
Schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Le contexte général de ce sujet de thèse est l'extension du domaine d'application du logiciel de simulation d'incendies ISIS (<https://gforge.irsnn.fr/gf/project/isis>) à l'explosion. Plus particulièrement, nous poursuivons l'extension des schémas numériques de cet outil de calcul au traitement des écoulements compressibles, pour des régimes de nombre de Reynolds très élevés (ou, de manière équivalente, à très faible viscosité), notre objectif étant ici d'obtenir une approximation précise des solutions présentant des chocs (*i.e.* une représentation fiable des ondes de chocs générées par une explosion).

Les systèmes d'équations que nous étudions dans cette thèse sont, dans l'ordre de complexité croissante, les systèmes hyperboliques suivants :

- Les équations d'Euler barotrope : bilan de masse et de quantité de mouvement, loi d'état donnant la pression en fonction de la masse volumique,
- Les équations d'Euler : bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, loi d'état reliant pression, masse volumique et énergie,
- Les équations d'Euler réactif : bilan de masse du mélange et des espèces chimiques, de quantité de mouvement et d'énergie, loi d'état reliant pression, masse volumique, concentration des espèces et énergie.

Les modèles physiques d'intérêt pour les applications industrielles que nous visons ici sont les deux derniers, à savoir le deuxième si l'on souhaite estimer les chargements en pression engendrés par une réaction chimique (explosion) que l'on postule, et le troisième si l'on souhaite calculer cette dernière. Le premier système ne sera utilisé que comme problème modèle ; à noter toutefois qu'il inclut, comme cas particulier, les équations de Saint-Venant (modèle asymptotique régissant les écoulements d'hauteur faible devant les autres dimensions), utilisées notamment pour les calculs de dispersion de polluants en rivières ou estuaires.

Les travaux sur ce thème ont débuté à l'IRSN en 2004 [1], et se sont poursuivis depuis, notamment dans le cadre de deux thèses [2,3] ; ils ont fait l'objet à ce jour d'une dizaine de publications, parues ou soumises dans des revues à comité de lecture (cf. [5] pour une synthèse). Schématiquement, l'état des travaux est le suivant :

- Une classe de schéma a été développée pour les équations d'Euler, barotrope ou non, et l'extension au réactif est en cours.
- La discrétisation spatiale est à mailles décalées, et s'appuie sur des maillages non structurés ; les termes convectifs sont approchés par une technique dite de « décentrement amont », par rapport à la vitesse matérielle (par opposition à « vitesse des ondes », qui est utilisée dans la plupart des algorithmes de résolution des systèmes hyperboliques).
- Deux algorithmes en temps sont opérationnels : le premier est purement explicite, le second met en œuvre une technique de correction de pression.
- Sur le plan théorique, nous avons montré que les schémas de correction de pression sont inconditionnellement stables, et, *a minima* en une dimension d'espace, consistants, dans le sens où, s'ils convergent, c'est nécessairement vers une solution « correcte » du problème continu (solution faible dans le cas général, solutions faibles entropiques dans le cas barotrope). En outre, sur des problèmes modèles stationnaires barotropes, en présence de diffusion, nous avons obtenu des résultats de convergence proprement dite.

L'étude théorique des schémas explicites est en cours, pour les deux premiers systèmes mentionnés ci-dessus. En ce qui concerne l'extension au cas réactif, elle n'a débuté pour aucune des marches en temps, à la nuance près que les travaux que nous avons menés sur le cas barotrope diphasique [1] peuvent être vus comme une première étape en ce sens (il s'agit en effet d'un modèle qui présente la même structure

PROPOSITION DE THESE

qu'un modèle réactif barotrope, à savoir qu'il couple bilan de masse global, d'espèces et de quantité de mouvement, avec une loi d'état reliant pression, masse volumique et concentrations).

L'objet de cette thèse est d'étendre ces schémas au second ordre en espace, en s'appuyant sur des reconstructions affines des inconnues, ce pour deux raisons essentielles :

- Le gain en précision attendu est extrêmement important : schématiquement parlant, il permet usuellement d'obtenir avec des maillages relativement grossiers une qualité de solution hors d'atteinte des discrétisations décentrées du premier ordre, même en faisant appel au calcul parallèle.
- Par ailleurs, il est observé qu'une discrétisation au premier ordre (plus précisément, qu'une reconstruction des inconnues par des fonctions constantes par mailles) conduit, pour des pas de temps usuels, à des résultats faux en présence d'un terme de chimie « raide » (*i.e.* lorsque le temps caractéristique des réactions chimiques est faible devant celui de l'hydrodynamique, sur la base duquel est estimé le pas de temps).

L'implémentation d'une technique de ce type (schéma MUSCL général développé récemment [4]) est en cours, dans le cadre d'un travail de recherche mené à l'Université de Provence, pour les équations d'Euler barotrope traitées par le schéma explicite. Il s'agira de poursuivre cette action dans deux directions :

- Extension aux autres modèles d'intérêt, et, notamment, en traitant les difficultés supplémentaires issues de la présence d'un terme de réaction raide,
- Extension aux schémas de correction de pression, sans doute par une technique itérative dite « de correction de défaut » (méthode de type Gauss-Seidel, laissant au membre de gauche le schéma décentré du premier ordre et faisant apparaître au membre de droite la différence entre cette discrétisation et une discrétisation d'ordre deux).

Ces travaux seront confortés par une analyse théorique.

La thèse débutera par un effort d'appropriation de la bibliographie qui, compte-tenu de la complexité du sujet, sera nécessairement important (au moins 6 mois) ; le doctorant pourra le mener en parallèle avec les premiers travaux d'implémentation, par exemple sur l'implémentation du schéma MUSCL dans les algorithmes explicites, qui est relativement simple. Ensuite seront abordés les schémas semi-implicites et les aspects plus théoriques.

Les implémentations seront réalisées dans l'environnement PELICANS (plate-forme de composants logiciels et environnement de programmation objet, écrite en C++), la plupart du temps au sein du logiciel ISIS. L'encadrement sera réalisé par l'Université de Marseille, acteur important de la recherche sur les problèmes hyperboliques, et qui travaille en outre, avec l'IRSN, sur les schémas qui font l'objet de cette thèse depuis le début de leur développement (2004).

[1] *L. Gastaldo*, Méthodes de correction de pression pour les écoulements compressibles : application aux équation de Navier-Stokes barotropes et au modèle de dérive, manuscrit de thèse, 2007.

[2] *W. Kheriji*, Méthodes de corrections de pression pour les équations de Navier-Stokes compressible, manuscrit de thèse, 2011.

[3] *T.T. Nguyen*, Schémas à mailles décalées pour les équations d'Euler, thèse en cours (2009-2012).

[4] *L. Piar, F. Babik, R. Herbin, J.C. Latché*, A second order cell-centered scheme for convection-diffusion equations on unstructured non-conforming grids, submitted.

[5] *R. Herbin, W. Kheriji, J.C. Latché*, Staggered schemes for all speed flows, submitted.

Contacts : Raphaèle Herbin (herbin@cmi.univ-mrs.fr), Laura Gastaldo (laura.gastaldo@irsn.fr).