MÉTHODES DE VOLUMES FINIS POUR L'AÉROTHERMOCHIMIE

B. Courbet

Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales (ONERA)

Méthodes numériques pour les fluides

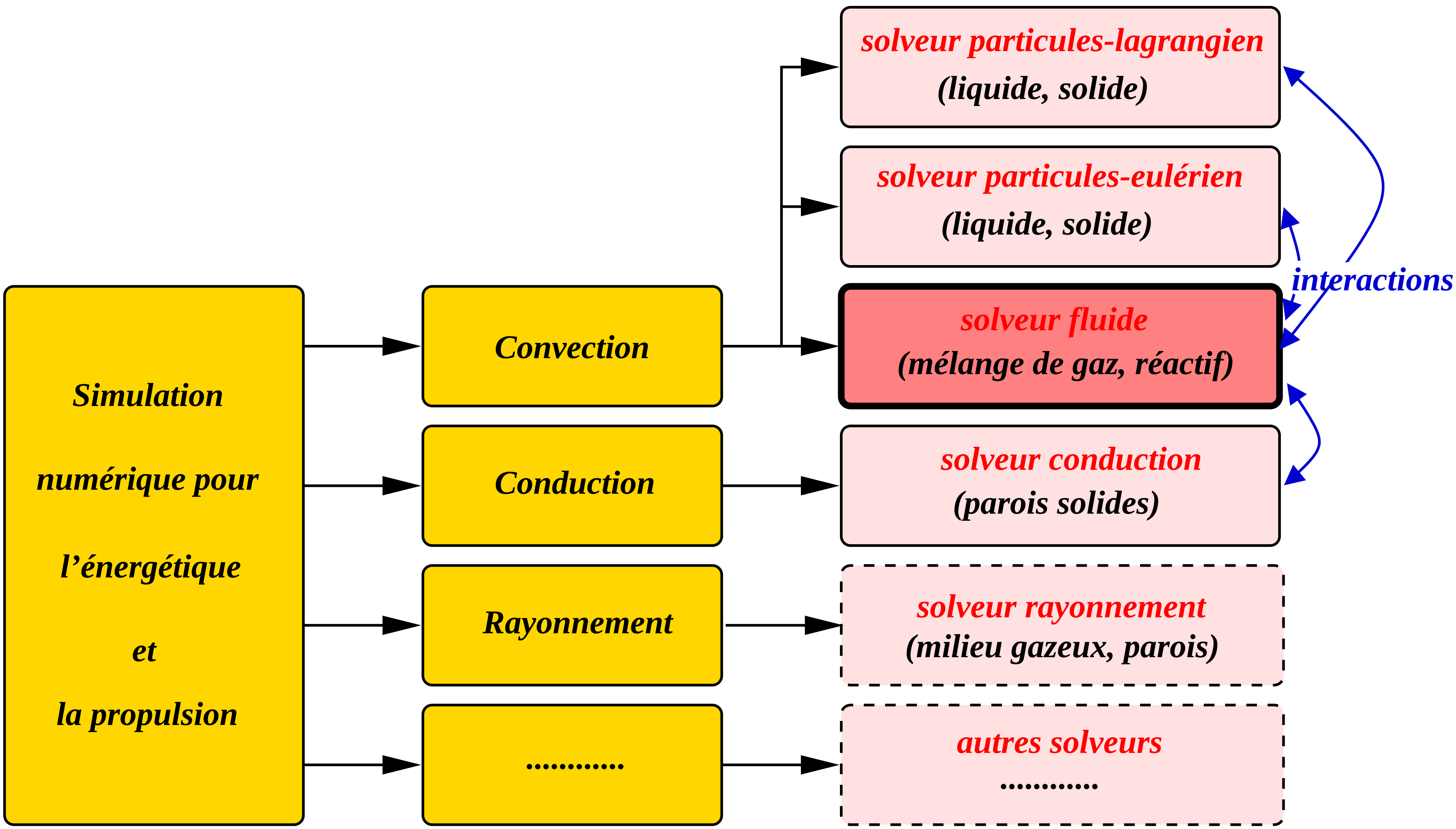
MoMas, 19 décembre 2005, Paris

Plan

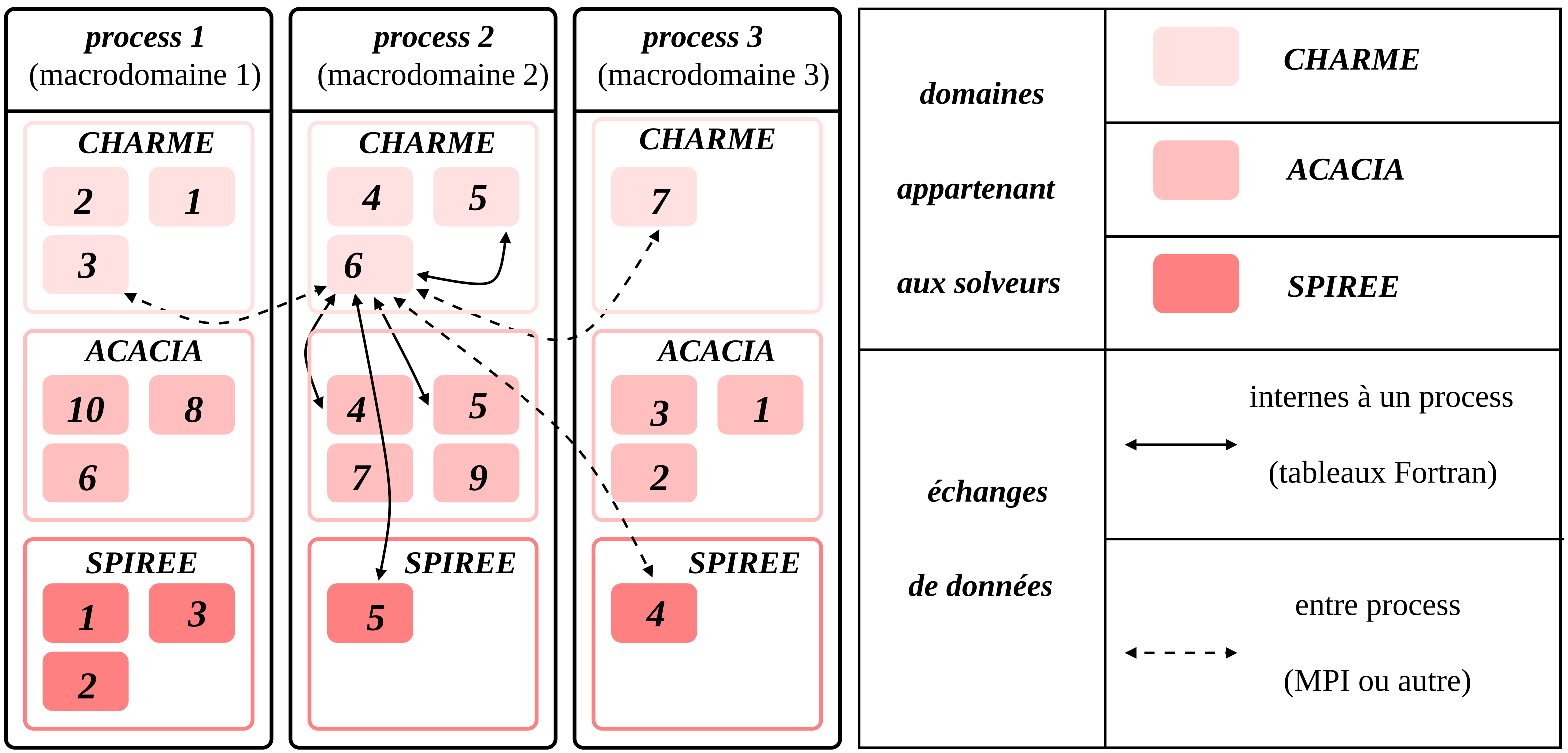
1. Contexte logiciel : le code CEDRE
2. Modèles physiques pour le gaz
3. Modèle géométrique : le maillage polyédrique général
4. Discrétisation spatiale
5. Intégration temporelle
6. Besoins pour l'avenir

Quelques exemples de simulations numériques

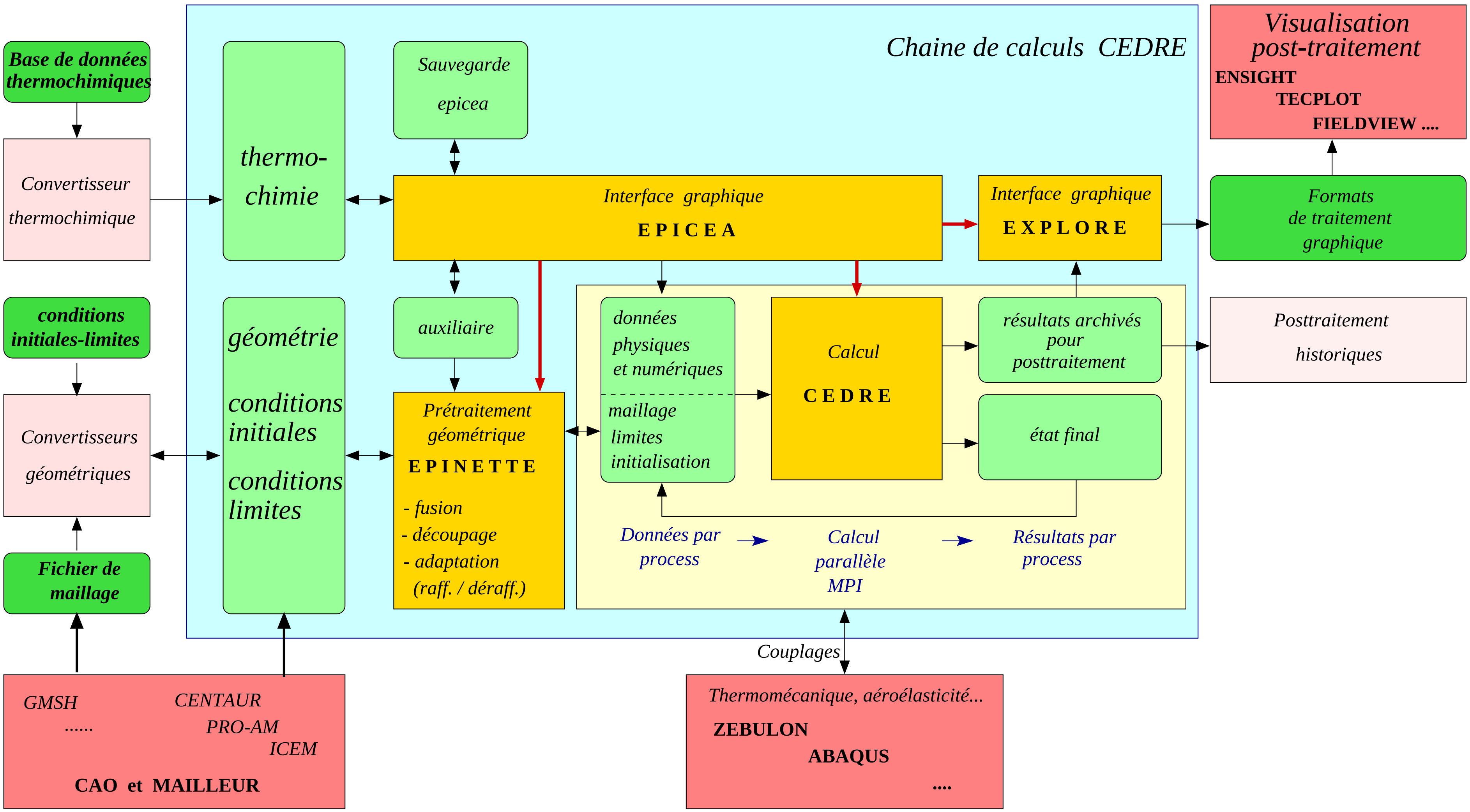
1. Contexte logiciel : énergétique numérique (industrie et recherche)



1. Contexte logiciel : décomposition en domaines et calcul parallèle



idom = 1, 2, ... = numéro absolu de domaine pour chaque solveur



Chaine de calculs CEDRE
Base de données thermochimiques
Convertisseur thermochimique
thermo-chimie
Sauvegarde epicea
Interface graphique EPICEA
Interface graphique EXPLORE
Visualisation post-traitement
ENSIGHT
TECPLOT
FIELDVIEW ....
Formats de traitement graphique
conditions initiales-limites
Convertisseurs géométriques
géométrie
conditions initiales
conditions limites
auxiliaire
Prétraitement géométrique
EPINETTE
- fusion
- découpage
- adaptation
(raff. / déraff.)
données physiques et numériques
maillage
limites
initialisation
Calcul
CEDRE
résultats archivés pour posttraitement
état final
Posttraitement historiques
Données par process
Calcul parallèle MPI
Résultats par process
Fichier de maillage
Couplages
GMSH
......
CENTAUR
PRO-AM
ICEM
CAO et MAILLEUR
Thermomécanique, aéroélasticité...
ZEBULON
ABAQUS
....

2. Conditions physiques pour les applications visées

- Importance des transferts d'énergie
- Stationnaire ou instationnaire (turbulent LES, acoustique...)
- Géométries complexes $L_{max}/L_{min} >> 1$...
- Anisotropie (couches limites ou de mélange, jets...)
- $0 \leq M < \infty$: du quasi-incompressible à l'hypersonique
- $0 \leq Re < \infty$: parfois laminaire/transitionnel, généralement turbulent
- Multiespèces, réactions chimiques
- Sources nombreuses et souvent fortes : interactions avec les autres milieux, gravité, rotation
- Nombreux modèles spécifiques
- Conditions aux limites variées souvent hétérogènes-instationnaires

ONERA

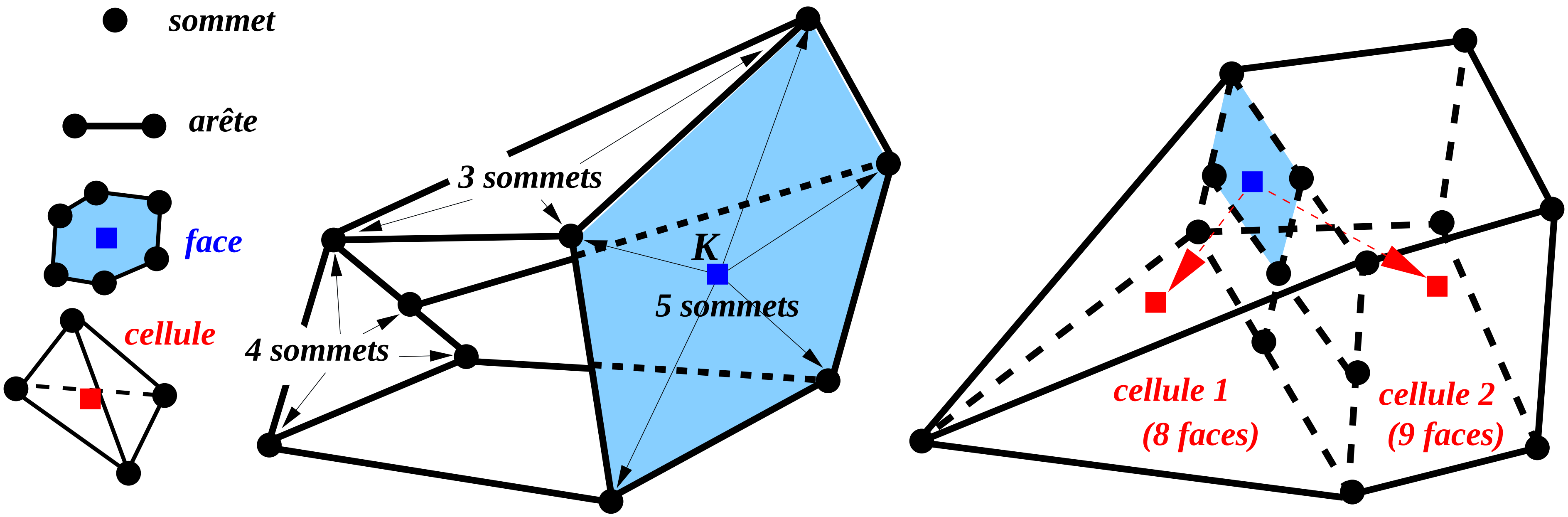
2. Modèles physiques actuels pour le milieu fluide

- Mélange de gaz parfaits (C_{pj}, μ_j ... fonction de T)
- Turbulence, approche RANS :
  2 équations ($k-\varepsilon$, $k-l$), 4 équations $k-\varepsilon-k_\theta-\varepsilon_\theta$
  Corrections à bas Reynolds, fonctions de paroi, option ASM
- Turbulence, approche LES : MILES, Smagorinsky
- Sources : forces de volume(gravité, inertie), sources utilisateur,
  interactions entre sous-systèmes
  réactions chimiques (Arrhenius, EBU, CLE, CRAMER, EDCWC)
- Limites : (uniformes/hétérogènes, stationnaires/instationnaires)
  $\rightarrow$ entrées-sorties avec options diverses (swirl, équilibre radial...)
  $\rightarrow$ symétrie, axe, glissement
  $\rightarrow$ multidomaine, périodicité spatiale ordinaire et généralisée
  $\rightarrow$ parois (diverses conditions thermiques)

2. Modèles physiques pour le milieu fluide

$$
\underbrace{q = \left[\begin{array}{c} \rho_1 \\ \dots \\ \rho_{nesp} \\ \hline \rho v_1 \\ \rho v_2 \\ \rho v_3 \\ \hline \rho e_t \\ \hline \rho z_1 \\ \dots \\ \rho z_{nsca} \end{array}\right]}_{\text{Quantités conservées}}
\leftrightarrow
\underbrace{u = \left[\begin{array}{c} p \\ \hline T \\ \hline y_1 \\ \dots \\ y_{nesp} \\ \hline v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \hline z_1 \\ \dots \\ z_{nsca} \end{array}\right]}_{\text{Variables ''naturelles''}}
=
\left[\begin{array}{l} \text{Pression, température, composition :} \\ \bullet \text{ Mélange de gaz parfaits} \\ \text{à chaleurs massiques fonction de } T \\ \bullet \text{ ... ou mélange de gaz réels} \\ \text{divers modèles (en cours)} \\ \hline \\ \text{Vitesse} \\ \\ \hline \text{Scalaires} \\ \bullet \text{ passifs} \\ \bullet \text{ turbulents RANS} \end{array}\right]
$$

3. Modèle géométrique : le maillage polyédrique général

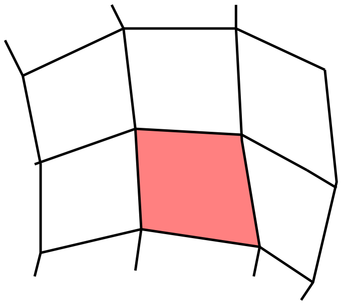


- chaque face a un nombre quelconque de sommets

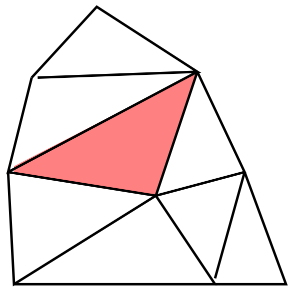
- une cellule polyédrique générale a

un nombre quelconque de faces, mais *... une interface relie toujours 2 cellules exactement*

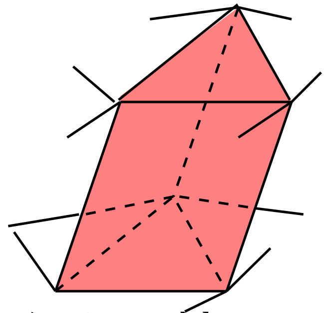
3. Modèle géométrique : exemples de maillages



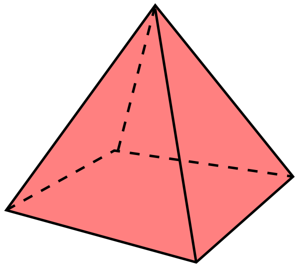
a) quadrangles (2D)
hexaèdres (3D)



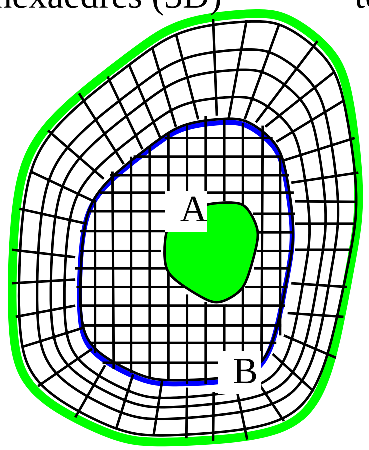
b) triangles (2D)
tetraèdres (3D)



c) prismes à base
triangulaire

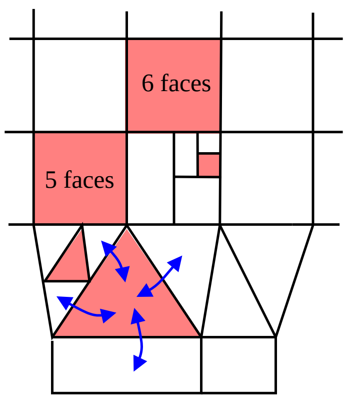


d) pyramides

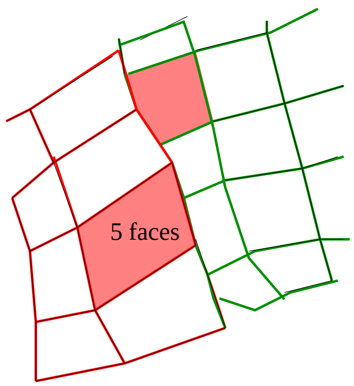


e-A) maillages cartésiens
adaptés aux frontières

e-B) intersections de maillages



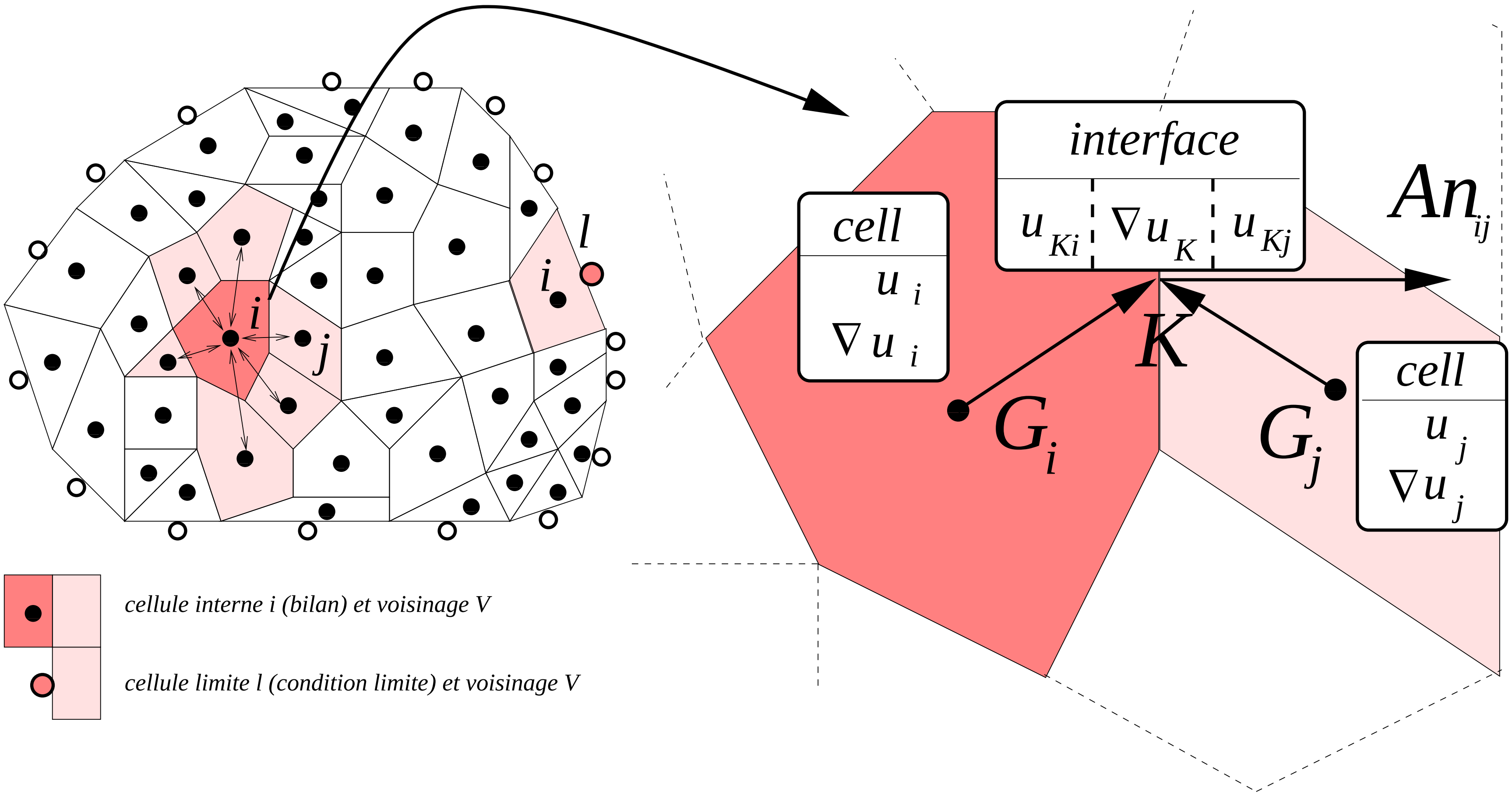
f) adaptation
de maillage



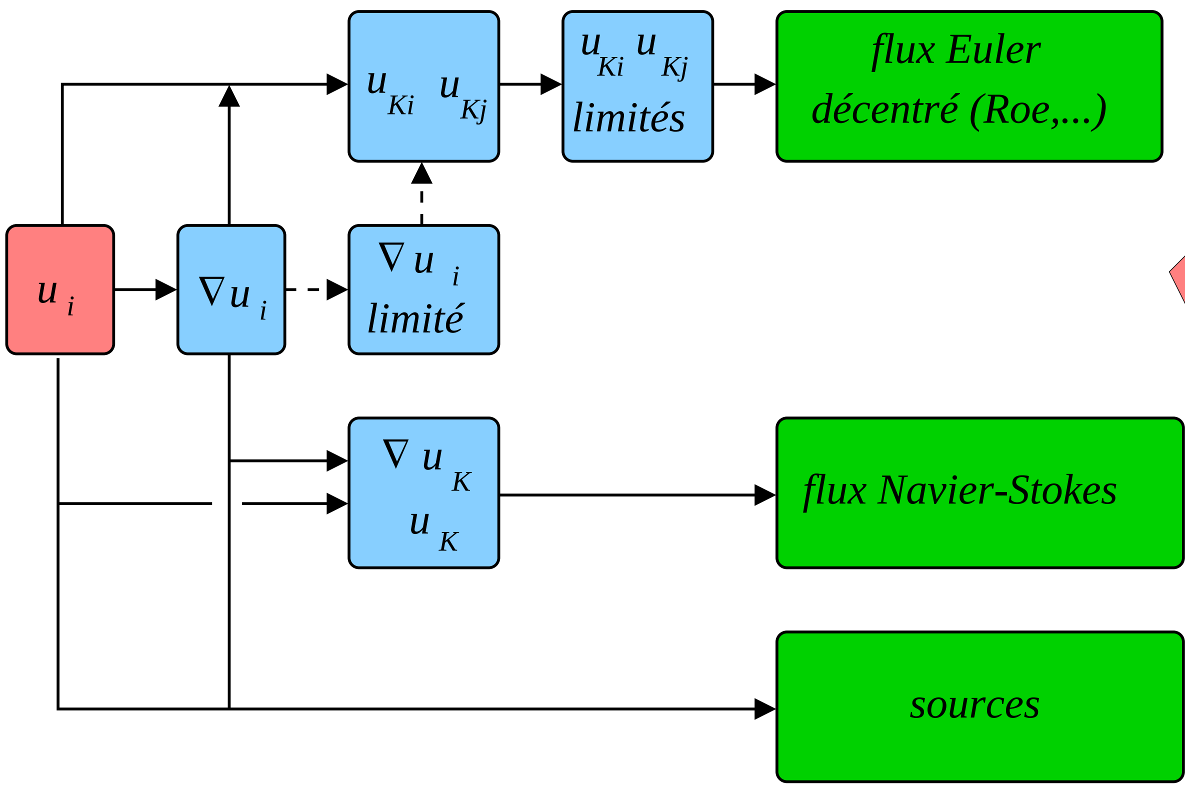
g) maillages conformes généraux

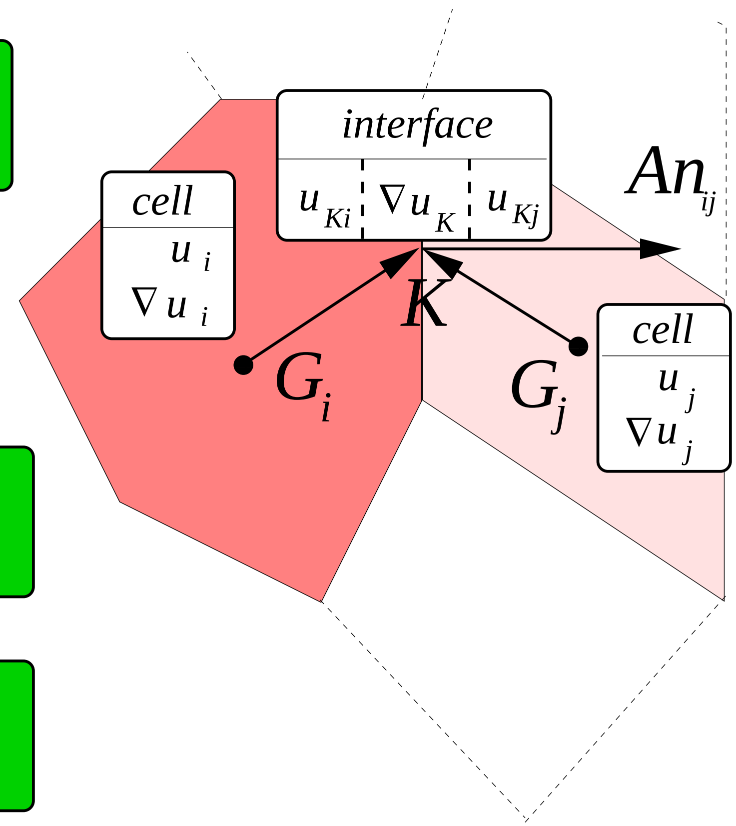
pour multidomaine

4. Discrétisation spatiale ; approche MUSCL généralisée

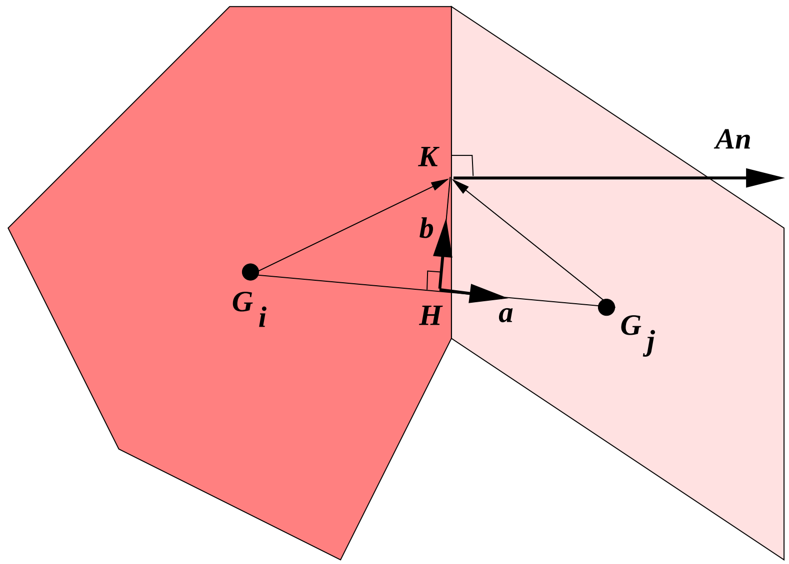


4. Discrétisation spatiale ; approche MUSCL généralisée





4. Discrétisation spatiale ; géométrie du système face-cellules



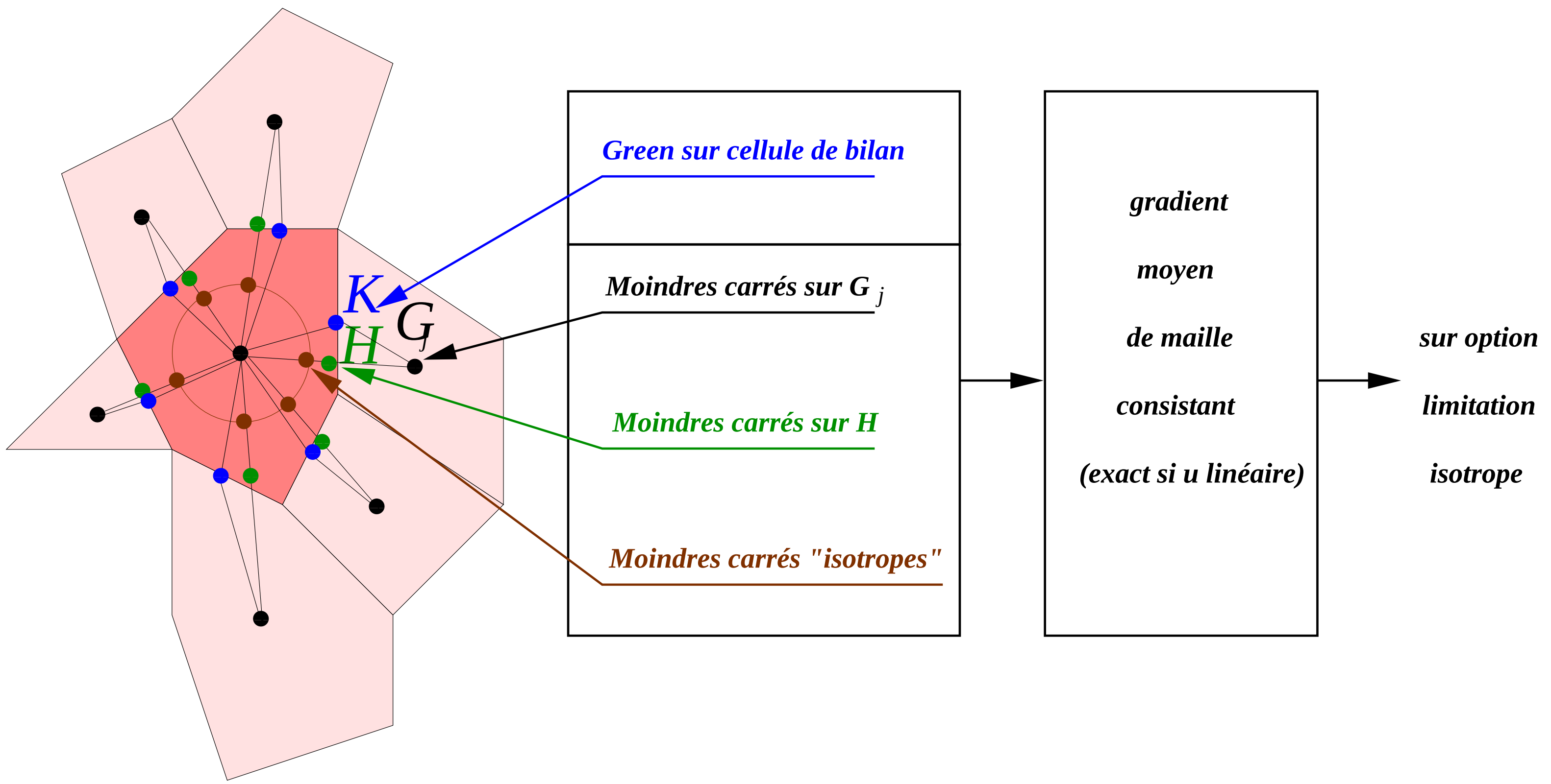
- Centre de maille $G_i = \dfrac{1}{V_i}\displaystyle\int_{V_i} r dA$
- Centre de face $K = \dfrac{1}{A}\displaystyle\int_{A} r dA$

$\rightarrow$

Difficultés :

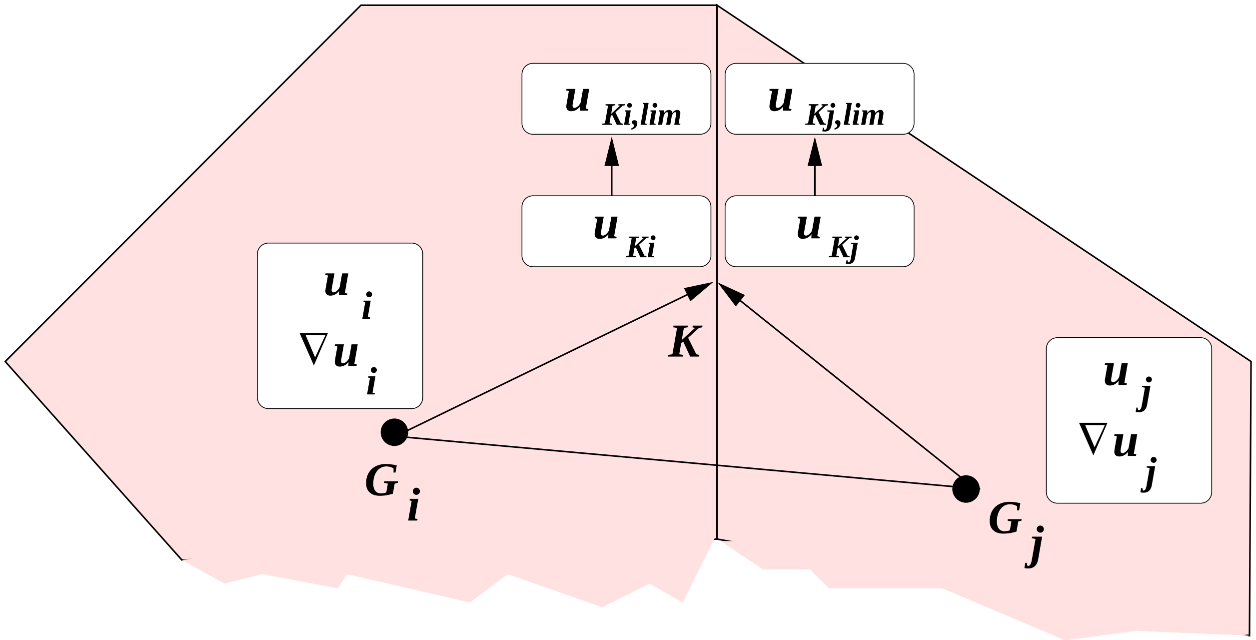
- non-orthogonalité $a \cdot n \neq 1$
- courbure $HK \neq 0$
- hétérogénéité $\dfrac{G_iK}{G_jK} \neq 1$
- face non plane

4. Discrétisation spatiale : gradients moyens de mailles



$$M_i\nabla u_i = L_V(u_i,u_j,\ldots)\left\{\begin{array}{l}\bullet\ \text{Green : } M_i = V_i I + courbure + \ldots \text{ Non symétrique}\\ \bullet\ \text{Moindres carrés : } M_i \text{ symétrique}\end{array}\right.$$

4. Discrétisation spatiale : valeurs d'interface à gauche et à droite



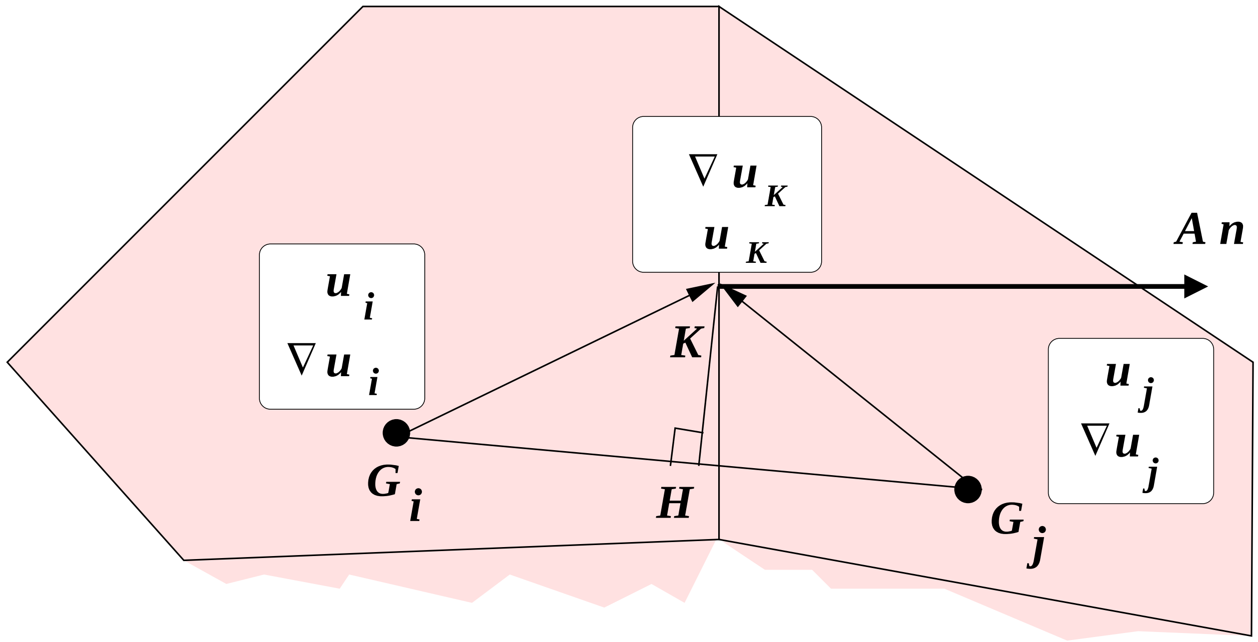
– Interpolation linéaire par cellule

$u_{Ki} = u_i + \nabla u_i \cdot G_i K$ et $u_{Kj} = u_j + \nabla u_j \cdot G_j K$

– Limitations (Van Leer, ATVL...)

$u_{Ki,lim} = u_{Ki,lim}(u_{Ki}, u_{Kj}, u_i, u_j)$ et $u_{Kj,lim} = u_{Kj,lim}(u_{Ki}, u_{Kj}, u_i, u_j)$

4. Discrétisation spatiale : gradients d'interfaces



$$\nabla u_H = \frac{HG_j}{G_iG_j}\nabla u_i + \frac{HG_i}{G_iG_j}\nabla u_j \quad \rightarrow \quad \nabla u_K = \nabla u_H + \theta\left[\frac{u_j - u_i}{G_iG_j \cdot n} - \nabla u_H \cdot n\right] n$$

4. Discrétisation spatiale, bilans pour les cellules internes

Quantités conservées $q = q(u) \leftrightarrow$ variables naturelles $u = u(q)$

$$\dot{\overline{V_i q_i}} = -\sum_{j \in V} \underbrace{A_{ij} f_{n,i\rightarrow j}}_{Euler} - \sum_{j \in V} \underbrace{A_{ij} \varphi_{n,i\rightarrow j}}_{Navier-Stokes} + \underbrace{V_i \sigma_i}_{sources}$$

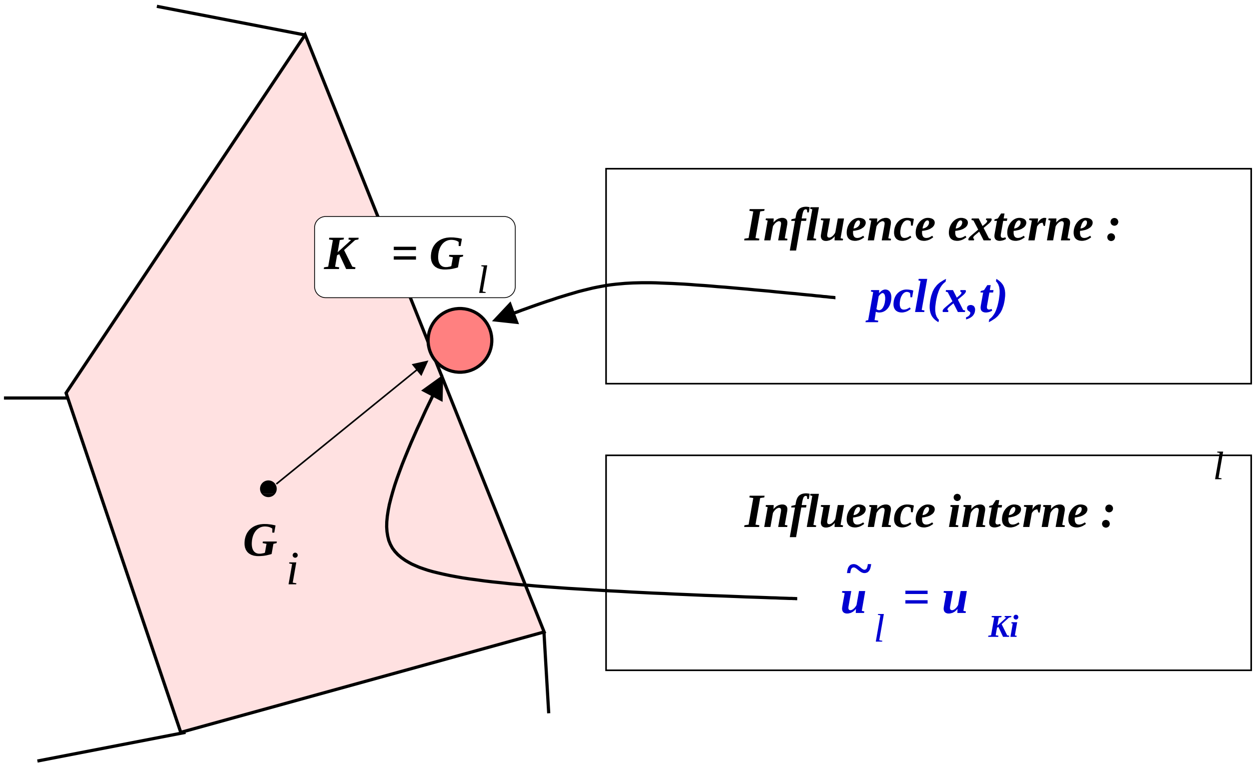
– Flux Euler décentré

$$f_{n,i\rightarrow j} = f_n(u_{Ki,lim}, u_{Kj,lim}) \begin{cases} \text{Roe et famille ODF...} \\ \text{Bas Mach type Turkel} \\ \text{AUSM...} \end{cases}$$

– Flux Navier-stokes $\varphi_{n,i\rightarrow j} = \varphi_n(u_K, \nabla u_K)$

– Sources $\sigma_i = \sigma_i(u_i, \nabla u_i)$

4. Discrétisation spatiale, conditions aux limites



- Conditions aux limites : $T_{\alpha,l}\ \dot{q}_l = L_\alpha(u_l, \tilde{u}_l, pcl(x_l, t), \ldots)$
- Eventuellement, flux numérique particulier (paroi,...)

4. Intégration temporelle, notations

Système global d'ODE sur l'ensemble des variables internes et limites :

$$Q = \begin{bmatrix} q_1 \\ \dots \\ q_i \\ \dots \\ \hline \dots \\ q_l \\ \dots \end{bmatrix} \quad \leftrightarrow \quad U = \begin{bmatrix} u_1 \\ \dots \\ u_i \\ \dots \\ \hline \dots \\ u_l \\ \dots \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \underbrace{M\dot{Q} = F(U, PCL(t))}_{\text{Bilans + CL}}$$

Sur option, la matrice de masse M inclut une procédure d'inflation analogue à un pas de temps local :

- sur CFL
- adaptatif (capteurs sur $\dot{U}$) $\rightarrow$ robustesse au démarrage

4. Intégration temporelle, méthodes

– Explicite : Runge-Kutta (2 approximations ...)

– Implicite :

• Euler implicite (pour solutions stationnaires asymptotiques)

• "Runge-Kutta" (pour instationnaire : bas Mach,...)

Itérations GMRES à chaque étape implicite du schéma temporel (typiquement $numax \sim 10-20$)

$do \;\; n = 1, \;\; nmax$

$\quad \ldots$

$\quad do \;\; nu = 1, \;\; numax$

$\quad\quad \ldots$

$\quad end \;\; do$

itérations "internes"

$\quad \ldots$

$end \;\; do$

progression en temps

5. Conclusion : quelques besoins identifiés

– Interpolation : des schémas plus robustes et plus précis

  • Meilleure évaluation des gradients (cadre MUSCL ou GD)

  • Prise en compte des gradients le long des faces
  dans le calcul des flux numériques

  • Montée en ordre effective sur un maillage général?

– Flux numériques : des schémas plus universels :

  • Bas Mach (erreurs numériques de type acoustique)

  • Hypersonique (carbuncle sur chocs forts)

  • Fluides réels?