante sera repris, en version plus douce, pour l'étude multiéchelle.

Pour un cas comme celui-ci, le détecteur de discontinuités doit être légèrement modifié. En effet, si la méthode de compression artificielle compresse aveuglément partout dans le gaz non-brûlé, les extrema des oscillations seront aplatis. Il s'agit d'imposer une condition supplémentaire au DDD relative à la pente. En deçà d'une pente de seuil, on ne doit pas compresser. Cette condition est facile à implémenter et rappelons que le cas étudié dans cet exemple est extrême et que dans des situations plus réalistes, le gaz inerte est moins agité.

Pour éviter qu'il y ait une réaction chimique prématurée dans le gaz non-brûlé, aux endroits où $T_0(x) > T_{ign}$, il faut fixer la température d'ignition selon la valeur maximale de la température dans le gaz inerte, donc selon la densité minimale. La température d'ignition est donc fixée à $1.01 \max(T_0) = 2.2$.

La figure 7.8 montre la solution obtenue avec l'approche ACM à $t = \pi/20$ et la figure 7.10, à $t = \pi/5$. On voit à la figure 7.9, un gros plan de la densité et de la pression au temps $t = \pi/20$. La solution de référence est obtenue avec PC, sans ACM et avec une discrétisation de $\Delta x = \pi/10000$.

On peut voir que la solution sous-résolue obtenue avec ACM et DDD est très rapprochée de la solution de référence (résolue, sans ACM), et ce avec une discrétisation 25 fois plus grossière. De plus, la solution est stable autour de la discontinuité, on n'observe pas d'oscillation autour du choc.

Ces quatre exemples montrent la robustesse de l'approche ACM en régime sous-résolu. En plus de fournir la solution physique avec un maillage très grossier, jusqu'à 2100 fois la zone de demi-réaction pour une chimie continue et 20 fois dans le cas plus sévère d'une chimie discontinue, notre approche permet la capture de la détonation dans des contextes physiques plus élaborés. En effet, avec un maillage sous-résolu, l'approche permet une bonne capture de la solution physique lors d'interactions avec des ondes non-réactives et pour un gaz non-brûlé en mouvement.

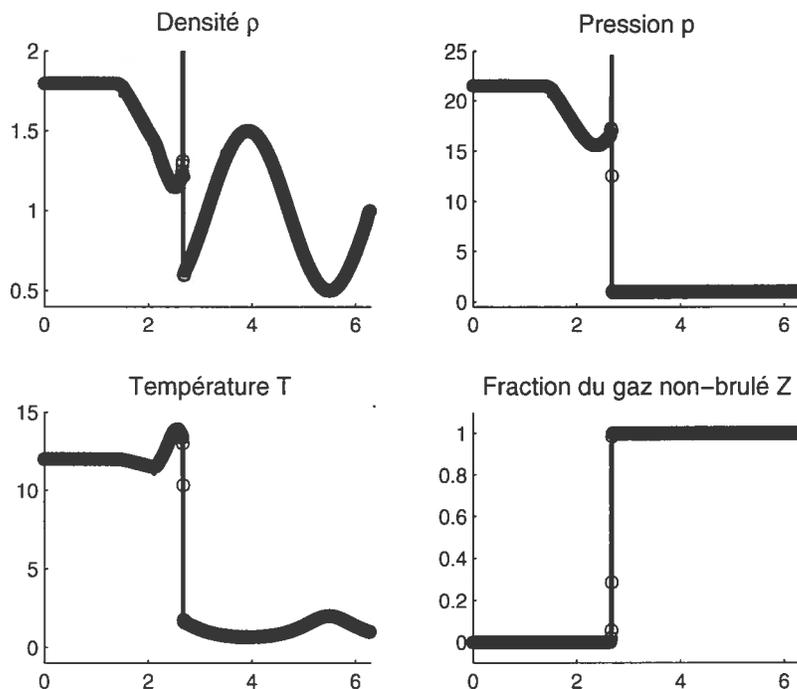


FIG. 7.8. Détonation se propageant dans un gaz à densité non-constante, exemple 7.3.4, à $t = \pi/20$, $\tau = 0.001$, 388 pas de temps. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.36367L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = \pi/400 = 9.09174L_{1/2}$.

7.4. RÉSULTATS EN 2D

L'élaboration d'une méthode de compression artificielle bi-dimensionnelle est présentement sous investigation. Ce sujet constitue le principal intérêt de recherche d'Olivier Rouch. Les résultats préliminaires sont très intéressants, mais au moment de l'écriture de ces lignes, des ajustements restent à faire. Les résultats paraîtront sous peu dans [68] et [70]. L'application au cas de la détonation fera l'objet d'une publication conjointe.

Le principal défi de la compression bi-dimensionnelle est la détermination de la direction de compression. Comme il a été discuté précédemment, un schéma sera affecté par une surcompression. En deux dimensions, une compression dans la

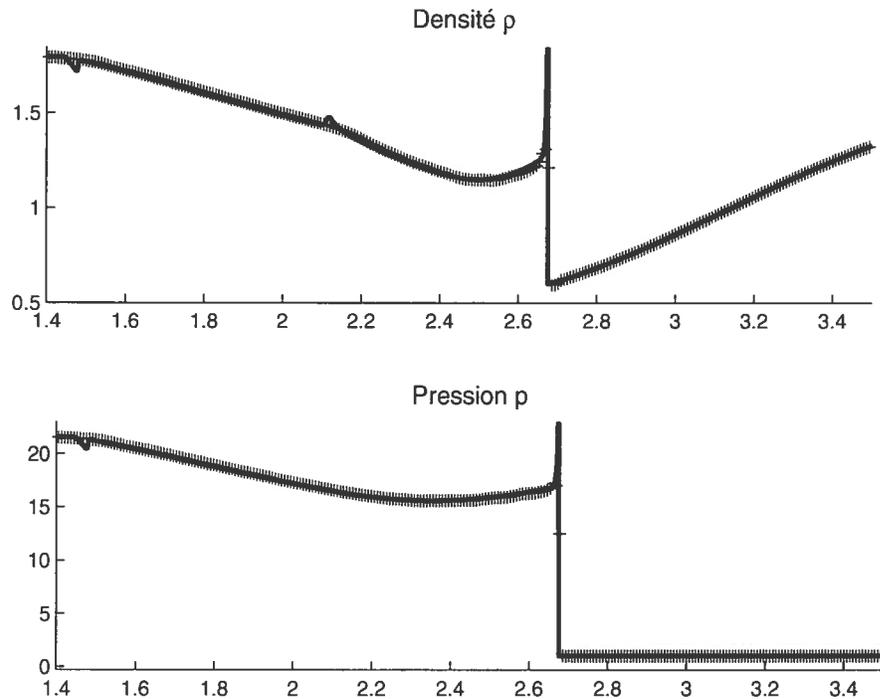


FIG. 7.9. Zoom. Détonation se propageant dans un gaz à densité non-constante, exemple 7.3.4, à $t = \pi/20$, $\tau = 0.001$, 388 pas de temps. En noir, la solution de référence, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.36367L_{1/2}$ et en bleu, avec ACM et DDD, pour $\Delta x = \pi/400 = 9.09174L_{1/2}$.

mauvaise direction aura un impact similaire à la surcompression. La compression doit être appliquée dans le sens de la propagation de l'onde. Malheureusement, déterminer la direction de propagation d'une onde à l'aveugle, est une opération très coûteuse. Une méthode "avec mémoire", qui utilise une trace du front d'onde enregistrée périodiquement, permettrait de déterminer le sens de la propagation de façon moins dispendieuse. Cette idée est présentement sous investigation.

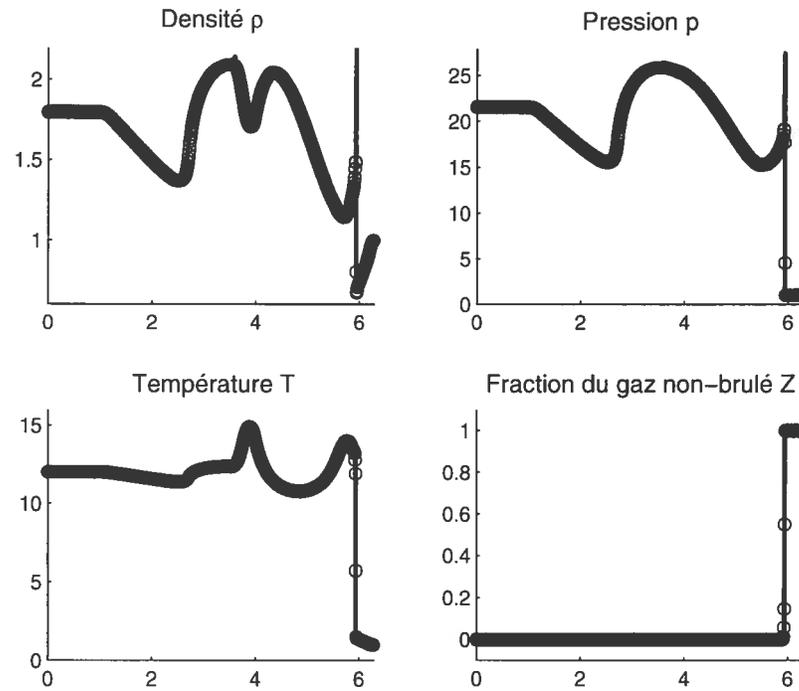


FIG. 7.10. Détonation se propageant dans un gaz à densité non-constante, exemple 7.3.4, à $t = \pi/5$. $\Delta x = \pi/400 = 9.09174L_{1/2}$, $\tau = 0.001$, 826 pas de temps. En noir, sans ACM ni DDD, avec $\Delta x = 0.36367L_{1/2}$

Chapitre 8

LIMITES DE LA CAPTURE EN UN POINT

L'hypothèse que l'étalement du choc sur plusieurs cellules cause la bifurcation vers la solution non-physique est largement acceptée. Au chapitre précédent, nous avons exploré cette hypothèse grâce à la compression artificielle. En effet, la compression artificielle permet une capture des discontinuités sur une seule cellule, ce qui constitue l'étalement minimal.

L'implémentation de l'ACM avec le DDD approprié améliore de beaucoup la capture des détonations avec un maillage grossier. Cependant, comme nos expérimentations nous l'ont démontré, il existe encore un point de rupture, c'est-à-dire une discrétisation limite en dessous de laquelle le schéma avec l'ACM n'est plus en mesure de fournir la solution physique.

Dans ce chapitre, il sera question de cette discrétisation limite, dans le contexte des méthodes à pas fractionnaires. Son existence, même pour les schémas de Glimm, permettant une largeur nulle de capture, sera démontrée.

Dans la section 8.3, une modification externe aux schémas PC avec (ou sans) ACM sera présentée (voir aussi [69]). Les expériences du chapitre 7 seront reprises avec cette modification.

8.1. EXISTENCE D'UNE DISCRÉTISATION LIMITE

Considérons une méthode avec séparation d'opérateurs pour le problème de la détonation

$$u^{n+1} = \mathcal{R} \circ \tilde{\mathcal{F}} \circ u^n = \mathcal{R} \circ u^*, \quad (8.1.1)$$

où $\tilde{\mathcal{F}}$ est, comme à l'habitude, le solveur de la partie homogène du problème et \mathcal{R} un solveur pour la réaction chimique. Dans le cas de PC, la structure prédicteur-correcteur implique une résolution de la réaction chimique intermédiaire (au prédicteur). Le chapeau sur l'opérateur $\tilde{\mathcal{F}}$ indique justement la composition possible de ces solveurs. Le point à retenir de cette forme générale (8.1.1) est que la dernière opération effectuée est une chimie. La solution u^* est l'état intermédiaire entre l'advection avec ou sans compression et la dernière chimie.

Pour l'instant, considérons le cas optimal où l'ACM est appliquée, c'est à dire lorsque le choc est capté sur une seule cellule. Notons par u_c^* l'état intermédiaire dans l'unique cellule contenant l'information sur la discontinuité. On a alors que Z_c^* est la proportion de gaz non-brûlé avant la réaction chimique, dans l'unique cellule contenant l'information sur le choc.

On a ainsi que

$$Z_c^* \in [Z_0, Z_1[= [1, 0[,$$

ce qui nous permet de définir $0 \leq \varepsilon < 1$ tel que

$$Z_c^* = 1 - \varepsilon, \quad (8.1.2)$$

où les indices 0 et 1 réfèrent encore aux états non-brûlé et brûlé respectivement.

Comme l'équation différentielle

$$Z_t = -ZK(T) \quad (8.1.3)$$

peut être résolue exactement (en supposant bien sûr que la température reste constante), nous avons que pour le cas de la chimie d'ignition, lorsque $T_c^* > T_{ign}$,

$$\begin{aligned} Z_c^{n+1} &= Z_c^* \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \\ &= (1 - \varepsilon) \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right). \end{aligned} \quad (8.1.4)$$

Nous pouvons maintenant donner une première définition de la *discrétisation limite*.

Définition 8.1.1.

$$\forall \varepsilon \in [0, 1) \text{ et } \forall \delta > 0. \exists \left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)' > 0 \text{ tel que}$$

$$\left(\frac{\Delta t}{\tau}\right) \geq \left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)' \Rightarrow (1 - \varepsilon) \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) < \delta.$$

Il existe toujours une discrétisation limite $\left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)'$ telle que tout le gaz dans la cellule (ou la moitié, pour les maillages décalés) brûlera à chaque pas de temps, menant à la formation d'une onde de combustion se propageant à la vitesse non-physique de $\Delta x/\Delta t$ ($\Delta x/2\Delta t$ pour les maillages décalés).

La discrétisation limite a été définie dans un contexte continu. Étant donné que nous travaillons sur des domaines discontinus, la définition de limite et donc de convergence est légèrement différente. Elle dépend, entre autres choses, de la capacité de la machine à représenter les nombres de petite taille.

Définition 8.1.2. *Il existe une discrétisation limite $\left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)'_d < \left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)'$ telle que pour tout $\left(\frac{\Delta t}{\tau}\right) > \left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)'_d$, on a $(1 - \varepsilon) \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \simeq 0$ (le symbole $\simeq 0$ indique numériquement nul).*

À l'avenir, nous adopterons la dernière définition 8.1.2 de discrétisation limite et pour alléger l'écriture, on laissera tomber l'indice d .

L'influence de ε sur la détermination de la discrétisation limite n'est pas négligeable, il n'empêche cependant pas son existence. Dans le cas des méthodes de Glimm, où à chaque pas de temps $\varepsilon = 0$ ($Z_c^* = 1$), la discrétisation limite est plus grande que dans le cas avec ACM, mais existe toutefois. Ainsi, même avec une méthode qui capte les discontinuités en 0 point à chaque pas de temps, il existe une discrétisation limite $\left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)'$ au delà de laquelle la méthode bifurquera vers la solution non-physique. Le même raisonnement peut être repris pour une chimie d'Arrhenius. Dans ce cas, le point limite sera défini en fonction de $\Delta t K_0 \exp(-E^+/T)$.

En pratique, la discrétisation limite dépend surtout du schéma utilisé pour l'advection et du cas test étudié. Il est très difficile de déterminer explicitement $(\frac{\Delta t}{\tau})'$ pour un cas test et une méthode donnée. La raison principale est que la valeur de ε change à chaque pas de temps. Il dépend continuellement de sa valeur au pas de temps précédent. Nous savons toutefois que, pour les schémas de type central, $\varepsilon > 1/2$ à chaque pas de temps (étant donné la CFL sous la barre de 0.5. Voir la section 7.3.2, équation (7.3.6)). Ainsi, la discrétisation limite pour chaque pas de temps constitue la valeur maximale de la discrétisation limite pour le schéma complet. À la figure 8.1, on voit que pour $Z_c^* = 0.5$ (soit sa valeur maximale pour un schéma de type central), si $(\frac{\Delta t}{\tau})' \geq 2$, alors le gaz d'une cellule presque complète (plus de 93%) brûlera à chaque pas de temps. La composition des pas de temps ne peut que ramener cette limite à une valeur inférieure, car il est presque impossible d'obtenir $Z_c^* = 0.5$ à chaque pas de temps, situant la limite en bas de 2.

Dans le cas d'un schéma de Glimm, Z_c^* vaut 1 à chaque pas de temps. Dans ce cas, la discrétisation limite peut alors être fixée au voisinage de $(\frac{\Delta t}{\tau})' = 3$, car ainsi la proportion de gaz non-brûlé après la réaction chimique approxime 0.0498 (voir la figure 8.1), ce qui est suffisamment petit pour considérer que le gaz de la cellule est entièrement brûlé. Rappelons toutefois que les schémas de Glimm ne sont pas totalement conservatifs et qu'ils n'existent pas en 2 ni en 3 dimensions spatiales. Les discrétisations limites trouvées pour l'exemple de la chimie d'ignition (7.3.2) sont illustrées à la figure 8.2. À chaque pas de temps, avec l'approche ACM, entre 74% et 95% du contenu d'une cellule sera transformée en gaz brûlé. Ceci constitue la limite, i.e. que si l'on diminue l'échelle de temps pour Δt fixé, ce sera trop de gaz qui brûle à chaque fois pour que la vitesse de combustion demeure à s .

8.2. INFLUENCE DE LA MOYENNE

Pour une capture en un point, lorsque le cap de la discrétisation limite a été franchi, le problème de la détonation revient à un problème de point fixe attractif. L'état brûlé représente le point fixe attractif : à chaque fois que l'on active une

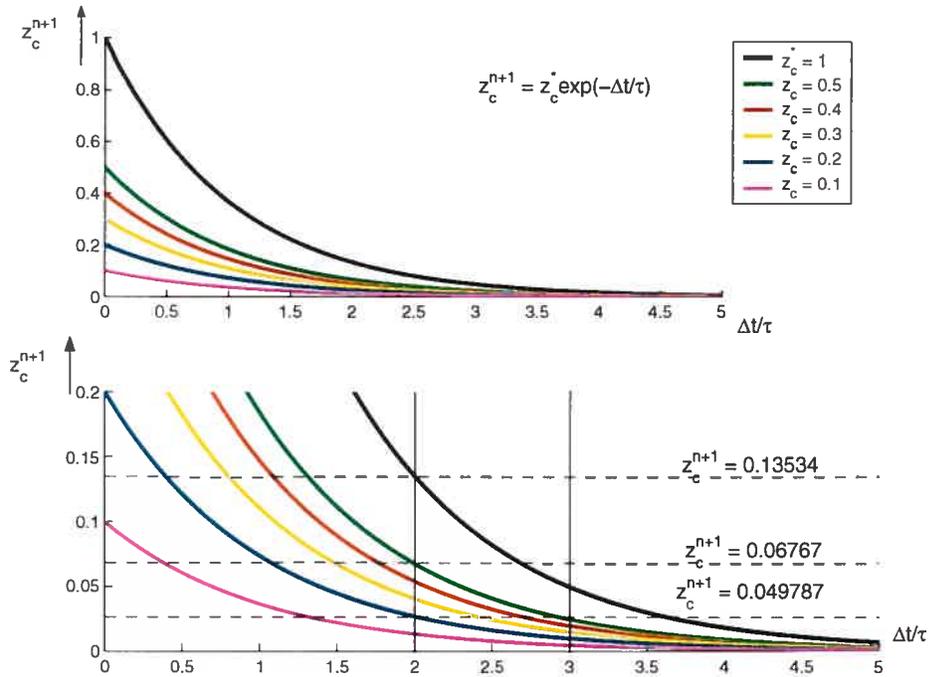


FIG. 8.1. Influence de ε sur la discrétisation limite.

cellule ($T \geq T_{ign}$), l'état de son contenu converge automatiquement vers le point fixe, l'état $(\rho, p, u, Z)_1$. Dans ces conditions, on ne peut s'empêcher de penser au cas test classique d'analyse numérique de Leveque et Yee [50]. Dans ce cas, il est question d'une équation de Burgers avec un terme de source comportant trois points fixes, 2 étant attractifs et un répulsif :

$$u_t + uu_x = -\frac{1}{\mu}u(u-1)(u-1/2). \quad (8.2.1)$$

Il est démontré dans [50] que lorsque l'échelle de temps μ associée à la source devient très petite par rapport à la discrétisation spatiale ou temporelle, la solution numérique devient non-physique. La discontinuité se propage alors à la vitesse d'une cellule par pas de temps, ce qui est forcément dû à un mauvais traitement numérique.

Plusieurs auteurs suggèrent que le problème de la mauvaise capture de la détonation avec un maillage grossier est le même que celui du cas de Leveque et Yee. Nos expérimentations démontrent que ce n'est pas tout à fait le cas. C'est l'étalement du choc sur plusieurs cellules qui est le premier responsable du mauvais

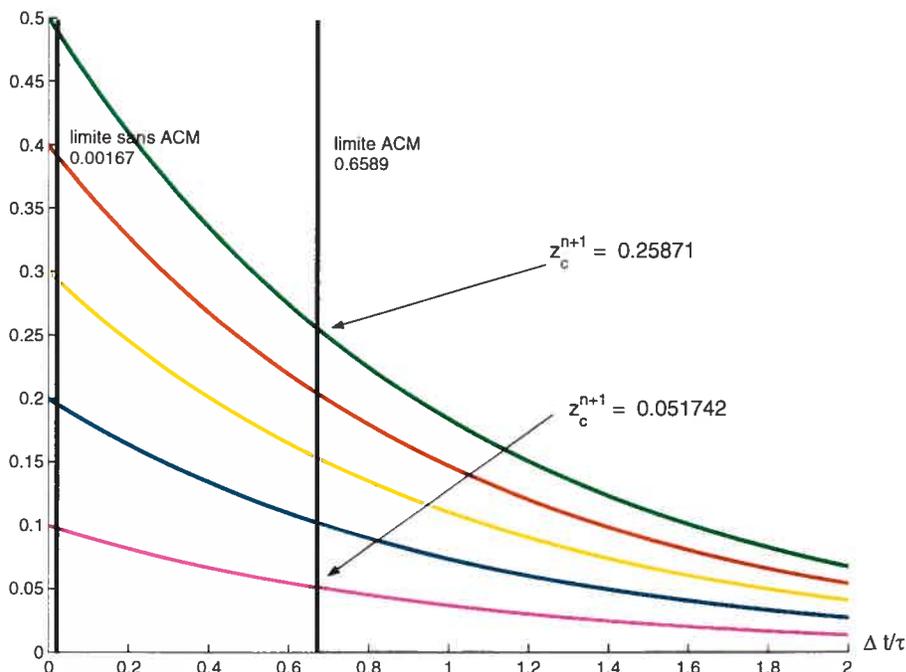


FIG. 8.2. Position des limites pour l'exemple 7.3.2, agrandissement de 8.1. Les limites ACM et sans ACM sont les valeurs de $\Delta t/\tau$ pour lesquelles les schémas PC avec et sans ACM cessent de fournir la solution physique.

comportement des schémas de volumes finis avec la détonation. Lorsque ce problème est réglé, par exemple avec l'ACM, on retombe, lorsqu'on prend $\Delta t/\tau$ trop grand, sur le problème de point de fixe rencontré lors du traitement de l'équation scalaire (8.2.1). C'est pour cette raison que nous croyons qu'il est faux d'associer a priori ces deux problèmes. Par exemple, ni l'ACM ni les méthodes de Glimm ne pourraient régler le problème de convergence vers une solution non-physique pour l'équation scalaire (8.2.1). D'un autre côté, rien n'assure qu'une méthode bâtie spécifiquement pour le cas scalaire de Leveque et Yee fonctionnerait pour la détonation.

Étant donné que, dans des cas de raideur extrême ($((\Delta t/\tau)' < (\Delta t/\tau))$), avec l'utilisation de la compression artificielle, on se retrouve justement avec la même problématique que celle décrite par Leveque et Yee, nous pouvons tirer la même

conclusion qu'eux : le processus de moyenne impliqué dans les méthodes de volumes finis est responsable du comportement numérique erroné. Dans cette même direction, il a d'ailleurs été suggéré par Abgrall [1] que le processus de moyenne dans la cellule empêche l'approximation adéquate de la matière non-conservée. Dans des cas impliquant un terme de source raide, tels la détonation, ce manque de précision a les conséquences désastreuses que l'on connaît.

Pour voir comment c'est possible, reprenons la forme intégrale d'une loi de conservation avec terme de source

$$\frac{d}{dt} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t) dx = f(u(x_j, t)) - f(u(x_{j+1}, t)) + \int_{x_j}^{x_{j+1}} g(u(x, t)) dx, \quad (8.2.2)$$

qui peut être intégrée exactement

$$\begin{aligned} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t^{n+1}) dx &= \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, t^n) dx \\ &- \left[\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_j, t)) dt \right] \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_j}^{x_{j+1}} g(u(x, t)) dx dt. \end{aligned} \quad (8.2.3)$$

En utilisant la notation $\langle \cdot \rangle_a^b := \frac{1}{|b-a|} \int_a^b$, l'expression (8.2.3) devient

$$\begin{aligned} \langle u(x, t^{n+1}) \rangle_{x_j}^{x_{j+1}} &= \langle u(x, t^n) \rangle_{x_j}^{x_{j+1}} \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\langle f(u(x_{j+1}, t)) \rangle_{t^n}^{t^{n+1}} - \langle f(u(x_j, t)) \rangle_{t^n}^{t^{n+1}} \right) \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \langle g(u(x, t)) \rangle_{x_j}^{x_{j+1}} dt. \end{aligned} \quad (8.2.4)$$

Lors du traitement numérique du terme de source, nous devons faire le compromis suivant :

$$\langle g(u(x, t)) \rangle_{x_j}^{x_{j+1}} \cong g \left(\langle u(x, t) \rangle_{x_j}^{x_{j+1}} \right). \quad (8.2.5)$$

Cette approximation est typique des schémas de volumes finis pour système avec terme de source. L'expression (8.2.5) n'est exacte que dans les cas où g est une fonction linéaire en u . Dans le cas de la détonation et de l'équation scalaire (8.2.1), ce n'est pas le cas. En particulier, pour la détonation, la linéarité est perdue avec la température.

Remarque 8.2.1. Une approximation du même type que (8.2.5) intervient lors du traitement de la partie homogène de l'équation. En effet, dans la plupart des cas,

$$\left\langle f(u(x_j, t)) \right\rangle_{t^n}^{t^{n+1}} \neq f\left(\langle u(x_j, t) \rangle_{t^n}^{t^{n+1}}\right).$$

Il sera question de ce traitement des flux au dernier chapitre.

Schématiquement, le solveur $\mathcal{R} : \langle u \rangle \rightarrow \langle u \rangle^{n+1}$ résout

$$\frac{d\langle u(x, t) \rangle}{dt} = g(\langle u \rangle),$$

à la place de

$$\frac{d\langle u(x, t) \rangle}{dt} = \langle g(u) \rangle. \quad (8.2.6)$$

Au lieu de considérer la variation de la moyenne de u sur la cellule selon le comportement moyen de g , on suppose que la moyenne de u varie dans le temps ponctuellement en fonction de cette même moyenne.

Dans le cas de la détonation, cette subtile nuance peut avoir des conséquences graves. Le solveur $\tilde{\mathcal{F}}$ fournit une valeur moyenne des quantités physiques sur chaque cellule. Parce qu'on utilise un maillage grossier, la zone de réaction est très petite comparativement à la taille des cellules. Au lieu d'être augmentée sur une partie de la cellule proportionnelle à la taille de la zone de réaction, la température T^* est augmentée sur toute la cellule, grâce au processus de moyenne.

Retournons au contexte qui nous intéresse, soit celui de la capture en un point offerte par l'ACM, pour une discrétisation supérieure à la limite. Considérons la solution $\tilde{\mathcal{F}} \circ u_{j+1/2}^n = u_{j+1/2}^*$ obtenue après l'advection, juste avant la chimie finale (on laisse tomber les crochets pour alléger l'écriture). On calcule $u_{j+1/2}^*$ grâce à la contribution de $u_{j+1/2}^n$, une valeur moyenne (d'ordre deux dans le cas de PC) entre u_j^n et u_{j+1}^n . La valeur moyenne $T_{j+1/2}^*$ joue un rôle crucial dans l'approximation de la détonation. Pour un cas raide, si cette température est au-delà de la température d'ignition, une réaction chimique sera déclenchée et tout le gaz de la cellule $[x_j, x_{j+1}]$ brûlera (voir la figure 8.3). Sinon, aucune réaction chimique n'aura lieu et tout le gaz restera au repos. En d'autres mots : c'est tout ou rien.

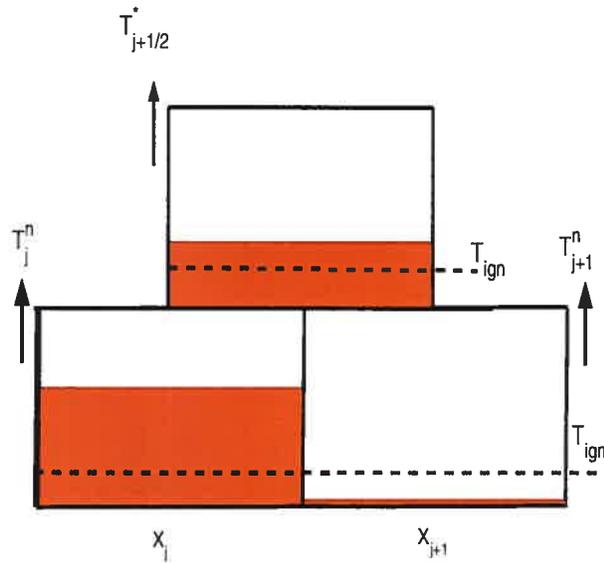


FIG. 8.3. Température moyenne supérieure à la température d'ignition.

8.3. MÉTHODE DE LA MODIFICATION DES MOYENNES

On voudrait éviter cette "étincelle artificielle" créée par la mauvaise définition des moyennes, de manière à ce que seulement une portion du gaz de la cellule brûle et non sa totalité.

En considérant la valeur moyenne de la source sur la cellule $[x_j, x_{j+1}]$ au lieu de la source évaluée avec la valeur moyenne, on pourrait éviter ce problème. Malheureusement, il est très difficile, voire impossible d'intégrer la relation (8.2.6).

Remarque 8.3.1. *À notre connaissance, aucune approche utilisant la moyenne $\langle g(u) \rangle$ n'a été développée. Il serait a priori possible de développer un schéma unsplit (méthode directe), avec raffinement du maillage autour du front calculant à chaque pas de temps une approximation de*

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_j}^{x_{j+1}} g(U(x, t)) dx dt,$$

où U est le vecteur des quantités $(\rho, \rho u, E, \rho Z)$. Il suffirait de définir un sous maillage dans $[x_j, x_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$ et d'y calculer la moyenne de g , avec une moyenne arithmétique par exemple.

Malgré le fait que nous devons renoncer à résoudre directement l'équation

$$\frac{d\langle U(x, t) \rangle}{dt} = \langle g(U) \rangle.$$

nous pouvons cependant trouver un compromis.

Le but est de limiter la portion de gaz à brûler à une quantité raisonnable. On voudrait une méthode qui, lorsque la discrétisation est telle que $(\Delta t/\tau) > (\Delta t/\tau)'$, ne brûle pas, à chaque pas de temps, tout le gaz contenu dans la cellule portant l'information sur la discontinuité .

Soit

$$\delta Z_{j+1/2} = Z_{j+1/2}^* - Z_{j+1/2}^{n+1} \geq 0, \quad (8.3.1)$$

avec $Z_{j+1/2}^* = \langle Z \rangle_{x_j}^{x_{j+1}}$ la moyenne obtenue avec le schéma de volumes finis centré, la proportion de gaz qui brûle après l'advection, dans la cellule centré en $x_{j+1/2}$. L'étape de la chimie consiste à intégrer l'équation

$$Z_t = -ZK(T) = g(Z), \quad (8.3.2)$$

en notant maintenant la source $g(Z)$, au lieu de $g(U)$, pour mettre l'emphase sur le rôle de Z . On a donc, par le théorème fondamental du calcul, que la proportion de gaz brûlé lors de la chimie est

$$\begin{aligned} \delta Z_{j+1/2} &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} Z(x_{j+1/2}, t) K(T(x_{j+1/2}, t)) dt \\ &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} Z_{j+1/2}^* K(T_{j+1/2}^*) dt \end{aligned}$$

et ainsi

$$\delta Z_{j+1/2} = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} g(Z_{j+1/2}^*) dt \quad (8.3.3)$$

$$= - \int_{t^n}^{t^{n+1}} g(\langle Z \rangle_{x_j}^{x_{j+1}}) dt. \quad (8.3.4)$$

Comme il a été mentionné plus haut, c'est la température prise comme une fonction de la moyenne et non comme une moyenne qui cause problème.

Le solveur $\tilde{\mathcal{F}}$ est composé d'une prédiction et d'une correction. La projection au temps t^{n+1} :

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} F_j' \quad (8.3.5)$$

est une approximation d'ordre 1 de type différences finies (F étant le vecteur des flux). Ce type de schéma est à proscrire pour les lois de conservations menant à des solutions contenant des discontinuités, car il n'est pas compatible avec les lois de Rankine et Hugoniot. Il est cependant approprié dans le contexte d'une prédiction, car la condition CFL empêche, à chaque pas de temps, toute discontinuité de traverser les frontières passant par x_j et par x_{j+1} .

Pour la suite, nous avons besoin d'approximations au temps t^{n+1} pour Z en x_j et x_{j+1} . Le schéma (8.3.5) permettant d'obtenir les prédictions Z_j^* et Z_{j+1}^* , il suffit d'intégrer (8.3.2) exactement pour avoir une approximation d'ordre 1 de Z_j^{n+1} et Z_{j+1}^{n+1} . Rappelons ici que le ratio de gaz non-brûlé Z est une variable non-conservative.

Cette dernière approximation permet dévaluer

$$\delta Z_j = \int_{t^n}^{t^{n+1}} Z(x_j, t) K(T(x_j, t)) dt$$

et $\delta Z_{j+1} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} Z(x_{j+1}, t) K(T(x_{j+1}, t)) dt,$

ainsi que la moyenne d'ordre 1

$$\overline{(\delta Z)}_{j+1/2} = \frac{\delta Z_j + \delta Z_{j+1}}{2}. \quad (8.3.6)$$

En développant la dernière relation sous sa forme intégrale, on obtient

$$\begin{aligned}
\overline{(\delta Z)}_{j+1/2} &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{Z(x_j, t)K(T(x_j, t)) + Z(x_{j+1}, t)K(T(x_{j+1}, t))}{2} dt \\
&\cong \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{Z(x, t)K(T(x, t))}{\Delta x} dt \quad (\text{quadrature du trapèze } \mathcal{O}(\Delta x^2)) \\
&= - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left\langle g(Z) \right\rangle_{x_j}^{x_{j+1}} dt. \tag{8.3.7}
\end{aligned}$$

Cette approximation de $\delta Z_{j+1/2}$ est dans l'esprit des commentaires précédents portant sur la moyenne du terme de source. En effet, elle permet de profiter de l'information provenant des côtés de la cellule et non seulement du centre.

Nous proposons alors la modification des moyennes suivante

$$(\delta Z)_{j+1/2} = \min(\delta Z_{j+1/2}, \overline{(\delta Z)}_{j+1/2}), \tag{8.3.8}$$

qui modifie la proportion de gaz à brûler par

$$Z_{j+1/2}^{n+1} = Z_{j+1/2}^* - (\delta Z)_{j+1/2}.$$

La figure 8.4 illustre l'action de la modification des moyennes sur la quantité de gaz brûlant lors de la réaction chimique. Si $\delta Z_{j+1/2}$ est supérieure à la valeur moyenne entre δZ_j et δZ_{j+1} , on la remplace par cette moyenne.

Théorème 8.3.2. *Le schéma PC avec pas fractionnaires*

$$\begin{aligned}
(U_j^{n+\alpha})^* &= U_j^n - \lambda \alpha f_j' \\
(\rho Z)_j^{n+\alpha} &= ((\rho Z)_j^{n+\alpha})^* \exp\left(-\alpha \Delta t K((U_j^{n+\alpha})^*)\right) \\
(U_{j+1/2}^{n+1})^* &= \frac{1}{2}(U_j^n + U_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(U_j' - U_{j+1}') \\
&\quad + \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(f(U_j^n) - f(U_{j+1}^n)) + (f(U_j^{n+\alpha}) - f(U_{j+1}^{n+\alpha})) \right] \\
(\rho Z)_{j+1/2}^{n+1} &= ((\rho Z)_{j+1/2}^{n+1})^* \exp\left(-\Delta t K((U_{j+1/2}^{n+1})^*)\right),
\end{aligned}$$

avec $(\rho, \rho u, E)_j^{n+\alpha} = ((\rho, \rho u, E)_j^{n+\alpha})^*$ et $(\rho, \rho u, E)_{j+1/2}^{n+1} = ((\rho, \rho u, E)_{j+1/2}^{n+1})^*$ et $\alpha \in]0, 1[$, utilisé avec la correction des moyennes (8.3.8), pour le problème des

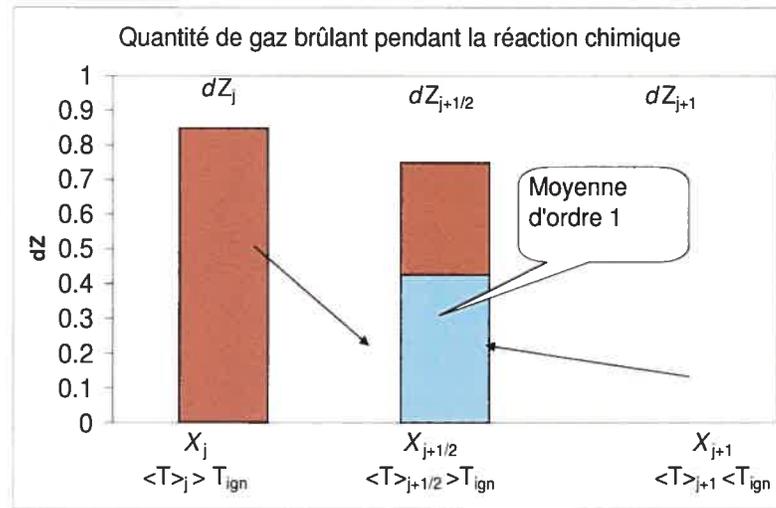


FIG. 8.4. Les quantités de gaz brûlant lors de la réaction chimique (après le pas d'advection) sont illustrées en mauve. La correction apportée par la modification des moyennes est en bleu.

équations d'Euler réactives avec conditions initiales

$$U(x, t = 0) = (\rho, p, u, Z)(x, t = 0) = \begin{cases} (\rho_1, p_1, u_1, 0), & x \leq x_d; \\ (\rho_0, p_0, u_0, 1), & x > x_d, \end{cases} \quad (8.3.9)$$

est compatible d'ordre Δx dans les zones où Z est discontinu et compatible d'ordre Δx^2 dans les zones où Z est continu.

DÉMONSTRATION. Dans un premier lieu, montrons que le schéma est d'ordre 2 dans les zones continues. Pour cela, il faut déterminer où sont les zones lisses.

Lorsque la source $-\rho ZK(T) = 0$, le ratio de gaz non-brûlé est constant et donc continu. Lorsque Z est constant, on a forcément par (8.3.1) que $\delta Z_{j+1/2} = \overline{(\delta Z)}_{j+1/2} = 0$ et on retombe donc au schéma PC sans modification de moyenne, qui on le sait est d'ordre deux [61].

Concentrons nous sur les cas où la source est non-nulle, c'est-à-dire dans la zone de réaction. La seule possibilité d'obtenir une zone où Z est continu lorsque $-\rho Z K(T) \neq 0$ est sur un maillage résolu. Dans ce cas, on capte la déflagration suivant le choc. Montrons que, dans la zone de déflagration, on a $(\delta Z)_{j+1/2} = \delta Z_{j+1/2}$, ce qui revient à ne faire aucune modification des moyennes et ainsi obtenir un schéma d'ordre Δx^2 .

On peut exprimer les différences telles que

$$\delta Z_{j+1/2} = Z_{j+1/2}^* - Z_{j+1/2}^{n+1} = Z_{j+1/2}^*(1 - \exp(-\Delta t/\tau)) \quad (8.3.10)$$

et de la même façon,

$$\overline{(\delta Z)}_{j+1/2} = \frac{Z_j^* + Z_{j+1}^*}{2}(1 - \exp(-\Delta t/\tau)). \quad (8.3.11)$$

Pour avoir $(\delta Z)_{j+1/2} = \min(\delta Z_{j+1/2}, \overline{(\delta Z)}_{j+1/2}) = \delta Z_{j+1/2}$, le schéma PC doit respecter

$$Z_{j+1/2}^* \leq \frac{Z_j^* + Z_{j+1}^*}{2},$$

où $Z^* \equiv (Z^{n+1})^*$ (solution après l'advection et avant la chimie). En se concentrant sur les termes d'ordre un et en considérant un maillage résolu, la partie correcteur du schéma PC, pour la dernière équation du système d'Euler réactif, devient

$$\begin{aligned} (\rho Z)_{j+1/2}^* &= \frac{(\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta t}{2\alpha\Delta x} \left((\rho Z u)_j ((2\alpha - 1) + e^{-\alpha\Delta t K(U_j^n)}) \right. \\ &\quad \left. - (\rho Z u)_{j+1} ((2\alpha - 1) + e^{-\alpha\Delta t K(U_{j+1}^n)}) \right) \\ &\approx \frac{(\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta t}{2\alpha\Delta x} (2\alpha - 1 + e^{-\alpha\Delta t K(U_j^n)}) \left((\rho Z u)_j - (\rho Z u)_{j+1} \right) \\ &\leq \frac{(\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta t}{2\alpha\Delta x} (2\alpha - 1 + 1) \left((\rho Z u)_{j+1} - (\rho Z u)_j \right) \\ &= \frac{(\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho Z u)_j - (\rho Z u)_{j+1} \right) \end{aligned}$$

et du côté de la prédiction,

$$\frac{(\rho Z)_j^* + (\rho Z)_{j+1}^*}{2} = \frac{(\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n}{2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((\rho Z u)'_j + (\rho Z u)'_{j+1} \right). \quad (8.3.12)$$

En utilisant le limiteur $\minmod(a, b) = 0.5(\text{signe}(a) + \text{signe}(b)) \min(|a|, |b|)$ et la notation $D_+(f)_j = f_{j+1} - f_j$, le dernier terme de la prédiction devient

$$\frac{1}{2} \minmod(D_+(\rho Zu)_{j+1}, D_+(\rho Zu)_j) + \frac{1}{2} \minmod(D_+(\rho Zu)_j, D_+(\rho Zu)_{j-1}). \quad (8.3.13)$$

Dans la déflagration, le flux de la quantité de matière Z est monotone croissant. On déduit alors de (8.3.13)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left((\rho Zu)'_j + (\rho Zu)'_{j+1} \right) &= \frac{1}{2} \min(D_+(\rho Zu)_{j+1}, D_+(\rho Zu)_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} \min(D_+(\rho Zu)_j, D_+(\rho Zu)_{j-1}) \\ &\leq \frac{1}{2} D_+(\rho Zu)_j + \frac{1}{2} D_+(\rho Zu)_j \\ &= (\rho Zu)_{j+1} - (\rho Zu)_j. \end{aligned} \quad (8.3.14)$$

Étant donné que les limiteurs TVD sont tous basés sur les différences finies, le résultat (8.3.14) reste vrai pour tout autre limiteur. La relation (8.3.12) implique alors

$$\frac{(\rho Z)_j^* + (\rho Z)_{j+1}^*}{2} \geq \frac{(\rho Z)_j^n + (\rho Z)_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta t}{\Delta x} ((\rho Zu)_j - (\rho Zu)_{j+1}).$$

Ce qui permet de dire

$$(\rho Z)_{j+1/2}^* \leq \frac{(\rho Z)_j^* + (\rho Z)_{j+1}^*}{2},$$

et de conclure, par monotonie, que

$$Z_{j+1/2}^* \leq \frac{Z_j^* + Z_{j+1}^*}{2}.$$

Ainsi le schéma PC avec modification des moyennes est précis d'ordre deux dans les zones de déflagration, car on a bien que $(\delta Z)_{j+1/2} = \min(\delta Z_{j+1/2}, \overline{(\delta Z)_{j+1/2}}) = \delta Z_{j+1/2}$.

Il reste maintenant à considérer les zones où Z est discontinu, c'est-à-dire partout où la source est non-nulle en régime sous-résolu et lors de la capture du choc en résolu sont des discontinuités. Nous savons qu'un schéma de volumes finis performe au mieux à l'ordre 1 dans les zones de discontinuités. La différence $\overline{(\delta Z)_{j+1/2}}$

étant une approximation d'ordre un de $\delta Z_{j+1/2}$, la modification des moyennes ne change donc pas l'ordre dans les zones où Z est discontinu. \square

Tout comme l'ACM, la méthode de la modification des moyennes (MdM) est compatible avec notre objectif de modularité. Bien sûr, MdM est construite pour le cas particulier de la détonation, mais elle a l'avantage de ne pas être imbriquée dans dans le schéma, mais plutôt d'agir comme "plug-in" (greffon) à la fin de l'intégration. Le schéma 8.5 illustre où la modification des moyennes entre en jeu.

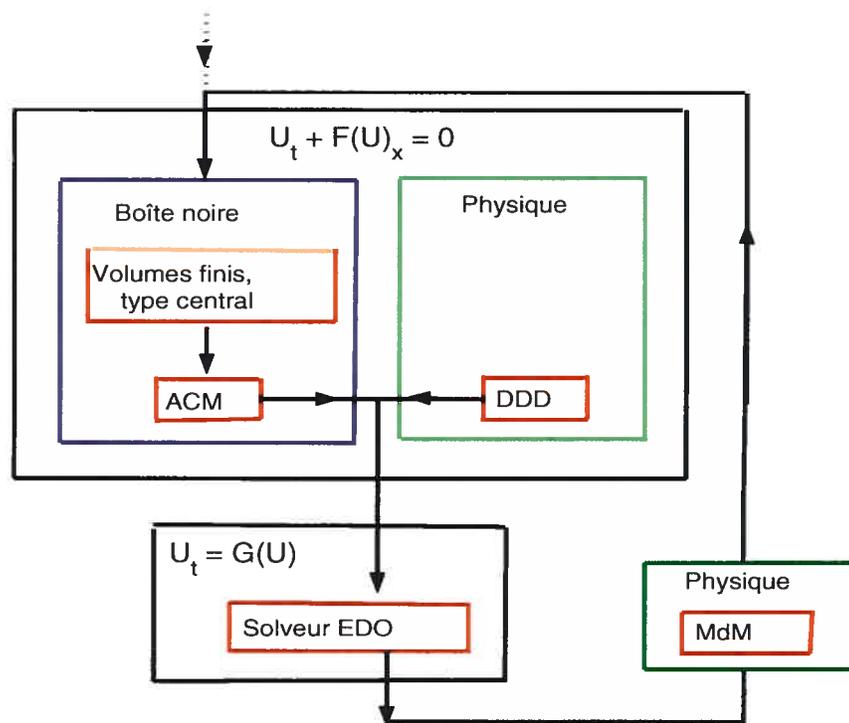


FIG. 8.5. Encapsulation de l'approche volumes finis de type central avec ACM, DDD et MdM

8.4. RÉSULTATS EN 1D

Dans cette section, on reprend certains des cas unidimensionnels étudiés au chapitre précédent, de façon à comparer les résultats avec et sans la modification des moyennes (MdM).

Exemple 8.4.1. Soit l'exemple 7.3.1 avec chimie d'Arrhenius

$$(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1),$$

$$K_0 = 165.6762, E^+ = 50, q_0 = 50, \gamma = 1.2, f = 1.74, L_{1/2} = 1$$

À la figure 8.6, on voit les profils obtenus pour une simulation sous-résolue, avec compression artificielle et modification des moyennes, caractérisée par $\Delta x = 1 \times 10^{10} = 1 \times 10^{10} L_{1/2}$ et $CFL = 0.4$. Cette discrétisation est largement suffisante pour n'importe quelle application.

La vitesse moyenne calculée pour 4000 pas de temps est de $S_{\frac{z}{2}}^n = 8.98276$, ce qui donne une erreur relative de 0.0050125% sur la vitesse $s = 8.9823$ obtenue par la théorie de Chapman-Jouguet. Rappelons que pour la même expérience, mais avec ACM et DDD seulement, l'erreur relative sur la vitesse de propagation était de 0.07904%. Le maillage $\Delta x = 2100$ était la discrétisation limite permise par l'approche ACM, pour les mêmes conditions initiales. L'ajustement des moyennes, en plus de permettre à la compression artificielle de converger vers la solution entropique sur des maillages plus grossier, conserve la bonne vitesse de propagation moyenne.

À la figure 8.7, on observe la solution obtenue avec PC et MdM, sans ACM, pour la discrétisation de référence de l'exemple 7.3.1, soit $\Delta x = 2100$. Pour une température d'ignition très basse, ici encore à $1.01T_0$, la modification des moyennes est optimale lorsqu'elle est jumelée à la compression artificielle. Le pas d'espace limite de $\Delta x = 1 \times 10^{10}$ constitue une amélioration de la performance de la méthode d'un facteur de $10^{10}/2100 \approx 4.76 \times 10^6$, i.e. avec MdM et l'ACM on peut capter un détonation raide avec un maillage de l'ordre de 10^6 fois plus grossier qu'avec ACM seulement. De plus, MdM utilisée seule est moins robuste que l'ACM seule. Cette dernière constatation est cohérente avec la conclusion tirée au début de ce chapitre, soit qu'on doit éliminer la diffusion avant d'avoir un problème de type point fixe.

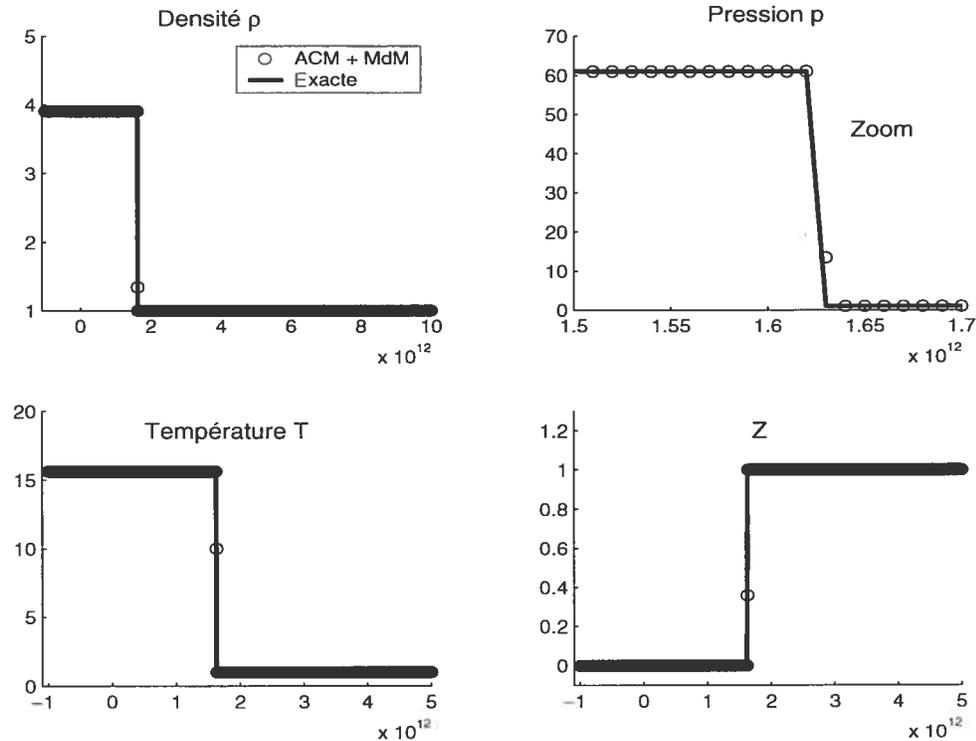


FIG. 8.6. Exemple 8.4.1, avec PC, ACM et MdM, $\Delta x = 1 \times 10^{10} = 1 \times 10^{10} L_{1/2}$, CFL=0.4, $t = 1.815600 \times 10^{11}$ (500 pas de temps).

Exemple 8.4.2. *On reprend l'exemple 7.3.2 avec une chimie d'ignition du chapitre précédent.*

$$(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1), q_0 = 50, \gamma = 1.2, f = 1.6.$$

En reprenant la même expérience qu'au chapitre précédent (i.e. trouver τ_{\min} tel que pour Δx fixé à 0.25, le schéma fournisse la solution physique), on trouve que le duo ACM et MdM est robuste sous toute discrétisation. La valeur minimale possible pour l'échelle de temps est de la précision de la machine. La capacité des autres combinaisons sont synthétisées dans le tableau 8.1. Les domaines de convergence de la table 8.1 sont schématisés à la figure 8.8.

Exemple 8.4.3. *On refait l'expérience 7.3.3 de la collision entre une détonation et une raréfaction [6]. Les conditions sont les mêmes qu'à l'exemple précédent,*

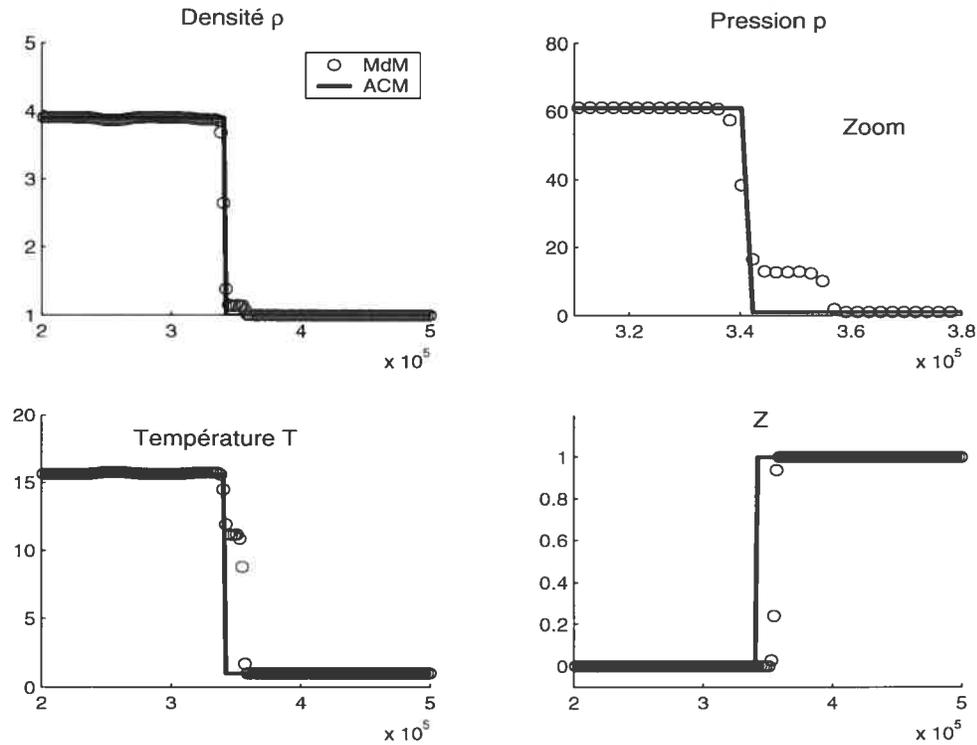


FIG. 8.7. Exemple 8.4.1, avec PC et MdM, $\Delta x = 2100 = 2100L_{1/2}$, CFL= 0.4, $t = 38024.1615$ (500 pas de temps).

T_{ign}	τ_{min}	$\Delta t_{moyen}/\tau_{min}$	$\Delta x/L_{1/2}$	MdM	ACM
1.01	Précision de la machine	$\mathcal{O}(1/\tau_{min})$	$\mathcal{O}(1/\tau_{min})$	Oui	Oui
	0.01446	0.6589	19.8208	Non	Oui
	1.1102	0.0079715	0.25808	Oui	Non
	5.5472	0.0016678	0.051651	Non	Non

TAB. 8.1. Performance des méthodes PC, avec combinaisons de ACM et MdM, pour $T_{ign} = 1.01$.

mais avec

$$(\rho, p, u, Z)_0 = \begin{cases} (2.0, 40.0, 4.0, 0), & x \leq 0; \\ (3.64282, 54.8244, 6.2489, 0), & 10 < x \leq 20; \\ (1, 1, 0, 1), & 20 < x. \end{cases}$$

Nous avons choisi une échelle de temps extrêmement petite $\tau = 1 \times 10^{-20}$, pour mettre en évidence la robustesse de l'ACM avec modification des moyennes, même lors

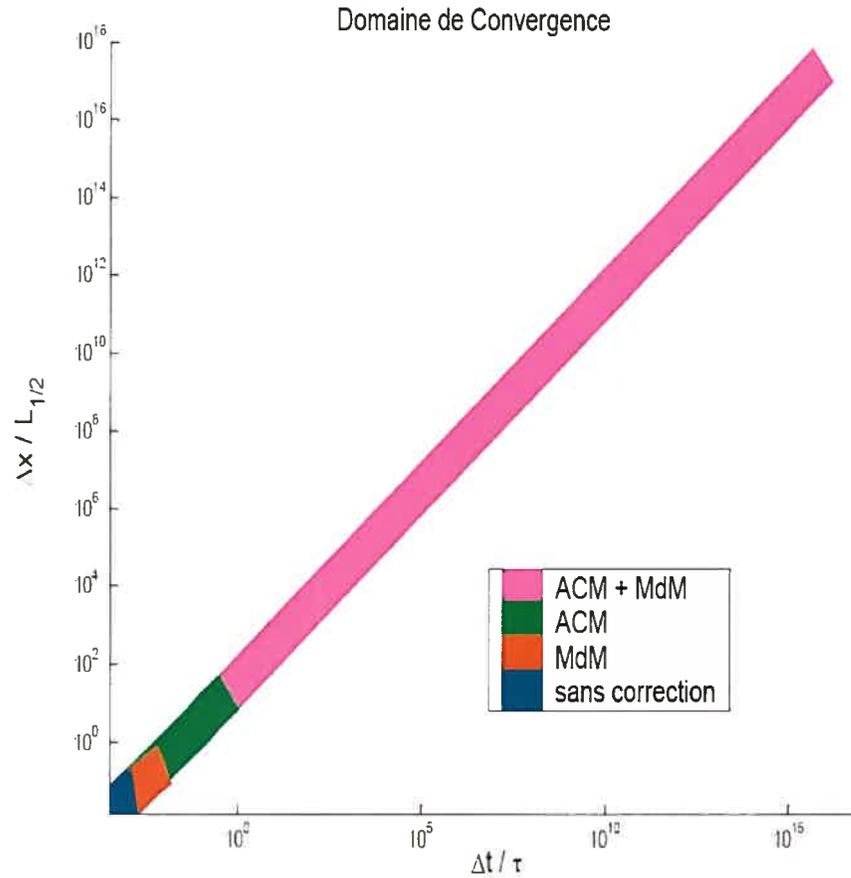


FIG. 8.8. Domaines de convergence pour le cas 8.4.2 avec CFL de 0.4.

d'interactions avec d'autres ondes purement non-réactives. L'ajout de MdM ne perturbe pas la solution, car la méthode ne modifie pas les moyennes dans les zones où Z est constant.

8.5. RÉSULTATS EN 2D

L'extension de MdM en 2 dimensions est directe. La moyenne d'ordre 1 est calculée sur les 4 cellules voisines :

$$\overline{(\delta Z)}_{i+1/2,j+1/2} = \frac{\delta Z_{i,j} + \delta Z_{i,j+1} + \delta Z_{i+1,j} + \delta Z_{i+1,j+1}}{4}, \quad (8.5.1)$$

résultant à la modification des moyennes développée plus haut

$$(\delta Z)_{i+1/2,j+1/2} = \min(\delta Z_{j+1/2,i+1/2}, \overline{(\delta Z)}_{i+1/2,j+1/2}), \quad (8.5.2)$$

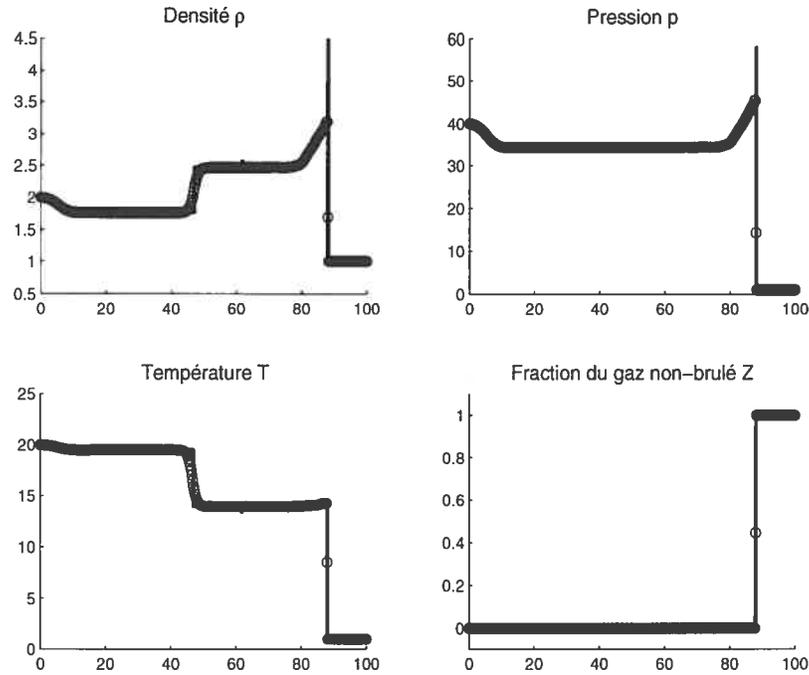


FIG. 8.9. Exemple 8.4.1, avec PC et MdM, $\Delta x = 0.25 = 3.4902e + 020L_{1/2}$, CFL= 0.4, $t = 8$ (826 pas de temps).

qui modifie la proportion de gaz à brûler par

$$Z_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} = Z_{i+1/2,j+1/2}^* - (\delta Z)_{i+1/2,j+1/2}.$$

Comme nous l'avons vu à la section précédente, MdM est optimale lorsqu'elle est combinée à la compression artificielle. L'exemple suivant, 5.2.2 étudié au chapitre 5, montre l'amélioration que MdM apporte à la capture de la détonation en régime sous-résolu, sans ACM.

Exemple 8.5.1. On considère un tunnel de dimensions $[0, 300] \times [0, 50]$. Les conditions imposées aux murs supérieur et inférieur sont de type murs solides (solid walls).

Les conditions initiales sont définies par

$$(\rho, p, u, v, Z)_0 = \begin{cases} (1.0, 1.0, 0.0, 0.0, 1.0), & x \geq \xi; \\ (3.64282, 54.8244, 6.2489, 0.0, 0.0), & x < \xi \end{cases} \quad (8.5.3)$$

où

$$\xi(y) = \begin{cases} 10, & |y - 25| \geq 15; \\ 25 - |y - 25|, & |y - 25| < 15. \end{cases} \quad (8.5.4)$$

La chimie est discontinue :

$$K(T) = \begin{cases} 1/\tau, & T \geq T_{ign}; \\ 0, & T < T_{ign}, \end{cases} \quad (8.5.5)$$

où $T_{ign} = 3.0$, $\tau = 1$, $q_0 = 50$ $f = 1.6$ et $\gamma = 1.2$.

La discrétisation spatiale est fixée à $\Delta x = \Delta y = 1$.

Le tableau 8.2 contient les échelles de temps limite, c'est-à-dire τ minimums pour lesquels le schéma converge vers la solution physique. L'emploi de la modification

τ_{\min}	$\Delta t_{moyen}/\tau_{\min}$	$\Delta x/L_{1/2}$	MdM
0.0526	0.5434	21.7756	Oui
0.1429	0.2002	8.0225	Non

TAB. 8.2. Performance des méthodes PC2, avec MdM, pour le tube 2D 8.5.1.

des moyennes pour le schéma PC2 permet une discrétisation jusqu'à 2.7 fois plus grossière. Rappelons que cette modification est peu coûteuse en temps de calcul, et ce même en plusieurs dimensions. En effet, en 1 et 2 dimensions spatiales, elle représente une augmentation moyenne du temps de calcul de 18% et 40%, respectivement.

Chapitre 9

CARACTÈRE INSTABLE DES DÉTONATIONS FORTES

La théorie ZND, considérée jusqu'à présent dans ce travail, ne donne aucune information sur la nature instable des détonations. Pourtant, il a été démontré expérimentalement (voir par exemple [46]) que les détonations sont, dans la plupart des cas, instables. Une petite perturbation de la structure de l'onde peut la déformer de façon irréversible. L'instabilité est caractérisée par l'oscillation des quantités physiques au front, dans toutes les directions. Bien qu'impossible à capter avec un schéma en régime sous-résolu, la nature instable de la détonation ne peut être négligée. Les maxima au front de l'onde peuvent atteindre jusqu'au double de la valeur prédite par la théorie de Chapman-Jouguet. Ces faits motivent la présence d'un volet traitant des instabilités, même si ce travail est centré sur les simulations à grandes échelles. Ce chapitre met en place quelques éléments théoriques sur les instabilités et teste la capacité de l'approche PC à bien capter les ondes de combustion dans les régimes stable, instable et transitoire.

9.1. EXISTENCE DES INSTABILITÉS EN UNE DIMENSION

Pour toutes les détonations ayant subi une légère perturbation initiale, les quantités physiques oscillent après le choc. Une détonation stable se différencie d'une instable par le fait que les oscillations diminuent dans le temps. En pratique, on détermine la nature de la détonation en étudiant l'historique du maximum de la pression au front de l'onde. Pour une détonation stable, le maximum converge

vers la pression de von Neumann, tandis que pour une onde instable, les maxima évoluent de façon non décroissante et parfois même chaotique.

Les premiers résultats théoriques prouvant la présence d'instabilités dans la solution des équations d'Euler réactives, sont dûs à Erpenbeck (voir [32] pour un résumé de son travail). Plusieurs méthodes numériques ont été développées pour obtenir des résultats concrets de l'analyse unidimensionnelle d'Erpenbeck (voir l'article d'Abouseif et Toong [2] pour un résumé et la publication de Lee et Stewart [47] pour une nouvelle approche basée sur une étude simplifiée). Nous suggérons l'article de Roytburd [71] pour une vue d'ensemble des efforts déployés pour l'étude, numérique et théorique, des instabilités en une et deux dimensions. Il a été démontré en premier par Fickett et Wood [34] que la résolution numérique des équations non-linéaires d'Euler réactives produit des oscillations dont la période est très similaire aux prédictions de l'analyse linéaire d'Erpenbeck. La comparaison des résultats numériques et théoriques bi-dimensionnels a été effectuée par Bourlioux et al. ([12, 14]). Étant donné la quantité et la qualité du matériel concernant cette théorie, nous nous contenterons d'en résumer les grandes lignes.

L'introduction d'une légère perturbation dans la solution du système des équations d'Euler réactives, linéarisées autour du front, permet de mettre en évidence la nature oscillatoire, croissante ou non dans le temps, des solutions. L'étude est fondée sur les fonctions propres associées aux problèmes sous-jacents de valeurs propres. On utilise souvent le degré de poussée f comme paramètre de bifurcation. Autour d'un degré de poussée critique f_0^* , la détonation change de nature, en passant par un régime purement oscillatoire en $f = f_0^*$.

Considérons le cas classique 7.3.1, étudié aux chapitres 7 et 8,

$$(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1), q_0 = 50, E^+ = 50, \gamma = 1.2. \quad (9.1.1)$$

Le degré de poussée critique est de $f_0^* = 1.73$ et l'onde est stable pour $f > 1.73$ (les oscillations décroissent dans le temps) et instable (sinon) pour $f < 1.73$.

Remarque 9.1.1. *À partir de maintenant, nous n'étudierons que des cas avec chimies continues avec les données physiques (9.1.1).*

9.2. ANALYSE NUMÉRIQUE DES INSTABILITÉS

Comme il a été mentionné plus haut, une résolution adéquate des équations d'Euler réactives non-linéarisées permet d'observer la nature instable des détonations. Il est cependant important de clarifier ce que résolution adéquate sous-entend.

9.2.1. Discrétisation

La variable la plus déterminante pour une bonne capture des instabilités est la discrétisation spatiale Δx (donc aussi temporelle par la condition CFL). On doit s'assurer, dans un premier temps, que la résolution permet de capter la solution entropique. Dépendant du cas test étudié, il doit y avoir au moins 2 ou 3 points dans la zone de demi-réaction.

Le fait que les maxima peuvent dépasser de moitié la valeur prédite par la théorie Chapman-Jouguet a un impact sur la longueur de la zone de demi-réaction $L_{1/2}$. Soit l'état du gaz non-brûlé fixé, plus la pression du gaz brûlé augmente, plus $L_{1/2}$ diminue. Ainsi, la discrétisation doit être généralement plus fine pour une détonation instable que pour une qui est stable. Il a été observé par Bourlioux [12] qu'une discrétisation trop grossière peut conduire à une solution physiquement erronée. Lorsque la zone de demi-réaction ne contient pas assez de mailles, les résultats peuvent exhiber le mauvais comportement quant à la stabilité de l'onde. Pour obtenir qualitativement le bon comportement, 20 points/ $L_{1/2}$ est souvent suffisant.

De plus, il a été démontré, par Sharpe et Falle [74], que pour bien capter quantitativement le comportement de l'onde de combustion au front, il fallait plus de 50 points dans la zone de demi-réaction pour un cas stable et plus de 100 points/ $L_{1/2}$ pour une détonation instable.

Le choix de la discrétisation adéquate est donc une tâche délicate. La conclusion la plus largement acceptée est qu'une discrétisation de 20 points/ $L_{1/2}$ constitue un minimum pour obtenir des résultats satisfaisant. Étant donné que nous sommes intéressés plus par l'aspect qualitatif du comportement que quantitatif, nous nous limiterons donc à une discrétisation de 20 à 30 points par $L_{1/2}$.

De façon à illustrer l'impact du choix de la discrétisation et à tester PC, nous avons choisi un cas test très difficile, soit une détonation avec un degré de poussée $f = 1.725$, très près de la valeur de transition f_0^* . À la figure 9.1, on voit l'historique du maximum de la pression pour une discrétisation de $\Delta x = 1/20 = 0.05L_{1/2}$. On observe une diminution de l'amplitude des oscillations, malgré le fait qu'à $f = 1.725$, la détonation soit instable. Ce résultat est donc causé par un mauvais traitement numérique, précisément une discrétisation trop grossière. À la figure 9.2, sont superposées les solutions pour $\Delta x = 1/25 = 0.04L_{1/2}$ en bleu et pour $\Delta x = 1/40 = 0.025L_{1/2}$ en noir. Le comportement observé dans les deux cas est le bon, soit une lente augmentation de l'amplitude des oscillations. La solution obtenue avec le maillage le plus fin n'atteint pas les mêmes amplitudes que la solution avec la discrétisation plus grossière, mais le comportement est cependant qualitativement le même. Cette expérience justifie notre choix de $\Delta x = 1/25$ dans la zone de transition.

9.2.2. Conditions aux bords

Le traitement des conditions aux bords pour la simulation des détonations en une dimension, avec un maillage grossier, n'est généralement pas un problème. On impose habituellement des conditions de type entrantes (*inflow*) du côté du gaz brûlé et sortantes (*outflow*) pour le gaz non-brûlé (voir [53] pour le traitement uni-dimensionnel des conditions aux bords dans un contexte de maillage décalé).

Lors d'une simulation résolue, les fluctuations des quantités physiques au front de l'onde laissent des traces dans le gaz brûlé, qui se propagent dans le temps. Ces

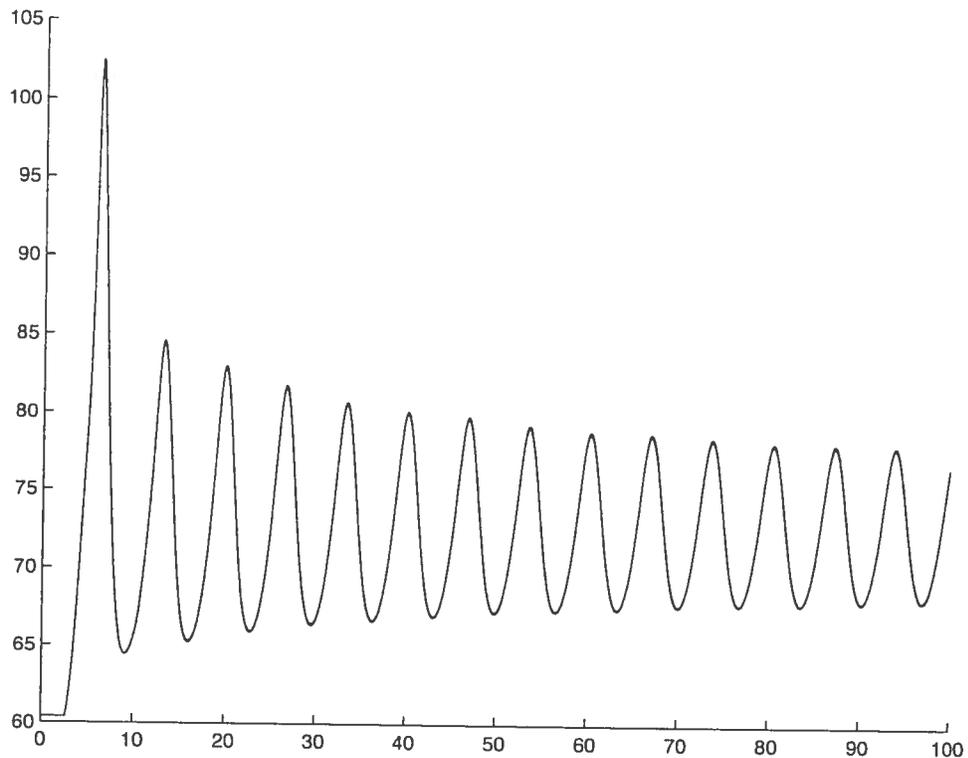


FIG. 9.1. Historique de la pression maximale pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.725$ et $\Delta x = 0.05L_{1/2}$.

traces sont visibles, pour la pression par exemple, à la figure 9.3. Pour minimiser les effets aux bords il est suggéré, voir [74], de laisser une "grande" distance derrière le front.

Remarque 9.2.1. *Les traces des oscillations au front existent indépendamment du fait que la détonation soit stable ou non.*

Étant donné que les historiques des fluctuations sont étudiés au cours de longs lapses de temps, il n'est pas toujours possible de laisser une grande distance derrière le front. Pour sauver du temps de calcul, il est préférable de faire un suivi du front. Le domaine de calcul est recentré ponctuellement autour du choc, laissant un nombre de points fixe derrière le front. Comme suggéré par Hwang et al. [43], le nombre de points derrière le front devrait être assez grand pour empêcher la caractéristique $u + c$, émanant du bord, de venir intersecter la caractéristique s , ayant la discontinuité en Z comme origine. Au premier recentrage, à l'endroit

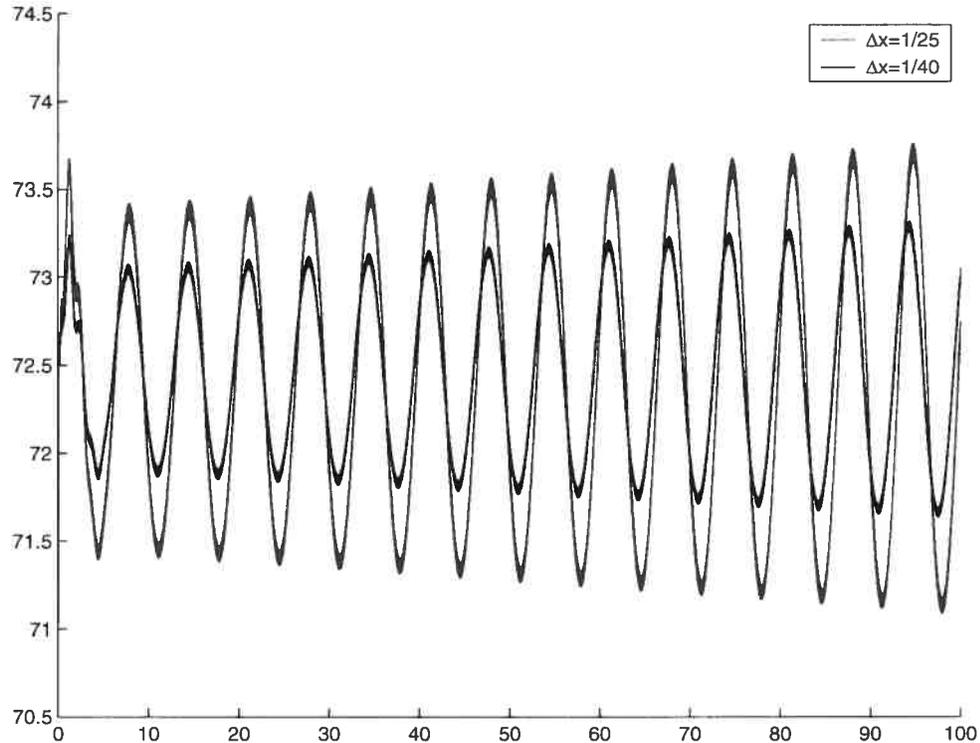


FIG. 9.2. Historique de la pression maximale pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.725$ et $\Delta x = 0.04L_{1/2}$ et $\Delta x = 0.025L_{1/2}$.

où se fait la coupure du domaine, il y a forcément une perte d'information et la solution est donc corrompue. Il faut donc éviter que cette information erronée ne parvienne au front. D'après les résultats de Hwang et al. et nos propres expérimentations, nous jugeons que de laisser 2000 points derrière le front est raisonnable.

9.2.3. Conditions initiales

Les conditions initiales sont composées de la solution ZND. L'erreur causée par la discrétisation constitue la perturbation initiale déstabilisant la détonation. La solution ZND est calculée en suivant le mécanisme présenté au chapitre 1.

Les conditions initiales plateaux ou de type tube à choc peuvent aussi être considérées. La solution plateau constituant une énorme perturbation initiale, les résultats ne s'en trouvent néanmoins pas affectés considérablement. Avec des conditions plateaux, en dehors d'un voisinage $v : |f - f_0^*| < v$, la solution retrouve son

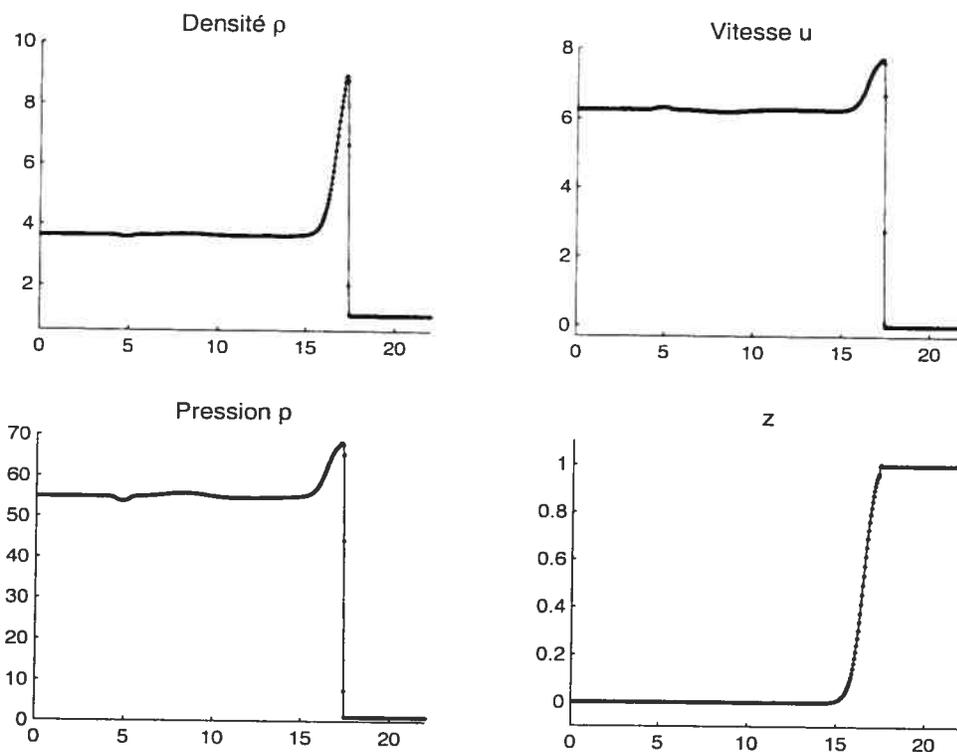


FIG. 9.3. Profil des quantités physiques pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.6$, $\Delta x = 0.05L_{1/2}$, $t = 5$. Les traces des instabilités sont reconnaissables par les légères fluctuations du gaz brûlé.

comportement théorique. En d'autres mots, le comportement est très robuste à l'égard des conditions initiales, i.e. les conditions initiales ont peu d'impact sur le comportement de la solution. Cependant, à l'intérieur du voisinage de f_0^* , il en est autrement : par exemple, pour $f = 1.725$, le comportement de la solution est influencé par le choix des conditions initiales. À la figure 9.4, on voit l'évolution du maximum de la pression, pour la même expérience de détonation instable, avec des conditions initiales en plateaux. Encore une fois, le comportement observé ne correspond pas à la prédiction théorique.

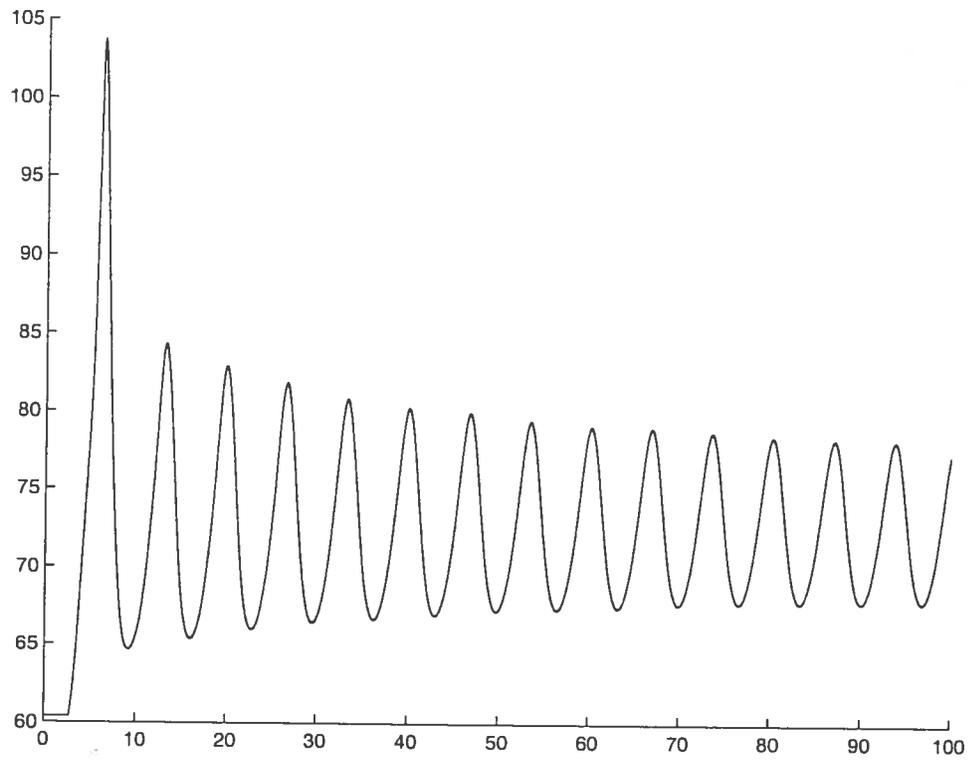


FIG. 9.4. Historique de la pression maximale pour le cas 9.1.1, avec $f = 1.725$ et $\Delta x = 0.04L_{1/2}$ et des conditions initiales discontinues.

Chapitre 10

MÉTHODE MULTIÉCHELLE

L'Univers est composé de structures caractérisées par des échelles de grandeur extrêmement variées : de 10^{-14} mètres pour une fenêtre contenant un noyau atomique jusqu'à 10^{25} mètres pour une fenêtre contenant plusieurs millions de galaxies semblables à la Voie lactée [73]. Chacune des structures influence, directement ou non, le fonctionnement global de l'Univers et ce malgré la dimension de la fenêtre associée à chacune des structures. En général, plus la différence entre la dimension des fenêtres impliquées est grande, plus un phénomène est difficile à modéliser.

La stratégie la plus commune pour modéliser de tels phénomènes est le découplage. On divise en sous-problèmes, guidé par des considérations physiques et mathématiques. Dans le cas de la détonation, par exemple, les équations d'Euler réactives modélisent le comportement macroscopique de l'écoulement du gaz réactif (les effets des échanges de chaleur et de la viscosité sont négligés). Pourtant, au moins deux échelles sont présentes dans ce simple modèle : une échelle que nous appellerons macroscopique pour l'écoulement du fluide et l'autre microscopique pour la réaction chimique.

Bien souvent, c'est l'outil d'observation ou de calcul, dans notre cas l'ordinateur, qui fixe les limites entre les échelles. Contrairement aux croyances populaires, l'étendue des échelles que l'ordinateur peut traiter simultanément reste limitée. Supposons un domaine de calcul linéaire (en une dimension, $d = 1$), carré ($d = 2$)

ou cubique ($d = 3$), où la longueur caractéristique maximale est L_{max} . Si M est le nombre de variables à calculer sur chaque maille et que L_{min} est la longueur caractéristique minimale présente dans le modèle, alors la taille de la mémoire vive (*RAM : Random Access Memory*) nécessaire pour effectuer le calcul [65] est de

$$RAM = M \left(\frac{L_{max}}{L_{min}} \right)^d. \quad (10.0.1)$$

Ainsi, pour un cas adimensionnalisé typique de détonation raide, la mémoire vive pour une simulation en une dimension est de l'ordre d'un mégaoctet. Un ordinateur de table standard construit en 2005 possède environ 512 mégaoctets de mémoire vive, tandis qu'un super-ordinateur peut aller au maximum jusqu'à un petaoctet (10^{15} octets). La figure 10.1 illustre l'étendue maximale des échelles pouvant être traitées par les calculateurs présentement sur le marché.

La majeure partie de cette thèse est consacrée à l'élaboration de méthodes

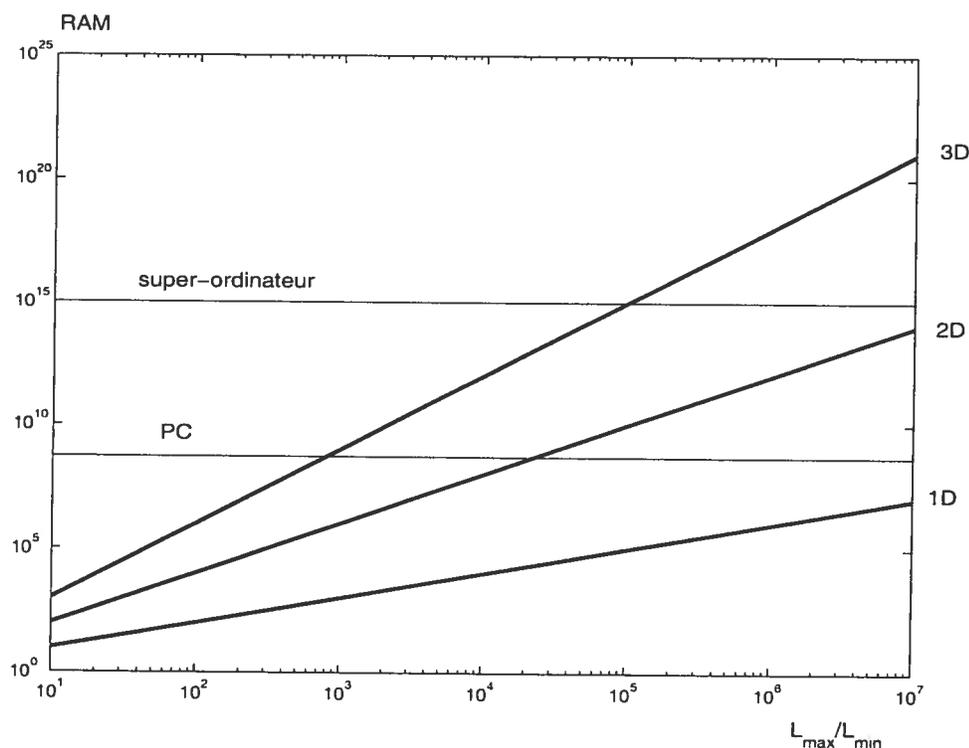


FIG. 10.1. Estimé de la mémoire vive nécessaire (bytes) pour traiter un problème contenant des longueurs allant de L_{min} à L_{max} , avec $M = 1$ minimal.

pouvant capter le comportement d'une détonation en considérant l'échelle macroscopique seulement. L'utilisation d'une approche macroscopique ne peut se faire sans compromis : perte d'information dans la zone de réaction et surtout, incapacité de déterminer la nature stable ou instable de l'onde.

Si en plus de connaître à peu de frais les caractéristiques de la propagation d'une détonation, on s'intéresse aux détails de la réaction chimique, alors l'estimation (10.0.1) justifie la nécessité d'élaborer des méthodes multiéchelles, surtout pour les cas multi-dimensionnels.

10.1. MOTIVATIONS DE L'ÉLABORATION D'UNE NOUVELLE MÉTHODE MULTIÉCHELLE

Il a été démontré que la plupart des ondes de détonation sont instables. De légères perturbations peuvent s'amplifier avec le temps, causant l'oscillation des variables thermodynamiques au front de l'onde. Les variables peuvent atteindre le double de la valeur prédite au front par la théorie classique ZND. Par contre, en moyenne le profil et la vitesse de propagation de l'onde de combustion restent similaires à ceux prédits par la théorie. Cependant, pour certaines applications, comme par exemple la sécurité d'installations nucléaires, il est crucial de connaître les valeurs maximales atteintes par les variables physiques telles la pression. Effectivement, pour déterminer l'épaisseur des murs, par exemple, les ingénieurs doivent connaître la pression maximale qu'une détonation peut exercer sur ces murs ainsi que le parcours à long terme de celle-ci.

Lors de simulations sous-résolues, le caractère instable est peu ou pas du tout capté. Dans ce chapitre, nous avons donc pour but d'enrichir les méthodes numériques, développées précédemment pour la capture efficace des ondes de détonation avec résolution grossière, avec de l'information sur les maxima.

Ce chapitre étudie l'approche multiéchelle proposée par Anne Bourlioux. L'idée est de coupler l'information provenant de l'échelle macroscopique (simulation

sous-résolue) à celle microscopique (simulation résolue). Il ne s'agit pas de faire rouler parallèlement deux programmes, mais plutôt d'emboîter les deux méthodes de sorte que celle utilisant l'échelle microscopique soit sollicitée de façon ponctuelle et régionale.

Les méthodes que nous avons proposées pour l'approche macroscopique traitent le terme de source avec pas fractionnaires et sont de type centré additionnées d'un duo comprenant un détecteur de discontinuités (DDD) et une méthode de compression artificielle du premier ordre (ACM). Dans les cas d'extrême raideur, l'outil supplémentaire MdM, basée sur la définition de la moyenne, doit être appliquée. Pour les calculs microscopiques, les mêmes schémas seront utilisés, mais l'ACM, le DDD et la modification des moyennes en moins. De plus, on aimerait pouvoir récupérer l'information provenant des calculs en résolu pour alléger la simulation macroscopique, comme par exemple ce qui concerne l'évaluation des flux numériques.

10.2. CONCEPT

Pour enrichir les méthodes déjà existantes approximant de façon sous-résolue la propagation d'une onde de détonation, nous voulons capter de l'information, à l'échelle de la réaction chimique, sur les instabilités du front. En plus d'avoir une capture efficace de l'onde sur un maillage grossier, cette approche fournira la valeur des maxima des variables physiques telles la pression et la densité.

Pour ce faire, on doit emboîter deux méthodes numériques évoluant à deux échelles différentes : macroscopique (écoulement du gaz) et microscopique (réaction chimique). La méthodologie classique pour l'élaboration d'une telle méthode multiéchelle comporte quatre étapes (voir [28], ou [29] pour un résumé) :

- (1) Évolution macroscopique
- (2) Reconstruction : passage de l'échelle macroscopique à microscopique
- (3) Évolution microscopique
- (4) Estimation des flux : passage de l'échelle microscopique à macroscopique

10.2.1. Évolution

Contrairement aux approches multiéchelle dites hétérogènes, nous utiliserons le même modèle mathématique pour décrire le phénomène aux deux échelles, soit les équations d'Euler réactives, formant un système hyperbolique avec terme de source

$$U_t + F(U)_x = G(U). \quad (10.2.1)$$

Ce modèle permet à lui seul de représenter les deux comportements globaux qui nous intéressent, soit la propagation de la détonation (échelle macroscopique) et les instabilités au front (échelle microscopique).

Remarque 10.2.1. *Des approches hétérogènes ont déjà été élaborées pour résoudre certains problèmes de propulsion faisant intervenir la détonation. L'article de Powers [65] fait un survol des avancées dans cette direction.*

Sun et Engquist [31] ont développé une méthode multiéchelle pour résoudre le problème de la convergence des schémas vers la solution non-physique. Leur approche consiste à considérer la version homogène des équations d'Euler réactives à l'échelle macroscopique et la version complète à l'échelle microscopique. Nous croyons que cette approche constitue une erreur du point de vue de la modélisation. En effet, les équations d'Euler réactives représentent déjà le phénomène de combustion à grande échelle. Il est donc non justifié de les tronquer de la réaction chimique.

Dans le même ordre d'idées, nous utiliserons le même schéma de base pour les étapes d'évolution (1 et 3). Pour éviter les complications liées au traitement implicite de la source, nous avons choisi de résoudre (10.2.1) à l'aide de la méthode de séparation des opérateurs (voir le chapitre 4).

Pour l'opérateur d'advection (solveur de la version homogène de (10.2.1)), on utilise la méthode PC (voir (4.1.21) au chapitre 4), une variation de la méthode NT de Nessyahu et Tadmor (un schéma de type Lax-Friedrichs d'ordre 2 sur maillage

décalé, voir [59]) permettant de choisir la position temporelle du prédicteur :

$$U_j^{n+\alpha} = U_j^n - \lambda \alpha F'_j, \quad (10.2.2)$$

$$U_{j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2}(U_j^n + U_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(U'_j - U'_{j+1}) \\ + \frac{\lambda}{2\alpha} \left[(2\alpha - 1)(F(U_j^n) - F(U_{j+1}^n)) + (F(U_j^{n+\alpha}) - F(U_{j+1}^{n+\alpha})) \right], \quad (10.2.3)$$

avec F'_j et U'_j des dérivées numériques et $\alpha \in]0, 1[$.

Pour la simulation macroscopique, PC doit être accompagnée d'une méthode de compression artificielle accompagnée d'un détecteur de discontinuité approprié (voir la section 6.5 du chapitre 6), pour diminuer la viscosité numérique associée à la capture des discontinuités, et parfois même d'une modification de la moyenne de la source lors de son intégration (voir la section 8.3 du chapitre 8).

Pour l'opérateur de réaction (solveur de $U_t = G(U)$), étant donné la nature du terme de source, on peut la résoudre exactement (voir la section 4.2.4 au chapitre 4).

10.2.2. Reconstruction

Cette étape consiste à reconstruire, sur un domaine macroscopique choisi, les données microscopiques. C'est l'étape qui est techniquement, dans le cas de la présente étude, la plus délicate.

10.2.2.1. *Domaine Macroscopique de Raffinement*

Le premier pas consiste à choisir le domaine macroscopique à raffiner. En une dimension spatiale, ce choix est plus facile. Étant donné que toute l'information sur le front de la détonation est contenue dans une seule cellule (grâce à la compression artificielle), nous prendrons cette cellule centrée en X_j et sa valeur associée U_j comme pivot.

Remarque 10.2.2. *Les majuscules seront désormais réservées aux valeurs macroscopiques et les minuscules aux microscopiques. De la même façon, Δx et Δt sont les discrétisations spatiale et temporelle à l'échelle macroscopique, tandis que δx et δt sont associés à l'échelle microscopique.*

À ce pivot, nous associerons une fenêtre \mathcal{F}_j . Les dimensions de cette dernière doivent être minimales, étant donné que nous raffinons à l'échelle microscopique toute la fenêtre. Ainsi, selon la discrétisation microscopique choisie, $\mathcal{F}_j = [X_{j-k}, X_{j+l}]$, où $k, l \geq 1$. Étant donné que nous sommes intéressés à des cas où l'écart entre les échelles est très grand, $k = l = 1$ est suffisant, formant une fenêtre $\mathcal{F}_j = [X_{j-1}, X_{j+1}]$.

Le domaine microscopique devient alors

$$d = \{X_{j-1}, X_{j-1} + \delta x, \dots, X_{j-1} + (N-1)\delta x, X_j, X_j + \delta x, \dots, X_j + (N-1)\delta x, X_{j+1}\}$$

où

$$N = \Delta x / \delta x. \tag{10.2.4}$$

10.2.2.2. Projection des Variables Eulériennes

La deuxième étape est la reconstruction de $u = RU$ sur \mathcal{F}_j . Pour de meilleurs résultats, l'opérateur R doit être choisi selon le cas étudié. Le pas d'espace Δx est choisis suffisamment grand pour que, lors de la simulation macroscopique, aucune fluctuation des variables physiques derrière le front ne puisse être captée, i.e. que la résolution soit grossière au point de ne pas pouvoir voir les oscillations causées pas les instabilités. Alors, dans le cas d'une détonation reliant deux états gazeux constants, l'option la plus simple semble être la reconstruction de type *plateaux*, où R produit une solution constituée de deux états constants, un dit brûlé et l'autre non-brûlé, séparés par une discontinuité captée au point pivot (X_j, U_j) (voir la figure 10.2).

À la lumière des observations du chapitre précédant, portant sur les conditions initiales pour les cas de transitions (section 9.2.3), il est plus prudent de reconstruire

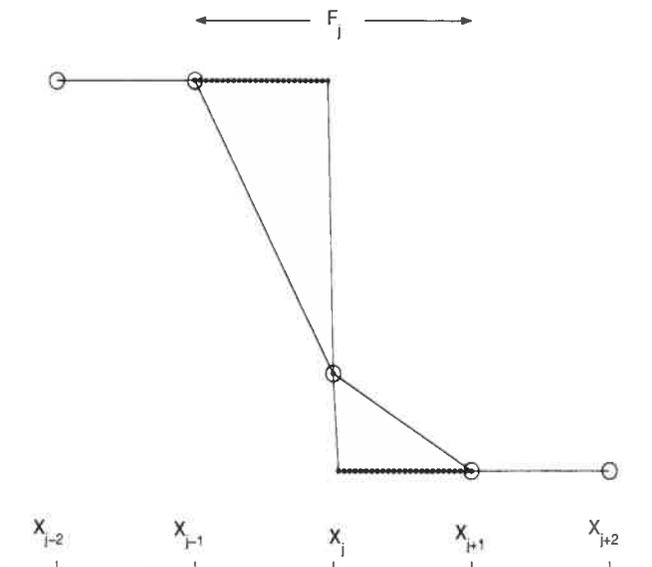


FIG. 10.2. Reconstruction plateaux $u = RU$ sur une fenêtre F_j

en conservant d'avantage d'information de la dernière simulation microscopique. En effet, dans la zone de transition $|f - f_0^*| < v$, les conditions initiales de type plateaux peuvent conduire à un comportement stable, tandis que l'onde est instable. La reconstruction la plus naturelle est donc de réutiliser le profil obtenu lors de la dernière évaluation microscopique, en prenant soin que la matière soit conservée aux extrémités de la fenêtre. En d'autres mots, la quantité u au point X_{j-1} doit coïncider avec U_{j-1} et avec U_{j+1} en X_{j+1} . C'est pour cette raison, entre autres, que l'on ne considérera pas l'utilisation de la solution théorique ZND pour la reconstruction. De plus, dans le cas où l'on devrait ajuster les quantités u_{j-1} (on a toujours $u_{j+1} = U_{j+1}$), il faut s'assurer que la transition entre les quantités au point X_{j-1} et l'intérieur de la fenêtre \mathcal{F}_j se fasse de façon lisse, pour ne pas introduire de nouvelles discontinuités. Pour s'assurer de la régularité de la solution à l'extrémité, il s'agit de trouver la première intersection (en partant du bord où se trouve le gaz brûlé) de u avec U_{j-1} .

Il faut de plus tenir compte des possibles complications pouvant survenir aux bords (voir le chapitre précédent, 9.2.2). La gestion des conditions aux bords,

en la présence des traces des oscillations survenues au front, nécessite un traitement particulier. Il est donc préférable de l'éviter, en particulier pour les cas multi-dimensionnels. Il y a peu de littérature traitant de ce problème de conditions aux bords, car dans les études numériques des instabilités, le domaine est choisi suffisamment grand pour que les traces n'interfèrent pas avec les bords. Dans le cas d'une simulation multiéchelle comme la notre, nous ne pouvons pas nous permettre de choisir un domaine microscopique trop grand, le but étant justement l'économie de calcul.

Une troisième reconstruction, consiste alors à reprendre partiellement le dernier profil microscopique, en coupant les traces des oscillations derrière le front. Pour ce faire, il suffit de trouver la première intersection de U_{j-1} après le pic de von Neumann. La figure 10.3 illustre un exemple de ce type de reconstruction.

C'est cette dernière reconstruction que nous utiliserons pour tester l'approche

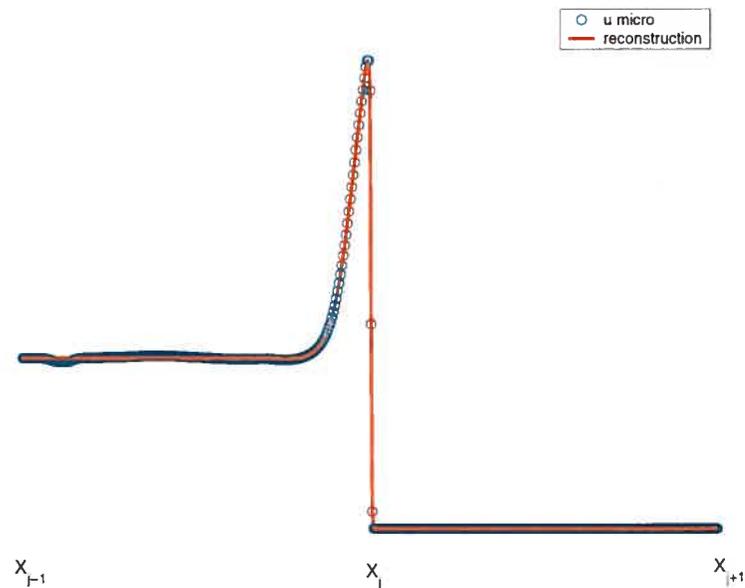


FIG. 10.3. Reconstruction à l'aide du dernier pas de temps microscopique sur une fenêtre \mathcal{F}_j , avec lissage des oscillations.

multiéchelle. La reconstruction de type plateaux peut toutefois être utilisée pour fins de validation en dehors de la zone de transition.

10.2.3. Estimation des flux

Le passage de l'échelle microscopique à macroscopique doit se faire de façon à enrichir la simulation sur le maillage grossier. Une façon de le faire, est d'améliorer l'estimation des flux. Pour voir comment, retournons à la construction d'une méthode de volumes finis sur un maillage décalé.

En intégrant le système d'équations hyperbolique homogène

$$U_t + F(U)_x = 0 \quad (10.2.5)$$

sur la cellule $C_{j+1/2}^{n+1/2} := [X_j, X_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$ via la règle de Green-Riemann, on obtient

$$\begin{aligned} \int_{X_j}^{X_{j+1}} U(x, t^{n+1}) dx &= \int_{X_j}^{X_{j+1}} U(x, t^n) dx \\ &\quad - \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(X_{j+1}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(X_j, t)) dt \right), \end{aligned} \quad (10.2.6)$$

où le pas de temps précédent nous a permis de déterminer les valeurs moyennes

$$\int_{X_{j-1/2}}^{X_{j+1/2}} U(x, t^n) dx \quad \text{et} \quad \int_{X_{j+1/2}}^{X_{j+3/2}} U(x, t^n) dx.$$

La relation (10.2.6) est équivalente à

$$\begin{aligned} \left\langle U(x, t^{n+1}) \right\rangle_{X_j}^{X_{j+1}} &= \left\langle U(x, t^n) \right\rangle_{X_j}^{X_{j+1}} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\left\langle F(U(X_{j+1}, t)) \right\rangle_{t^n}^{t^{n+1}} - \left\langle F(U(X_j, t)) \right\rangle_{t^n}^{t^{n+1}} \right), \end{aligned} \quad (10.2.7)$$

où $\langle \cdot \rangle_a^b := \frac{1}{|b-a|} \int_a^b \cdot$.

Étant donné que la cellule $C_{j+1/2}^{n+1/2}$ contient peut-être une discontinuité en $X_{j+1/2}$, nous ne connaissons pas exactement la valeur du premier terme de droite de

l'équation (10.2.7) et c'est pour cette raison que nous devons l'approximer. Grâce à l'emploi d'une approximation linéaire par morceaux

$$L_j(x, t) = U_j(t) + (x - X_j) \frac{U'_j}{\Delta x}, \quad X_{j-1/2} < x < X_{j+1/2}$$

où U'_j est une dérivée numérique

$$\frac{U'_j}{\Delta x} = U_x(X_j, t) + O(\Delta x),$$

on peut obtenir l'approximation bien connue d'ordre 2 :

$$\begin{aligned} U_{j+1/2}^n &\equiv \left\langle U(x, t^n) \right\rangle_{X_j}^{X_{j+1}} \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_{X_j}^{X_{j+1/2}} L_j(x, t^n) dx + \frac{1}{\Delta x} \int_{X_{j+1/2}}^{X_{j+1}} L_{j+1}(x, t^n) dx \\ &= \frac{1}{2}(U_j^n + U_{j+1}^n) + \frac{1}{8}(U'_j - U'_{j+1}), \end{aligned}$$

avec U_j^n approximant $U(x_j, t^n)$.

On peut donc réécrire (10.2.7) sous sa forme conservative

$$\left\langle U(x, t^{n+1}) \right\rangle_{X_j}^{X_{j+1}} = U_{j+1/2}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1} - F_j),$$

où $F_j = \left\langle F(U(X_j, t)) \right\rangle_{t^n}^{t^{n+1}}$. Le défi majeur de la conception de méthodes de volumes finis est l'approximation adéquate des flux numériques F_{j+1} et F_j . Nous devons souvent faire le compromis suivant :

$$F_j \simeq \hat{F} \circ F \circ \langle U(X_j, t) \rangle \quad (10.2.8)$$

où \hat{F} est un opérateur d'approximation du flux numérique. Bien sûr, pour des flux F non-linéaires, l'approximation (10.2.8) est source d'erreur car

$$\langle F \circ U(X_j, t) \rangle \neq F \circ \langle U(X_j, t) \rangle.$$

Remarque 10.2.3. *Nous avons le même problème lors de l'évaluation du terme de source. Cette approximation pour le cas de la source est même à la base de la convergence des schémas de volumes finis vers la solution non-physique (voir la section 8.2).*

C'est à cet endroit précis que l'on va injecter l'information de l'échelle microscopique dans l'échelle macroscopique. Lors de la simulation à petite échelle, on fait évoluer le schéma pendant N pas de temps δt (car $\Delta x = N\delta x$) entre t^n et t^{n+1} :

$$\Delta t = \sum_{i=1}^N (\delta t)_i, \quad (10.2.9)$$

Le rapport N (10.2.4) entre les deux échelles spatiales est, par définition, très grand. En évaluant le flux $f(u(x_j \equiv X_j, t))$ à chacun de ces pas de temps (l'emploi de f fait référence au flux F du système (10.2.5), mais évalué sur le maillage microscopique), nous pourrions obtenir une vraie moyenne arithmétique $\langle f \circ U(X_j, t) \rangle$, donc une évaluation exacte (dans la mesure où on discrétise) de F_j .

10.2.3.1. Critères d'Arrêt

La valeur du flux numérique convergeant rapidement à son point d'équilibre, il n'est pas nécessaire de résoudre le système sur le maillage microscopique pendant N pas de temps.

Nous avons établis deux critères d'arrêt pour limiter le temps de résolution microscopique. Le premier est basé sur la convergence des flux au point X_j (les flux aux points X_{j-1} et X_{j+1} convergent presque instantanément). Une fois que la moyenne du flux au point X_j a convergé après M itérations, i.e.

$$\left| \frac{\sum_{k=1}^M f(X_j, t^n + \sum_{i=1}^k (\delta t)_i)}{M} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} f(X_j, t^n + \sum_{i=1}^k (\delta t)_i)}{M-1} \right| < \varepsilon \left| \frac{\sum_{k=1}^M f(X_j, t^n + \sum_{i=1}^k (\delta t)_i)}{M} \right|, \quad (10.2.10)$$

pour ε petit (une fonction de δx), on peut commencer l'évaluation macroscopique.

Étant donné que le comportement des oscillations du front à long terme nous intéresse, nous avons déterminé un deuxième critère d'arrêt. Une fois que le comportement, stable ou instable, est détecté, on peut arrêter la simulation microscopique. En analysant l'historique de la valeur maximale de la pression, par exemple, on peut généralement déterminer temporairement le comportement après seulement trois oscillations complètes. En effet, si les trois maxima sont décroissants, la

détonation est stable, sinon, elle est instable. Ce critère qualitativement simple est cependant problématique pour la mise en oeuvre. Les oscillations principales sont également composées d'oscillations. Les figures 10.4 et 10.5 illustrent la structure et sous-structure des oscillations. Dans ces circonstances, il devient assez délicat de déterminer la valeur des maxima globaux. Nous avons choisi d'interpoler l'his-

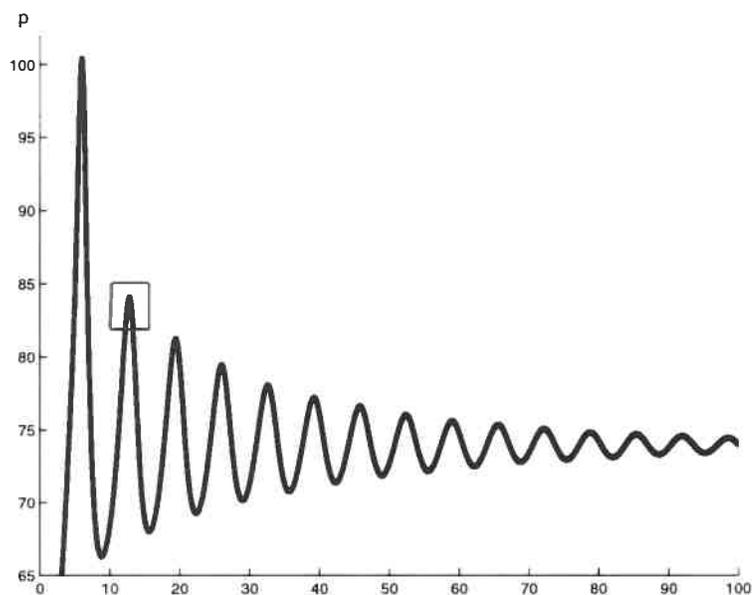


FIG. 10.4. Historique des maxima de pression pour un cas stable

torique des maxima de pression par un algorithme d'approximation polynomiale de degré élevé, comme par exemple *polyfit* de Matlab. Une fois l'interpolation faite, il est facile de déterminer analytiquement, à l'aide des dérivées premières et secondes, la position et la valeur des maxima. Cette approche comporte cependant une faiblesse majeure, soit le choix du degré du polynôme. Pour un degré trop élevé, il y a danger de trop apprendre des oscillations (*overfitting*), tandis que pour un degré trop bas, on risque de ne pas obtenir parfaitement la valeur des maxima et déduire le mauvais comportement. Nous avons donc opté pour les compromis suivants : on laisse passer les premiers pas de temps avant de commencer l'interpolation, car le comportement au début est souvent erratique, on interpole ensuite avec un degré très élevé comme par exemple 20, et une fois qu'un comportement a été reconnu, on valide l'apprentissage polynomiale grâce au test statistique AIC.

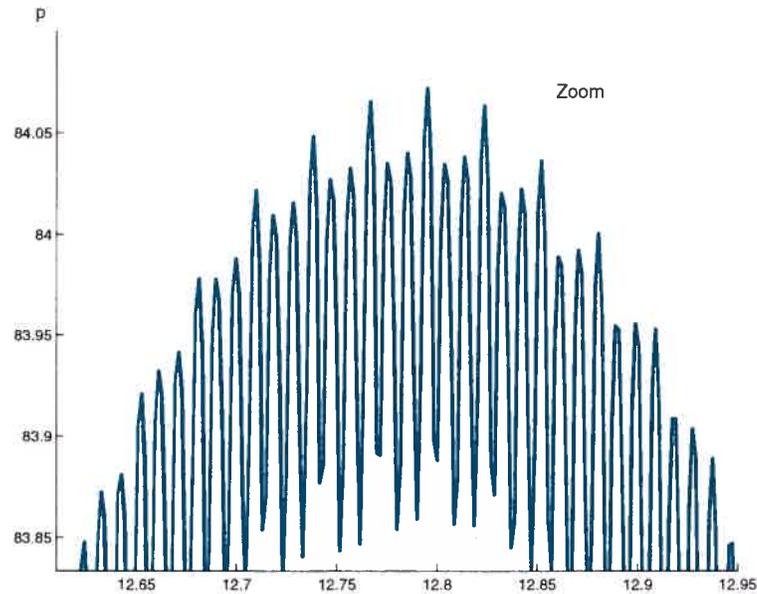


FIG. 10.5. Historique des maxima de pression pour un cas stable : zoom

Le test AIC, pour *Akaike information criterion* [3], est un test permettant de juger le coût du nombre de paramètres en rapport à l'erreur générée par ce dernier. Soit n le nombre d'observations, k le nombre de paramètres du modèle et SRC la somme des résidus au carré générés par le modèle, la statistique AIC est déterminée par

$$AIC = 2k - n \ln \left(\frac{SRC}{n} \right). \quad (10.2.11)$$

Plus l'AIC est négatif, meilleur est le modèle. Donc, une fois un comportement reconnu, on refait une interpolation avec un degré de moins et on compare les AIC. Si la nouvelle interpolation est meilleure, on diminue encore d'un degré, et ainsi de suite jusqu'à trouver la meilleure interpolation et prendre une décision plus éclairée.

Remarque 10.2.4. *Dans les cas où le degré de poussée tend vers 1, l'onde se comporte de façon chaotique (voir [12]). Dans ce cas, la méthode de reconnaissance décrite ici n'est pas suffisante, dû à l'irrégularité du comportement. Il faudrait dans ce cas prévoir l'élaboration d'une méthode de reconnaissance de formes plus robuste.*

10.2.3.2. *Suivi du Front*

La convergence des flux et de leur moyenne arrive bien avant la reconnaissance du comportement. Pour en tirer quand même profit, on initialise un processus de suivi de front démarrant une fois que les flux au point X_j ont convergé. On redéfinit un domaine centré autour du front (maintenant devant X_j) de plus petite taille (2000 points derrière le front et entre 100 et 500 devant, voir section 9.2.2 et 10.3), que l'on recentre ponctuellement par la suite. Avec ce recadrage, on gagne un temps précieux pour la suite de la simulation microscopique, sans altérer la valeur des flux au points d'intérêt X_{j-1}, X_j, X_{j+1} .

Remarque 10.2.5. *Nous attendons la convergence des flux et non de leur moyenne pour démarrer le suivi de front, car les moyennes convergent évidemment plus lentement. De cette façon, on économise un temps de calcul non négligeable. On continue d'évaluer la moyenne des flux au point X_j jusqu'à la fin de la simulation. Si le point X_j vient à ne plus être dans le cadre, on cesse l'évaluation du flux moyen.*

10.2.4. **Algorithme**

Les grandes lignes décrivant la méthode multiéchelle sont les suivantes :

- Initialisation sur les domaine micro et macro
- Tant que le temps final n'est pas atteint :
 - Si c'est le premier pas de temps
 - macro : solution plateaux
 - micro : solution ZND
 - Sinon, reconstruction micro à partir de la dernière solution micro obtenue
 - Évolution de la solution micro sur la fenêtre \mathcal{F}_j (voir la figure 10.6)
 - Si les flux ont convergés, recadrer et démarrer le suivi de front
 - Si un comportement est détecté, arrêter la simulation micro
 - Évolution macro avec ACM, DDD et MdM pendant Δt , en considérant les flux moyens.

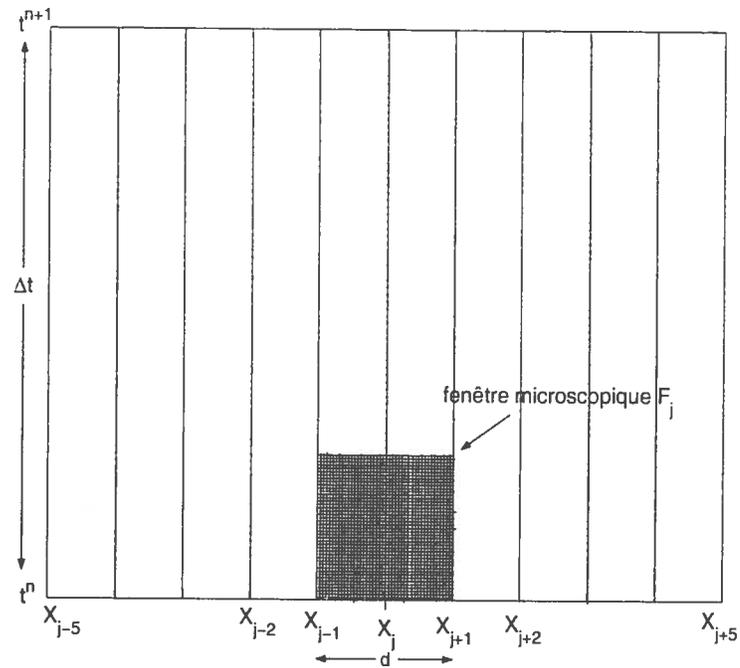


FIG. 10.6. Maillage multiéchelle.

10.3. RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Cette section se divise en trois expériences visant à tester notre approche multi-échelle uni-dimensionnelle. Les deux premières concernent des détonations stable et instable respectivement. La dernière consiste en une détonation évoluant dans un gaz avec un gradient de densité positif. Les paramètres sont choisis de manière à ce que la nature de la détonation passe de stable à instable.

10.3.1. Détonation stable

Nous étudions ici le comportement de la méthode multi-échelle décrite plus haut pour un cas de détonation stable. Nous voulons vérifier que le changement d'échelle ne perturbe pas la dynamique, au point de transformer une détonation stable en instable. Nous reprenons le cas avec chimie d'Arrhenius étudié aux chapitres 7, 8 et 9 :

$$(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1),$$

$$K_0 = 165.6762, E^+ = 50, q_0 = 50, \gamma = 1.2.$$

Le degré de poussée est fixé à $f = 1.76$, de façon à observer une détonation stable.

Les paramètres de la simulation multiéchelle sont $\delta x = 1/20 = L_{1/2}/20$, le rapport entre les deux échelles $N = 90001$, le critère d'arrêt $\varepsilon = (\delta x)^3$ (pour l'initiation du suivi de front), le nombre de points conservés derrière et devant la discontinuité pour le suivi de front est de 2000 et 500 respectivement, la condition CFL de 0.4 et le paramètre α de PC est $1/3$.

À la figure 10.7, sont illustrés les profils obtenus à $t = 812$, soit 5 pas de temps macroscopiques. On reconnaît le type de profils obtenus avec l'ACM, où toute l'information de la discontinuité est contenue dans une seule maille. L'introduction des flux moyens provenant de la simulation microscopique a été validée à l'aide de bilans de masse. Pour s'assurer que la méthode reste conservative, nous avons vérifié que les masses totales, sur tout le domaine, obtenues avec les flux moyens, soient les mêmes que celles obtenues avec la méthode PC classique, qui est conservative. Avec le choix de reconstruction décrit à la section 10.2.2, la méthode est bien conservative.

Aux figures 10.8 et 10.9, on peut voir l'historique des maxima pendant la simulation totale. Pour les dimensions choisies, le comportement stable est détecté après environ 14% d'un pas de temps macroscopique Δt . C'est ici que l'on comprend la pertinence de l'approche multiéchelle versus celle du raffinement de maillage. En effet, pour capter le comportement général de l'onde, il est suffisant de faire évoluer le schéma sur le maillage raffiné pendant environ un septième du temps. Pour une méthode de raffinement de maillage classique, on aurait fait évoluer l'onde sur le maillage raffiné pendant tout Δt , ce qui représente une augmentation du temps de calcul considérable comparé au multiéchelle.

Pour chacun des 5 pas de temps macroscopiques, le comportement détecté est la stabilité, et le comportement global est stable.

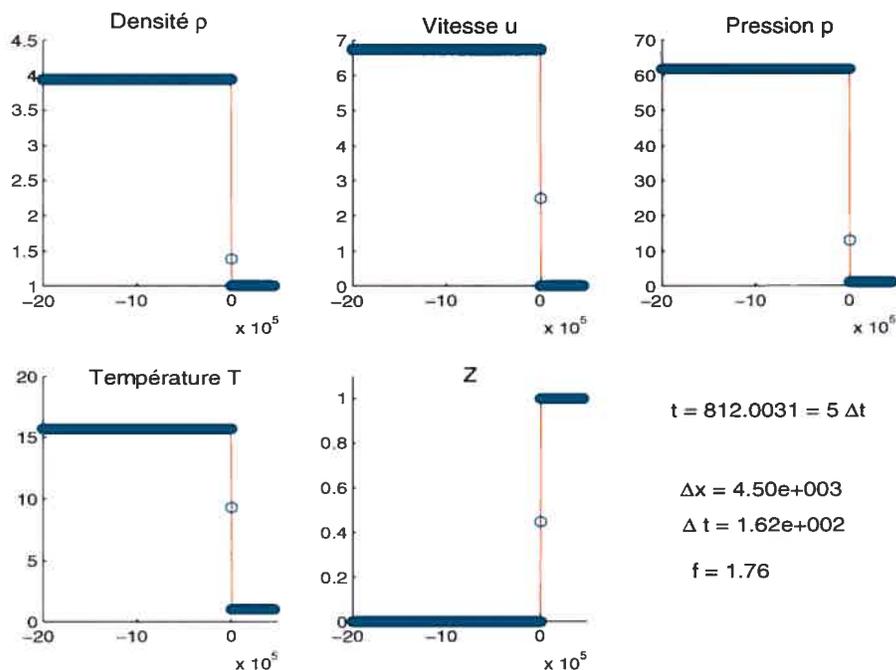


FIG. 10.7. Profils macroscopiques à $t = 812$, $f = 1.76$. Solution exacte en rouge continu et solution approximée en bleu discontinu.

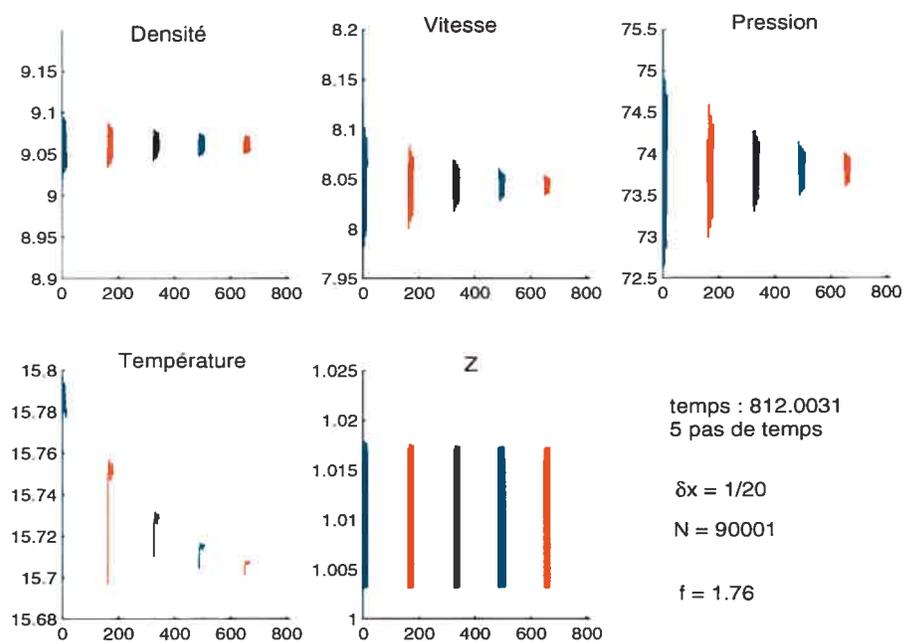


FIG. 10.8. Historique des maxima pour le cas stable, $f = 1.76$.

Nous avons testé la robustesse de la reconstruction avec l'expérience suivante : nous avons forcé l'arrêt de la simulation microscopique à 0.5% de Δt . Les flux

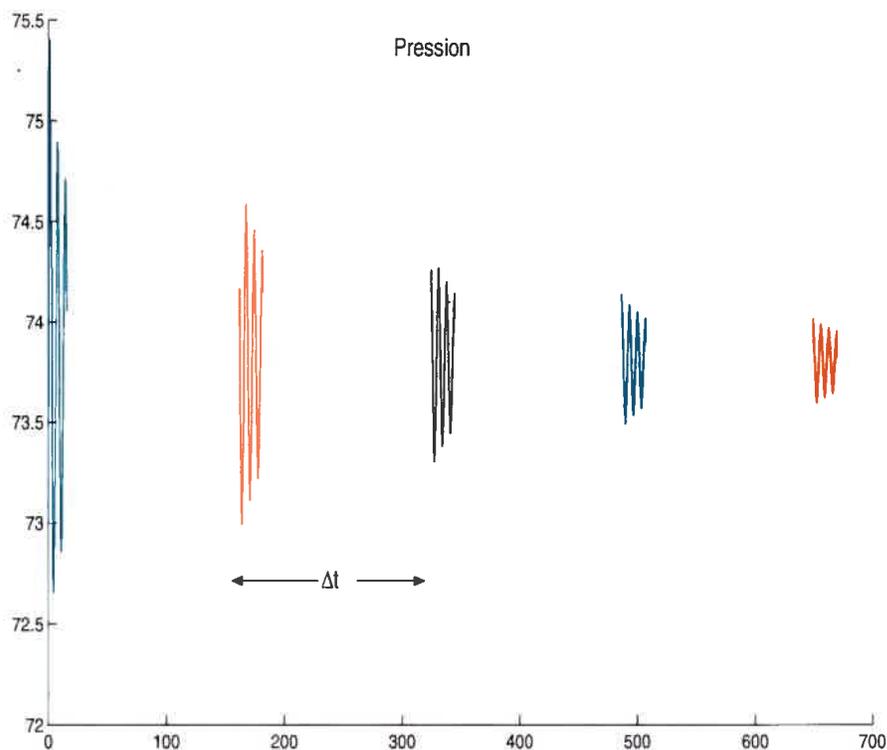


FIG. 10.9. Historique de la pression maximale pour le cas stable : zoom

moyens n'ayant bien sûr pas encore convergé, nous avons considéré les flux numériques de la méthode PC pour le schéma macroscopique. Le but de l'expérience était de voir si l'arrêt prématuré de la simulation microscopique avait un impact sur le comportement global de l'onde capté par la méthode. Pour ce cas stable, le comportement global reste inchangé, c'est-à-dire que la tendance à long terme reste la stabilité, même si ce comportement n'a pas le temps d'être détecté à chaque pas de temps. L'expérience a été répétée dans la zone de transition, soit pour $f = 1.725$, et les conclusions sont les mêmes. L'implication directe de ce résultat se situe au niveau de la méthode de reconstruction des conditions initiales microscopiques. En effet, en une dimension, la dynamique est très robuste aux conditions initiales. Nous avons même vu, au chapitre précédent, qu'elle est visible même avec des conditions initiales plateaux (hors de la zone de transition). Ceci donne plus de liberté pour la reconstruction sur le maillage microscopique, sachant que la dynamique refera surface de toute façon.

10.3.2. Détonation instable

La deuxième expérience est similaire à la première, excepté pour le degré de poussée qui est fixé à $f = 1.6$, résultant en une détonation instable.

Les mêmes conclusions que pour le cas stable s'appliquent. Le profil macroscopique, à la figure 10.10, correspond à la solution exacte. L'approche multiéchelle capte bien la dynamique générale de l'onde (voir les figures 10.11 et 10.12). Pour chaque simulation microscopique, le critère d'arrêt basé sur l'interpolation polynomiale de degré 20, avec un test de sur-apprentissage (AIC), capte bien la nature instable de la détonation. Techniquement, le caractère instable se détecte plus rapidement que le caractère stable. Dès que l'amplitude d'une oscillation dépasse la précédente, l'onde est instable. Ceci explique pourquoi le caractère instable est détecté à environ 6.6% du pas de temps macroscopique Δt , comparativement à 14% pour le cas stable.

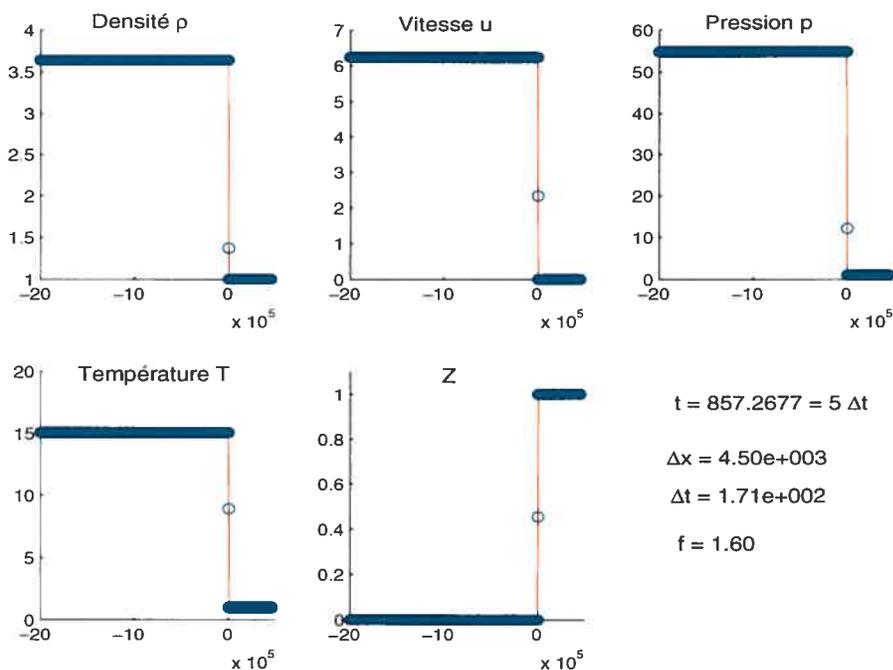


FIG. 10.10. Profils macroscopiques à $t = 857$, $f = 1.60$. Solution exacte en rouge continu et solution approximée en bleu discontinu.

À la figure 10.13, on observe le comportement des flux pour le cinquième pas de temps, à la cellule X_j . Les flux convergent à 669 pas de temps (pour le cinquième

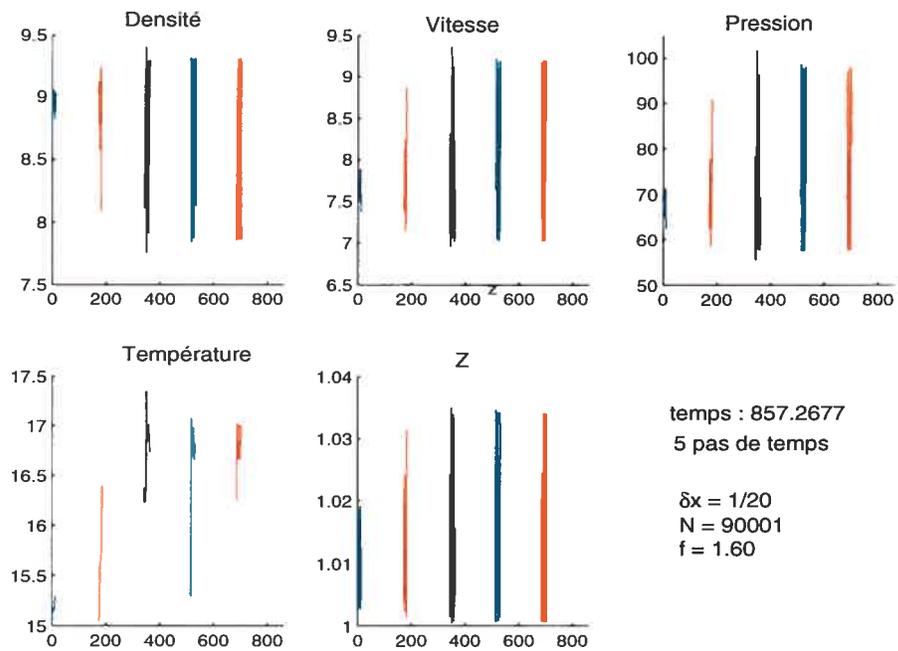


FIG. 10.11. Historique des maxima pour le cas instable, $f = 1.60$.

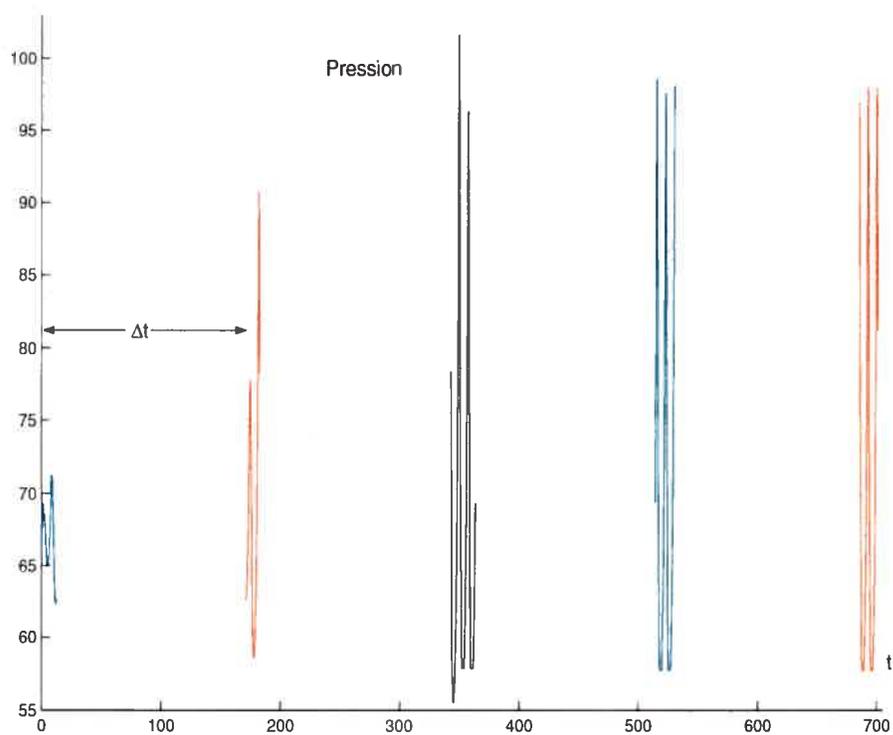


FIG. 10.12. Historique des maxima de pression pour le cas instable : zoom

pas de temps macroscopique), soit environ 7% des pas de temps nécessaires pour capturer la dynamique instable.

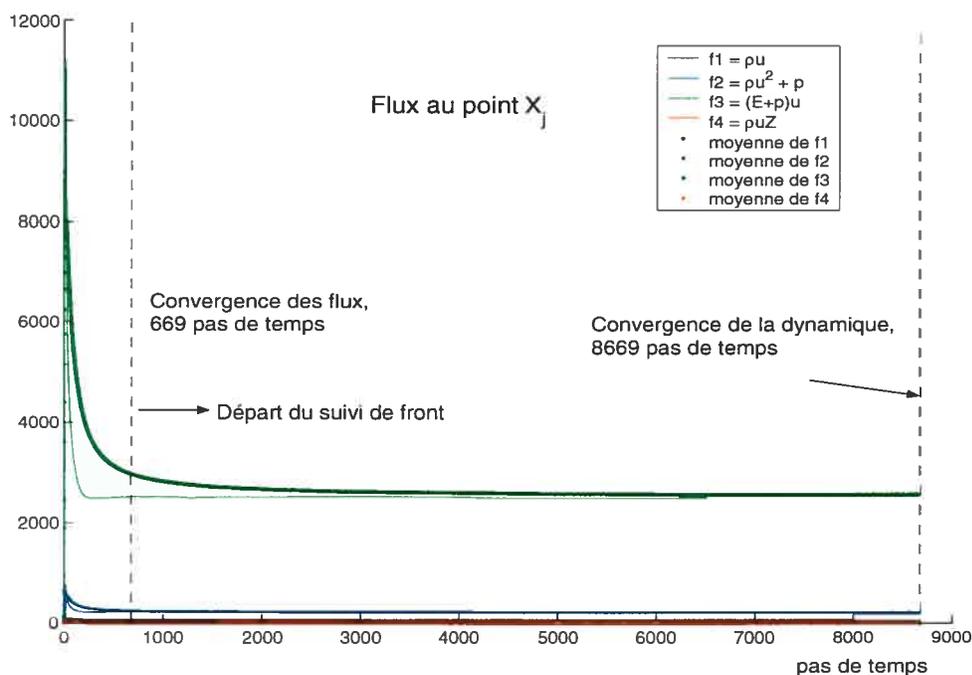


FIG. 10.13. Flux pour X_j au 5^e pas de temps macroscopique, $f = 1.60$, $N = 90001$: zoom

10.3.3. Transition entre stable et instable

Pour cette expérience, on étudie la transition de l'état de la détonation de stable à instable. La transition est déclenchée par une légère augmentation du gradient de densité en amont de la détonation. Cette expérience s'avère être un test très difficile, car en plus de faire évoluer l'onde de combustion dans la zone de transition, elle vérifie sa capacité à détecter un changement de comportement.

Étant donné que l'on se trouve dans une zone de transition, la discrétisation doit être plus fine que pour les 2 expériences précédentes. On fixe alors $\delta x = 1/30 = L_{1/2}/30$. Comme pour les cas stable et instable, on choisit le rapport entre les deux échelles $N = 90001$, le critère d'arrêt $\varepsilon = (\delta x)^3$, le nombre de

points conservés derrière et devant la discontinuité pour le suivi de front est de 2000 et 500 respectivement, la condition CFL de 0.4 et le paramètre α de PC à $1/3$. La densité de départ dans le gaz non-brûlé est de 1 et augmente à chaque maille macroscopique de $\delta\rho_0 = 0.001$. Le degré de poussée est fixé à 1.731, soit légèrement au dessus de la valeur de transition. La variation de la densité devant le front doit également se refléter dans la simulation microscopique. C'est au niveau de la reconstruction microscopique que l'ajustement s'effectue : devant le front, on reconstruit le gaz non-brûlé de façon à ce que la densité augmente de $\delta\rho_0/N$ à chaque maille (voir la figure 10.14).

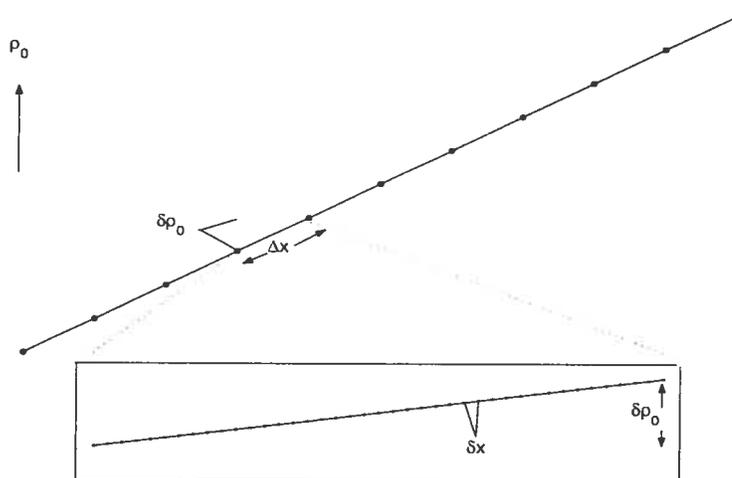


FIG. 10.14. Variation de ρ_0 en fonction de Δx et δx .

10.3.3.1. Détermination du degré de poussée

L'augmentation de la densité devant le front, pour f fixe, est équivalente, pour une densité constante, à une diminution de f . La détermination des valeurs du paramètre de bifurcation f pour lesquelles la détonation est stable ou non, est faite pour un état non-brûlé défini par $(\rho, p, u, Z)_0 = (1, 1, 0, 1)$. Pour avoir une idée de la dynamique de la détonation pour une densité $\rho_0 > 1$, il faut évaluer le degré de poussée correspondant au même état brûlé, mais avec une densité $\rho_0 = 1$. À partir des équations de Chapman-Jouguet, il est possible d'établir une relation entre le degré de poussée, la densité initiale et la vitesse de propagation

de la détonation s :

$$s = s_{CJ} \sqrt{f}, \quad (10.3.1)$$

avec s_{CJ} la vitesse d'une détonation Chapman-Jouguet

$$s_{CJ} = u_0 + m_{CJ}/\rho_0,$$

où (voir la relation (1.2.12) du chapitre 1)

$$m_{CJ} = \sqrt{\gamma p_0 \rho_0 + q_0 (\gamma^2 - 1) \rho^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{2\gamma p_0}{\rho_0 q_0 (\gamma^2 - 1)}} \right)}.$$

Pour différentes valeurs initiales de f , les relations entre ρ_0 et le degré de poussée f associé à une densité de 1 ($f(\rho_0 = 1)$) sont illustrées à la figure 10.15. Nous nous sommes intéressés au cas où f est initialement fixé à 1.731, car il y a un changement d'état assez rapide. Lorsque ρ_0 passe par 1.0116, le degré de poussée de référence est 1.73 et l'onde devient alors instable.

En pratique cependant, la vitesse s n'est pas exactement celle décrite en (10.3.1).

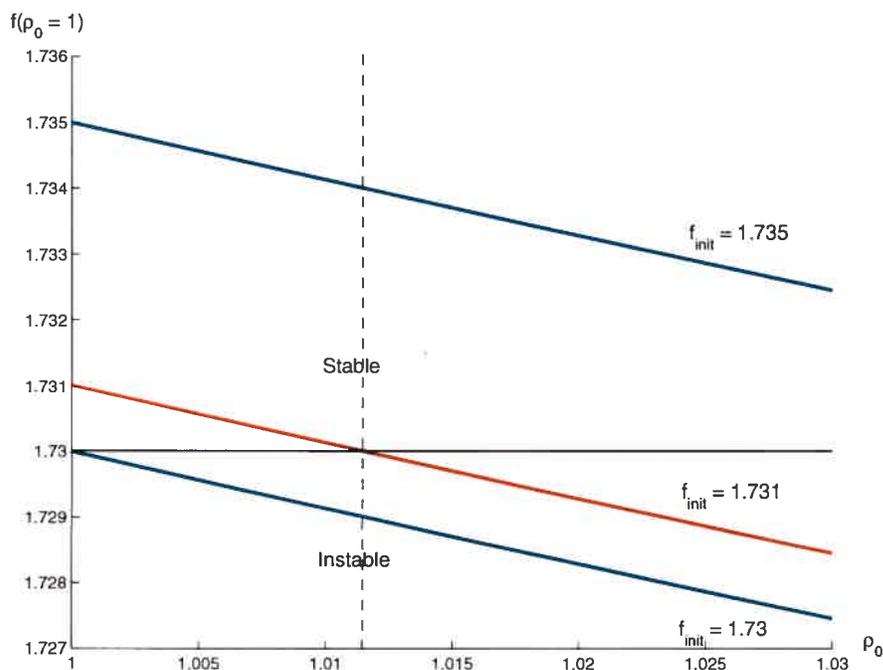


FIG. 10.15. Variation de f associé à $\rho_0 = 1$, pour une densité avec gradient devant la détonation.

Pour une détonation (stable ou instable), la vitesse de propagation de l'onde oscille autour de la valeur prédite par la théorie de Chapman-Jouguet, mais converge en moyenne vers elle. On peut voir le comportement de la vitesse moyenne de propagation (S_2^n (voir (7.3.1), chapitre 7)), par exemple, pour le cas où $f = 1.6$ à la figure 10.16 . Ce fait influence la détermination de $f(\rho_0 = 1)$. La densité devant le front permettant de passer à l'état instable ne sera donc pas exactement 1.0116, mais dans son voisinage.

Pour vérifier concrètement l'influence de la variation de la vitesse sur la détermi-

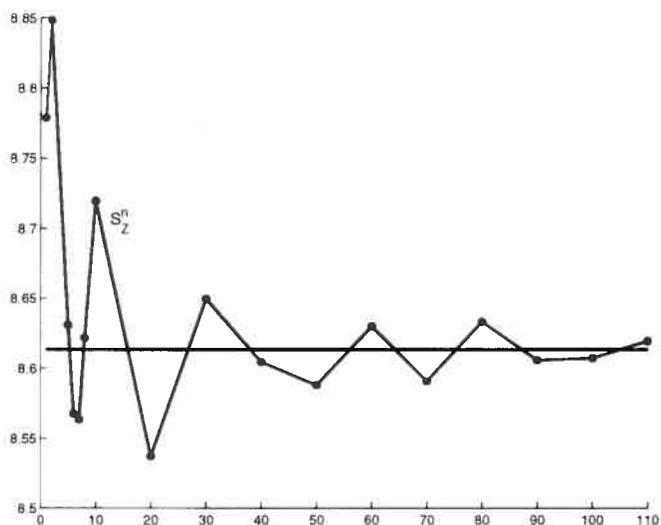


FIG. 10.16. Variation de S_2^n pour $f = 1.6$, avec $L_{1/2} = 20\Delta x$.

nation du degré de poussée de référence, nous avons fait évoluer une détonation dans un milieu où la densité augmente lentement. La densité du gaz non-brûlé ρ_0 passe de 1 à 1.02 avec une variation de $\rho_0 = 0.000001$ par cellule et la discrétisation est de $\Delta x = 1/30$. Cette expérience servira également pour valider la solution obtenue sur le maillage microscopique de la simulation multiéchelle. La figure 10.17 illustre le comportement du maximum de pression lors du passage de l'onde dans le gaz réactif avec un gradient de densité positif. L'onde devient instable vers $t = 75$, soit pour $\rho \simeq 1.00142$. À $t = 500$, la pression maximale oscille entre $[71.1, 75.5]$.

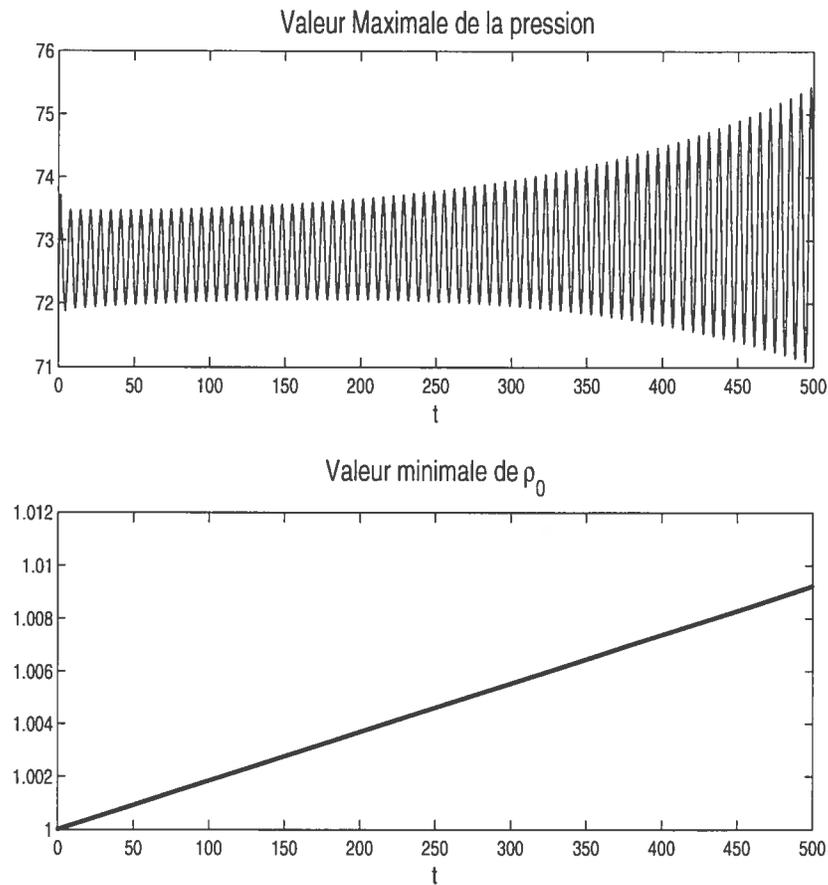


FIG. 10.17. Historique de la pression maximale le cas transitoire, $f = 1.731$, en continu avec $\Delta x = 1/30$ et densité du gaz non-brûlé devant le front.

10.3.3.2. Simulation multiéchelle

Les profils de la solution à grande échelle se trouvent à la figure 10.18. Encore une fois, on constate que l'introduction d'information de l'échelle microscopique ne perturbe pas la solution finale. De plus, comme nous l'avons vu au chapitre 7, avec l'expérience 7.3.4 concernant l'interaction entre une détonation forte et un profil oscillatoire, l'ACM gère bien les cas où le gaz est non stationnaire en amont. Après 30 pas de temps, la densité au front est de $\rho_0 = 1.01014$.

La figure 10.19 montre la solution obtenue sur le maillage microscopique pour

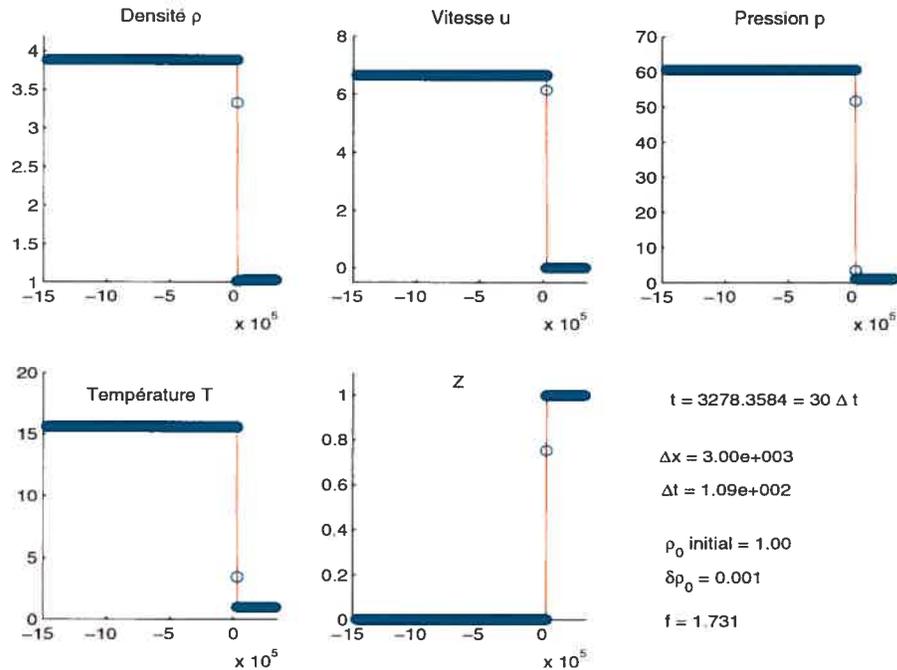


FIG. 10.18. Profil de la solution à grande échelle, pour le cas transitoire $f = 1.731$. Solution exacte en rouge continu et solution approximée en bleu discontinu.

la simulation multiéchelle. On voit premièrement que le comportement global est similaire à celui observé pour la simulation continue 10.17.

Sur la figure 10.20, on voit l'historique des maxima de pression. Les espaces entre chaque simulation ont été éliminés, de façon à obtenir une meilleure vue d'ensemble. Prises indépendamment, les simulations microscopiques cessent d'être stable vers $t = 655.5$, avec une densité au front d'environ $\rho_0 = 1.00203$. Rappelons que, pour la simulation continue (voir la figure 10.17), l'onde devenait instable pour $\rho \simeq 1.00142$ et que pour $\rho_0 = 1.01014$, la pression oscillait entre 71.1 et 75.5. Ces quantités sont inscrites pour fin de comparaisons sur la figure 10.20. En plus d'obtenir qualitativement le comportement désiré, les résultats sont quantitativement très cohérents.

La méthode multiéchelle est donc assez robuste pour capter un changement d'état dans la dynamique, même dans la zone de transition. Les expérimentations de cette dernière section permettent d'affirmer que l'approche multiéchelle,

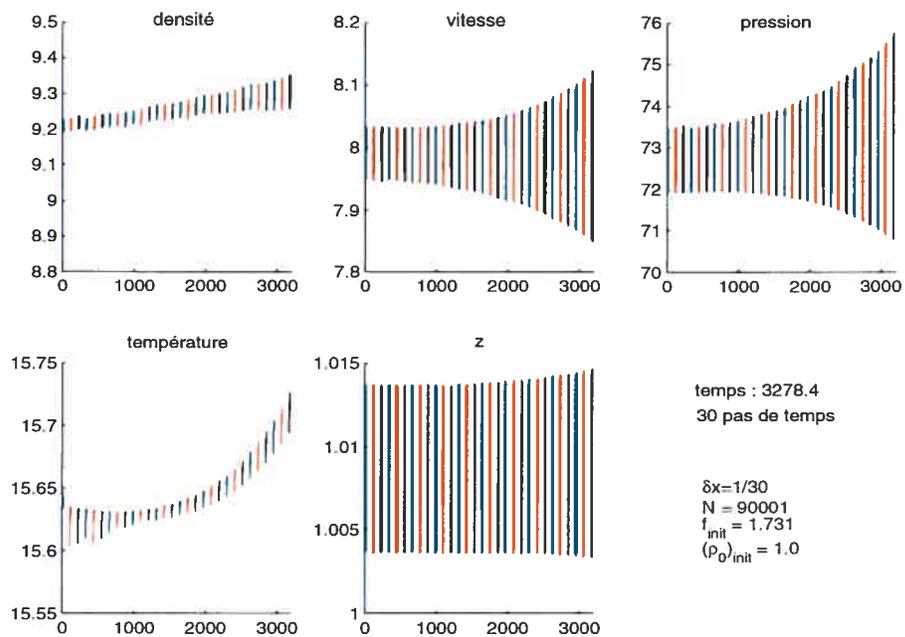


FIG. 10.19. Historique des maxima pour le cas transitoire, $f = 1.731$.

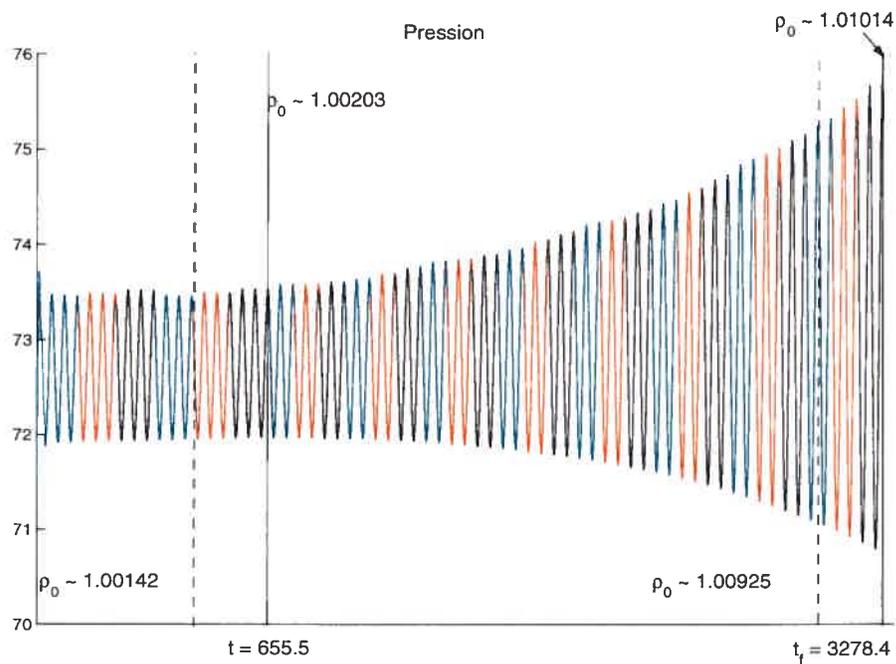


FIG. 10.20. Historique continu du maximum de la pression pour le cas transitoire, $f = 1.631$.

décrite dans ce chapitre, constitue une façon efficace d'enrichir les simulations

uni-dimensionnelles à grande échelle d'information provenant de l'échelle de la réaction chimique.

CONCLUSION

L'objectif premier de la thèse était de simuler des détonations raides avec un maillage grossier. L'approche choisie consistait à explorer à fond l'hypothèse que la viscosité numérique est responsable du mauvais comportement des schémas en régime sous-résolu. En effet, toutes les méthodes de volumes finis non préalablement modifiées pour le problème particulier de la détonation convergent vers la solution non-physique lorsque le maillage est trop grossier par rapport à la largeur de la zone où se produit la réaction chimique.

Le processus de détonation étant modélisé par un système de lois de conservation hyperbolique avec un terme de source, un des objectifs secondaires de la thèse était d'ouvrir notre approche à tous problèmes modélisés par ce type de système, avec ou sans terme de source. En d'autres mots, nous ne voulions pas restreindre notre méthode au cas de la détonation. Cette ouverture aux autres problèmes implique une architecture modulaire, permettant d'ajouter de l'information sur la physique du problème sans ébranler les fondations de la méthode, c'est-à-dire une encapsulation respectant une hiérarchie entre les solveurs et leurs fonctions.

Cette architecture est, à notre avis, la meilleure façon de minimiser l'apport de l'information provenant de la physique du problème. Elle constitue le meilleur compromis entre la boîte noire et le solveur entièrement couplé avec les propriétés du problème à résoudre.

Il est difficile de nier la nature instable des détonations, car son existence a été démontrée tant expérimentalement que mathématiquement. Ainsi, obtenir une

méthode robuste en sous-résolu est un objectif pertinent, mais pour des applications plus réalistes, il faut tenir compte des instabilités au front de la détonation. Ces considérations étaient au coeur du dernier objectif de cette thèse, soit de construire une méthode multiéchelle permettant d'obtenir de l'information, provenant de l'échelle microscopique, sur les conséquences des instabilités.

Chacun des objectifs mentionnés plus haut a été réalisé. Certaines de ces réalisations sont originales et constituent une avancée dans le domaine. Les prochaines lignes résument les principales idées originales de cette thèse, dans l'ordre où elles apparaissent dans la thèse.

DÉTAILS MATHÉMATIQUES DE LA SOLUTION NON-PHYSIQUE

La théorie de Chapman-Jouguet permet de comprendre comment l'état initial non-brûlé peut être connecté par une détonation (ou une déflagration) à l'état final, où le gaz est entièrement brûlé, et de décrire cet état.

La théorie de Chapman-Jouguet permet de décrire l'état final d'un gaz après le passage d'une détonation. Elle fournit en plus une description mathématique du passage de l'état initial du gaz non-brûlé à cet état final. Cette même théorie nous a permis de détailler, à l'aide des courbes de Crussard et de Hugoniot, la solution non-physique observée lors des simulations numériques. En effet, les schémas utilisés étant conservatifs, la solution non-physique constitue forcément une solution mathématique. À notre connaissance, la structure de cette solution n'avait jamais été explorée.

CHOIX DU SPLITTING POUR LES PROBLÈMES DE RELAXATION

Les systèmes de relaxation sont associés à beaucoup de problèmes physiques. Plusieurs chercheurs s'intéressent au développement de solveurs efficaces pour résoudre des problèmes modélisés par des systèmes de relaxation (dans le contexte des schémas de type central, voir [17, 55, 61]). Encore une fois, c'est la différence entre les échelles de temps présentes dans le problème qui rendent la simulation si délicate. Lorsque la solution analytique d'un système de relaxation

est à l'équilibre, un schéma conçu pour ces systèmes doit pouvoir fournir une solution numérique aussi à l'équilibre. Le problème de la couche initiale, discuté à la section 4.2.3.1, est un des principaux obstacles au développement de ce type de méthode. Nous avons constaté que l'utilisation d'un *splitting* (séparation d'opérateurs) de Strang, au lieu de celui de Godunov, permettait de contourner ce problème. Cette solution est une façon simple et efficace d'éviter le problème de la couche initiale. Contrairement à l'approche proposée dans [17, 55, 61], cette solution ne requiert pas une extrapolation de Richardson pour le premier pas de temps. Ceci démontre de plus que le choix du type de séparation d'opérateurs doit dépendre des équations étudiées.

DÉVELOPPEMENT EN 2 DIMENSIONS SPATIALES DE PC

La méthode de volumes finis de type central utilisée dans cette étude est une légère modification du schéma proposé par Pareschi [61], appelée PC. Dans le chapitre 5, nous développons et testons cette méthode en deux dimensions spatiales. Les résultats obtenus, soit l'ordre de convergence et son comportement avec la détonation, sont très satisfaisants. Le schéma PC2 constitue donc une excellente base pour l'application de la compression artificielle multi-dimensionnelle, pour résoudre, entre autres choses, des détonations raides.

APPLICATION DE LA COMPRESSION ARTIFICIELLE AU PROBLÈME DE LA DÉTONATION RAIDE

Basés sur l'hypothèse que la viscosité numérique est responsable de la bifurcation des schémas de volumes finis vers la solution non-physique, nous avons proposé une approche jumelant la compression artificielle aux schémas de type central (voir les travaux de Arminjon pour les schémas de type central [4, 5]). La compression artificielle de Harten [38], additionnée d'un détecteur de discontinuité entropique, concept développé par Rouch [68], permet une capture des discontinuités de contact et des chocs sur une seule cellule. Grâce à cet outil, il est donc possible de limiter l'étalement du choc de pré-combustion à une seule cellule. Il a été démontré, au chapitre 7, que cette approche est très robuste en régime

sous-résolu et fournit une capture bien nette des discontinuités. De plus, grâce à la structure modulaire de la méthode, il est possible de l'utiliser pour résoudre d'autres problèmes hyperboliques, avec ou sans terme de source, seulement en modifiant le détecteur de discontinuité en fonction de la physique du problème étudié.

LIMITES DE L'HYPOTHÈSE DE LA VISCOSITÉ NUMÉRIQUE

Malgré le fait que la compression artificielle réduise au minimum l'étalement d'un choc (minimum permis pour obtenir une solution conservative), il existe toutefois une discrétisation limite pour laquelle le schéma ne peut fournir la solution physique. Il a été démontré au chapitre 8, que même avec une méthode permettant une capture des discontinuités en aucun point, comme par exemple la méthode de Glimm [19, 36], il existe forcément une discrétisation limite, fonction du paramètre déterminant la raideur du système, pour laquelle il est impossible d'obtenir la solution physique. On a ainsi montré que de minimiser la viscosité numérique était une condition nécessaire à l'obtention de la solution physique pour des maillages grossiers, mais non suffisante pour des cas extrêmes de raideur. À notre connaissance, dans la littérature, la viscosité numérique demeurait le seul facteur responsable pour le mauvais comportement des schémas en sous-résolu. Certains chercheurs, comme par exemple Bao et Jin [6], ont cependant associé les problèmes de la simulation des détonations raides et de l'équation scalaire présentée par LeVeque et Yee [50] aux mêmes causes, mais sans jamais en souligner clairement le lien, ce que nous croyons avoir fait.

MÉTHODE DE LA MODIFICATION DES MOYENNES

La deuxième méthode numérique proposée est en fait une modification de la première (jumelant ACM et DDD), permettant la résolution avec une discrétisation au delà de la discrétisation limite. La modification est faite au niveau de l'évaluation de la moyenne du terme de source. Il est montré au chapitre 8, que cette modification permet une capture efficace des détonations sur un maillage de n'importe quelle dimension, sans altérer le travail de la compression artificielle. Dans

l'esprit de ce qui a été fait précédemment. la modification des moyennes peut être ajoutée ou enlevée du schéma, sans travail supplémentaire. Son efficacité en deux dimensions spatiales, même sans l'ACM, a été démontrée.

MÉTHODE MULTIÉCHELLE HOMOGENE

La troisième méthode est une approche multiéchelle dans le cadre de laquelle nous avons utilisé les deux méthodes décrites plus haut. La simulation sous-résolue d'une détonation ne permet pas de capter les instabilités observées au front de l'onde de combustion. En pratique cependant, il peut être d'un grand intérêt de connaître les conséquences physiques de la nature instable des détonations. En effet, pour une détonation instable, la pression au front peut atteindre jusqu'au double de la valeur prédite par la théorie classique de Chapman-Jouguet. C'est pour cette raison que nous avons enrichi nos méthodes, déjà très robustes en régime sous-résolu, d'information provenant de l'échelle microscopique associée à la réaction chimique. Pour ce faire, on emboîte deux méthodes numériques évoluant à deux échelles différentes : macroscopique (écoulement du gaz) et microscopique (réactions chimiques). Les méthodes de volumes finis de type central PC fournissant d'excellents résultats en maillage résolu, la façon de faire la plus naturelle est donc d'utiliser le même schéma pour les deux échelles. La compression artificielle et la modification des moyennes sont réservées à l'échelle macroscopique. Les résultats du chapitre 8 sont très concluants.

L'approche multiéchelle homogène (le même modèle est utilisé pour les deux échelles) est une façon novatrice, robuste et économique d'obtenir des résultats à long terme et à grande échelle sur le comportement d'une détonation, tout en ayant accès à de l'information provenant de la zone microscopique où la réaction chimique se produit. À notre connaissance, la seule tentative pour élaborer une méthode multiéchelle pour les équations d'Euler réactives est celle de Sun et Engquist [31]. Notre approche se démarque de la leur par le fait que la réaction chimique est résolue à toute les échelles, ce qui est, à notre avis, plus réaliste.

PERSPECTIVES

Les deux premières méthodes décrites plus haut constituent un excellent point de départ pour l'élaboration d'un solveur multi-dimensionnel pour les systèmes hyperboliques avec terme de source, en particulier pour le cas très difficile de la détonation. Nous avons montré l'efficacité de ces méthodes en une dimension spatiale, étape essentielle pour le passage aux dimensions supérieures. De plus, l'extension à deux dimensions spatiales de la modification des moyennes a été testée et son efficacité démontrée.

Malgré l'amélioration des techniques de détection de discontinuité, la méthode de compression artificielle continue de souffrir de sa qualité principale : la compression. C'est dans les cas multi-dimensionnels que ce défaut est le plus visible. L'enjeu majeur devient donc de déterminer et d'indiquer la direction dans laquelle il faut compresser. Le passage à l'ordre deux de la compression artificielle permettrait plus aisément de réaliser cet objectif. De plus, une méthode "avec mémoire", qui utilise une trace du front d'onde enregistrée périodiquement, permettrait de déterminer le sens de la propagation de façon moins dispendieuse. Les travaux d'Olivier Rouch portent sur ces deux idées et les résultats préliminaires sont très prometteurs. L'élaboration d'une méthode de compression d'ordre deux ou avec mémoire ouvrent donc la porte à plusieurs problèmes multi-dimensionnels comportant des détonations.

Les bons résultats obtenus avec la méthode multiéchelle font du passage au cas bidimensionnel la suite logique de ce travail. En deux dimensions spatiales, les ondes stables sont quasiment inexistantes, car les instabilités se propagent dans les deux directions (x et y). Dans ce cas, la nécessité d'une méthode multiéchelle fiable est encore plus évidente que dans le cas unidimensionnel. Il est cependant bien connu (voir entre autres [14]) que la largeur du domaine de discrétisation influence le comportement des instabilités. Un des enjeux majeurs du développement d'une méthode multi-dimensionnelle est donc le choix de la largeur de la fenêtre de discrétisation microscopique. Il est important de choisir les dimensions

de cette fenêtre pour refléter les dimensions du domaine macroscopique. Sans cette précaution, il est possible de créer une dynamique différente de celle qu'on observerait en raffinant tout le domaine.

INDEX

énergie d'activation, 11
équations de Broadwell, 78
équations de Navier-Stokes réactives, 33

branche de déflagration, 17
branche de détonation, 17

coefficient de diffusion numérique, 100
compatibilité, 61
compression artificielle, 99
conditions de Rankine et Hugoniot, 12
conservation, 62
convergence, 61
couche initiale, 81
courbe de Crussard, 14

déflagration de Chapman-Jouguet, 17
déflagrations, 14
dérivée numérique, 66
détecteur de discontinuité, 108
détonation de Chapman-Jouguet, 17
détonation faible, 17
détonation forte, 17
détonation instable, 152
détonation raide, 25
détonation stable, 151
détonations, 14
degré de poussée, 19
degré de poussée critique, 152

différences finies, 58
diffusion numérique, 100
discrétisation limite, 131
droite de Rayleigh, 16

flux de compression artificielle, 101
flux numérique, 59
flux numérique compatible, 62
fonction linéaire par morceaux, 62
forme conservative, 62
forme semi-discrète, 67
fraction de la masse du gaz non-brûlé, 10

instabilité, 151

largeur de capture d'une discontinuité, 99
largeur de la zone d'une demi-réaction, 25
limitation de la pente, 63
loi d'Arrhenius, 11
lois de conservation, 57
lois de conservation avec terme de source, 57
longueur caractéristique maximale, 160

méthode amont, 106
méthode directe, 70
MUSCL, 63

nombre CFL, 60
nombre de Damköhler, 12

points de Chapman-Jouguet, 17
pression de von Neumann, 26

séparation d'opérateur de Godunov, 74
séparation d'opérateur de Strang, 74
séparation d'opérateurs, 56
schéma conservatif, 62
semi-implicite, 70

simulation résolue. 1
simulation sous-résolue. 1
solution faible. 64
solution non-physique, 29, 31
stabilité numérique. 60
surcompression, 107
système hyperbolique. 57
systèmes de lois d'équilibre de relaxation, 79

température d'ignition, 11
température de von Neumann, 26
test AIC, 172
théorème d'équivalence de Lax, 61
théorie ZND, 20
TVD, 63

variation totale, 63
vitesse moyenne de propagation, 114

BIBLIOGRAPHIE

- [1] R. ABGRALL, *How to Prevent Pressure Oscillations in Multicomponent Flow Calculations : A Quasi Conservative Approach*, J. of Comput. Phys., 125(1996), pp.150-160.
- [2] G.E. ABOUSEIF ET T.Y. TOONG, *Theory of Unstable One-Dimensional Detonations*, Combustion and Flame , Vol. 45 (1982), pp. 67-94.
- [3] H. AKAIKE, *A new look at the statistical model identification*, IEEE Transactions on Automatic Control, 19 (1974), pp. 716-723.
- [4] P. ARMINJON, M.-C. VIALON ET A. MADRANE, *A Finite Volume Extension of the Lax-Friedrichs and Nessyahu-Tadmor Schemes for Conservation Laws on Unstructured Grids*, Internat. J. of Comput. Fluid Dyn., 9(1997), pp.1-22.
- [5] P. ARMINJON, A. ST-CYR ET A. MADRANE, *New 2 and 3-Dimensional Non-Oscillatory Central Finite Volume Methods for Staggered Cartesian Grids*, Applied Numerical Mathematics, Vol 40/3(2002), pp.367-390.
- [6] W. BAO ET S. JIN, *The random projection method for stiff detonation waves*, SIAM J. Sci. Comput. , Vol. 23 (2001), pp. 1000-1026.
- [7] A.C. BERKENBOSCH, *Capturing Detonation Waves for the Reactive Euler Equations*, PhD Thesis, Université de Eindhoven, Pays-Bas, 1995.
- [8] A.C. BERKENBOSCH, E.F. KAASSCHIETER ET R. KLEIN , *Detonation Capturing for Stiff Combustion Chemistry*, Combust. Theory Modelling, 2 (1998), pp.313-348.
- [9] M. BEN-ARTZI, *The Generalized Riemann Problem for Reactive Flows*, J. of Comput. Phys., 81(1989), pp.70-101.
- [10] J. FALCOVITZ ET M. BEN-ARTZI, *Recent Developments of the GRP Methods*, JSME International Journal, Series B, 38(1995), pp.497-517.

- [11] F. BIANCO, G. PUPPO ET G. RUSSO, *High-Order Central Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, SIAM J. Sci. Comput., 21(1999), pp.294-322.
- [12] A. BOURLIOUX, *Numerical Study of Unstable Detonations*, PhD Thesis, Princeton University, Princeton, N.J. 1991.
- [13] A. BOURLIOUX, A.J. MAJDA ET V. ROYTBURD, *Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations*, SIAM J. Appl. Math., 51(1991), pp.303-343.
- [14] A. BOURLIOUX ET A.J. MAJDA, *Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations*, Combust. Flame, 90(1992), pp.211-229.
- [15] D.C. BULL, J.E. ELSWORTH, P.J. SHUFF ET E. METCALFE, *Detonation Cell Structures in Fuel/Air Mixtures*, Combust. Flame, 45(1982), pp.7-22.
- [16] J.E. BROADWELL, *Shock Structure in a Simple Discrete Velocity Gas*, Phys. Fluids, 7(1964), pp.1013-1037.
- [17] R.E. CAFLISCH, S. JIN ET G. RUSSO, *Uniformly Accurate Schemes for Hyperbolic Systems with Relaxation*, SIAM J. of Numer. Anal., 34(1997), pp.246-281.
- [18] R. CHÉRET, *Chapman-Jouguet hypothesis 1899-1999 : One Century Between Myth And Reality*, Shock Waves, 9(1999), pp.295-299.
- [19] A.J. CHORIN, *Random choice methods with applications to reacting gas flows*, J. of Comput. Phys., 25(1977), pp.253-272.
- [20] P. COLELLA, *Glimm's Method for Gas Dynamics*, SIAM J. Stat. Comput., 3(1982), pp.76-110.
- [21] P. COLELLA, A. MAJDA ET V. ROYTBURD, *Theoretical and Numerical Structure for Reacting Shock Waves*, SIAM J. Stat. Comput., 7(1986), pp.1059-1080.
- [22] R. COURANT ET K.O. FRIEDRICHS, *Supersonic Flow and Shock Waves*, Springer-Verlag, New York, 1985.
- [23] R. COURANT, K.O. FRIEDRICHS ET H. LEWY, *On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics*, IBM, Journal of Research and Development, 11(1967), pp.215-234 Springer-Verlag, New York, 1985 (traduction anglaise du *Mathematische Annalen*. 1928).

- [24] R. DAUTRAY ET J.-L. LYONS, *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, Masson, Paris, 1985.
- [25] R. DEITERDING, *Two-dimensional Euler Equations With Gravity*, Technical Report NMWR-00-1, Institute of Mathematics, Technical University Cottbus, Germany (2000), pp.1-4.
- [26] P. DEUFLHARD, *Newton Methods for Nonlinear Problems*, Springer, Berlin, 2004.
- [27] W. DOERING, *On Detonation Processes in Gases*, Ann. Phys., 43(1943), pp.421-436.
- [28] W.E ET B. ENGQUIST, *The Heterogeneous Multiscale Methods*, Comm. Math. Sci., 1(2003), pp.87-132.
- [29] W.E, B. ENGQUIST ET Z. HUANG, *Heterogeneous Multiscale Method : A General Methodology for Multiscale Modeling*, Physical Review B, 67(2003), pp.092101.1-4.
- [30] B. ENGQUIST ET B. SJOGREEN, *Robust difference approximations of stiff inviscid detonation waves*, UCLA CAM report, 91-03 (1991).
- [31] Y. SUN ET B. ENGQUIST, *Heterogeneous Multi-Scale Methods for Interface Tracking of Combustion Fronts*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, 5(2006), pp. 532-563.
- [32] ERPENBECK, J.J., *Theory of Detonation Stability*, 12th Symposium on Combustion, Pittsburgh, Combustion Institute, 1969.
- [33] W. FICKETT ET W.C. DAVIS, *Detonation, Theory and Experiment*, Dover Publications, Mineola, New York, 1979.
- [34] W. FICKETT ET W. W. WOOD, *Flow Calculations for Pulsating Detonations*, Physics of Fluids, 9(1965), pp.903-916.
- [35] R. GARDNER, *On the detonation of a combustible gas*, Trans. Amer. Math. Society, 277 (1983), pp.431-468.
- [36] J. GLIMM, *Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations*, Commun. Pure. Appl. Math., 18 (1965), pp.695-715.
- [37] E. GODLEWSKI ET P.A. RAVIART, *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, Springer-Verlag, New York, 1995.

- [38] A. HARTEN, *The Artificial Compression Method for Computation of Shocks and Contact Discontinuities. III. Self-Adjusting Hybrid Schemes*, Math. Comp., 32(1978), pp.363-389.
- [39] A. HARTEN, *High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*, J. Comput. Phys., 49(1983), pp.357-393.
- [40] C. HELZEL, *Numerical Approximation of Conservation Laws with Stiff Source Term for the Modelling of Detonation Waves*, Thèse de Doctorat, Université de Magdeburg, Allemagne, 2000.
- [41] C. HELZEL, R. J. LEVEQUE ET G. WARNECKE, *A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves*, SIAM J. Sci. Comput., 22(2000), pp.1489-1510.
- [42] O.A. HURRICANE, B.H. FONG ET S.C. COWLEY, *Nonlinear Magnetohydrodynamic Detonation : Part I*, Phys. Plasma, 4(1997), pp.3565-3580.
- [43] P. HWANG, R.P. FEDKIW, B. MERRIMAN, T.D. ASLAM, A.R. KARAGOZIAN ET S.J. OSHER, *Numerical Resolution of Pulsating Detonation Waves*, Combustion Theory Modelling, 4(2000), pp.217-240.
- [44] R. JELTSCH ET P. KLINGENSTEIN, *Error Estimators for the Position of Discontinuities in Hyperbolic Conservation Laws with Source Terms Which Are Solved Using Operator Splitting*, Computing and Visualization in Science, 1(1999), pp.231-249.
- [45] S. JIN, *Runge-Kutta Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Relaxation Terms*, J. of Comput. Phys., 122(1995), pp.51-67.
- [46] J.H.S. LEE, *On the Universal Role of Turbulence in the Propagation of Deflagrations and Detonations*, IMA Volumes in Mathematics and its Applications, Computation Fluid Dynamics and Reacting Gas Flows, B.Engquist et al.Eds., Springer, New York, 1988.
- [47] H.I. LEE ET D.S. STEWART, *Calculation of Linear Detonation Instability : One-Dimensional Instability of Plane Detonation*, J. Fluid Mech., 216(1990), pp.103-132.
- [48] R.J. LEVEQUE, *Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods*, Édité par O.Steiner et A.Gautschy, Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow, Saas-Fee Advanced Course 27, Springer-Verlag, Berlin, 1998.

- [49] R.J. LEVEQUE. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics, Angleterre, 2002.
- [50] R.J. LEVEQUE ET H.C. YEE. *A Study of Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Source Term* , J. of Comput. Phys., 86(1990), pp.187-210.
- [51] R.J. LEVEQUE ET K.-M. SHYUE, *One-Dimensional Front Tracking Based on High Resolution Wave Propagation Methods* , SIAM J. Sci. Comput., 16(1995), pp.348-377.
- [52] D. LEVY, G. PUPPO ET G. RUSSO, *Central WENO Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, Math. Models and Num. Analysis, 33(1999), pp.547-571.
- [53] D. LEVY ET E. TADMOR, *Non-Oscillatory Boundary Treatment for Staggered Central Schemes*, <http://www.cscamm.umd.edu/people/faculty/tadmor/>, non-publié, 1997.
- [54] K.-A. LIE ET S. NOELLE, *On the Artificial Compression Method for Second-Order Non-Oscillatory Central Difference Schemes for Systems of Conservation Laws*, SIAM J. of Sci. Comput., Vol.24(2002) , pp.1157-1174.
- [55] S.F. LIOTTA, V. ROMANO ET G.RUSSO, *Central Schemes for Balance Laws of Relaxation Type* , SIAM J. Numer. Anal., 38(2000), pp.1337-1356.
- [56] T. P. LIU, *Hyperbolic Conservation Laws with Relaxation*, Comm. Math. Phys., 108(1987), pp.153-175.
- [57] A. MAJDA, *A qualitative model for dynamic combustion*, SIAM J. Appl. Math., 41(1981), pp.70-93.
- [58] EWALD MÜLLER, *Simulation of Astrophysical Fluid Flow*.Édité par O.Steiner et A.Gautschy, Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow, Saas-Fee Advanced Course 27, Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [59] H. NESSYAHU ET E. TADMOR, *Nonoscillatory Central Differencing for Hyperbolic Conservation Laws* , J. of Comput. Phys., 87(1990), pp.408-463.
- [60] E.S. ORAN ET J.P. BORIS, *Numerical Simulation of Reactive Flows* , Cambridge University Press, Angletere, 1987.

- [61] L. PARESCHI, *Central Differencing Based Numerical Schemes for Hyperbolic Conservation Laws with Relaxation Terms*, SIAM J. Numer. Anal., 39(2001), pp.1395-1417.
- [62] L. PARESCHI, G. PUPPO ET G. RUSSO, *Central Runge-Kutta Schemes for Conservation Laws*, SIAM J. Sci. Comp., 26 (2005), pp.979-999.
- [63] R.B. PEMBER, *Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Relaxation I : Spurious Solutions*, SIAM J. Appl. Math., 53(1993), pp.1293-1330.
- [64] R.B. PEMBER, *Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Relaxation I : Higher-Order Godunov Methods*, SIAM J. Sci. Comput., 14(1993), pp.824-859.
- [65] J.M. POWERS, *Review of Multiscale Modeling of Detonation*, J. of Propulsion and Power, 2006, à paraître.
- [66] R. ROSALES ET A. MAJDA, *Weakly Nonlinear Detonation Waves*, SIAM J. Appl. Math., 43(1983), pp.1086-1118.
- [67] R.D. RYCHTMYER ET K.W. MORTON, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, Wiley-Interscience, 1967.
- [68] O. ROUCH, *Méthodes de compression artificielle*, Thèse de Doctorat, Université de Montréal, à paraître.
- [69] O. ROUCH, M.-O. ST-HILAIRE ET P. ARMINJON, *Toward an Improved Capture of Stiff Detonation Waves*, Proceedings of the 11th International Conference on Hyperbolic Problems, Lyon, September 2006.
- [70] O. ROUCH ET P. ARMINJON, *Scheme Independent Artificial Compression Method in 1-D, structured 2-D and unstructured 2-D*, à paraître.
- [71] V. ROYTBURD, *On Detonation Instability*, Edited by M. Onofri and A. Tessei, Fluid Dynamical Aspects of Combustion Theory, Longman Scientific and Technical, Vol. 223 (1991), pp.184-195.
- [72] G. RUSSO, *Central Schemes and Systems of Balance Laws*, in *Hyperbolic Partial Differential Equations, Theory, Numerics and Applications*, edited by A. Meister and I. Struckmeier, Vieweg, Wiesbaden (D), 2002.
- [73] M. SÉGUIN ET B. VILLENEUVE, *Astronomie et Astrophysique*, ERPI, Saint-Laurent, 1995.

- [74] G.J. SHARPE ET S. FALLE, *Numerical simulations of pulsating detonations : I. Nonlinear stability of steady detonations*, Combust. Theory Modelling, 4(2000), pp.557-574.
- [75] J. SMOLLER, *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [76] B. SPORTISSE, *An Analysis of Operator Splitting Techniques in the Stiff Cases*, J. Comput. Phys., 14(1974), pp.361-370.
- [77] G. SOD, *Numerical Methods in Fluids Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [78] G. STRANG, *On the Construction and Comparison of Difference Schemes*, SIAM J. Num. Anal., 5, 506(1968), pp.1293-1330.
- [79] J. THOUVENIN, *Détonique*, Séries Synthèses, Eyrolles, Paris, 1997.
- [80] B. VAN LEER, *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme I. The Quest of Monotonicity*, Springer Lecture Notes Phys., 18(1973), pp.163-168.
- [81] B. VAN LEER, *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme*, J. Comput. Phys., 14(1974), pp.361-370.
- [82] B. VAN LEER, *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme III. Upstream-Centered Finite-Difference Schemes for Ideal Compressible Flow*, J. Comput. Phys., 23(1977), pp.263-275.
- [83] B. VAN LEER, *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme IV. A New Approach to Numerical Convection*, J. Comput. Phys., 23(1977), pp.276-299.
- [84] B. VAN LEER, *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme V. A Second Order Sequel to Godunov's Method*, J. Comput. Phys., 32(1979), pp.101-136.
- [85] J. VON NEUMANN, *Theory of Detonation Waves*, John von Neumann, *Collected Works*, Vol. 6, éditions A. J. Taub New York, Macmillan, 1942.
- [86] G. B. WHITHAM, *Linear and Nonlinear Waves*, Wiley, New York, 1974.
- [87] YA. B. ZELDOVICH, *On the Theory of the Propagation of Detonation in Gaseous Systems*, Zh. Eksp. Teor. Fiz., 10(1940), pp.542-568 (traduction anglaise : NACA TM 1261(1960)).