

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI

THÈSE PRÉSENTÉE À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI
COMME EXIGENCE PARTIELLE
AU DOCTORAT EN INGÉNIERIE

PAR
SÉBASTIEN PERRON

RÉSOLUTION NUMÉRIQUE
D'ÉCOULEMENTS 3 DIMENSIONS
AVEC UNE NOUVELLE MÉTHODE DE VOLUMES FINIS
POUR MAILLAGES NON STRUCTURÉS

15 Novembre 2001



Mise en garde/Advice

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

Résumé

L'objectif de cette thèse de doctorat est de développer un nouveau schéma numérique de résolution des équations 3D de Navier-Stokes. Les écoulements considérés sont incompressibles et les propriétés physiques telle la viscosité peuvent être variables. De plus, des quantités scalaires telle l'enthalpie ou une fraction volumique peuvent être transportées par l'écoulement. Ce schéma est basé sur une discrétisation spatiale de type volumes finis classique (une seule inconnue par volume de contrôle) qui permet l'utilisation de maillages non structurés. Les équations du modèle mathématique sont découplées et une méthode de projection de type pas de temps fractionnaire est utilisée pour calculer un champ de vitesse satisfaisant l'équation de conservation de la masse. La pression et la vitesse sont couplées à l'aide d'une ré-interpolation de la vitesse sur les faces des volumes de contrôle, l'utilisation d'un maillage décalé ("staggered grid") n'est donc pas nécessaire.

On présente une revue détaillée du modèle mathématique décrivant les écoulements thermiques et le modèle de turbulence $k - \epsilon$ de Launder et Spalding. De plus, on fait un rappel de quelques algorithmes de résolution numérique des systèmes d'équations linéaires et des concepts fondamentaux qui leur sont associés.

On discute d'une librairie d'objets et de programmes utilitaires qui ont été développés pour encourager l'utilisation et le développement du schéma par d'autres chercheurs.

Des résultats numériques obtenus avec le schéma sont présentés : écoulement entre deux plans parallèles, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi, écoulement de Boussinesq dans une cavité carrée, écoulement turbulent au-dessus d'une marche, écoulements autour d'un disque et d'un cylindre et écoulement thermique dans une conduite cylindrique.

Remerciements

Je tiens à remercier M. Sylvain Boivin, mon directeur, pour m'avoir si bien dirigé. De plus, sa patience et son aide lors de mes démarches pour l'obtention d'un emploi ont été grandement appréciées.

Je remercie également M. Guy Simard du G.R.I.P.S pour ses précieux conseils et de m'avoir donné la chance d'établir mes premiers contacts avec l'industrie.

Je tiens aussi à souligner l'aide que m'a apporté M. Jean-Marc Hérard d'Électricité de France dans mon travail de recherche.

Finalement, je remercie M. Vinko Potocnik du CRDA pour m'avoir fait confiance et ainsi permis d'acquérir de l'expérience avec l'industrie privée.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	ii
Nomenclature	ix
Introduction	1
1 Modèle mathématique, écoulement laminaire	11
1.1 Notions fondamentales	11
1.2 Conservation de la masse	14
1.3 Conservation de la quantité de mouvement	16
1.4 Équation de conservation de l'énergie	22
1.5 Modèle complet	25
1.6 Nombres sans dimension	26
2 Modèle mathématique, écoulement turbulent	31
2.1 Modélisation de la turbulence	32
3 Définitions et résultats essentiels sur les méthodes de volumes finis classiques	41
3.1 Discrétisation temporelle	44
3.2 Discrétisation spatiale	45
3.3 Résolution de l'équation de conservation de la masse, méthodes de projection	56

4	Une nouvelle méthode de volumes finis pour des maillages non structurés	62
4.1	Discrétisation temporelle	63
4.2	Discrétisation spatiale	64
4.3	Approximation discrète sur les interfaces	68
4.4	Calcul des flux d'interface	69
4.5	Opérateur d'approximation du gradient $Grad(\phi)$	70
4.6	Équations discrètes, opérateur de convection-diffusion $CD(\dots)$	72
4.7	Projection	73
4.8	Discrétisation des lois de paroi pour les écoulements turbulents	76
4.9	Algorithme de résolution	80
4.10	Remarques et résultats théoriques	80
5	Résolution numérique des systèmes d'équations linéaires	83
5.1	Caractérisation de la matrice des coefficients et détermination des valeurs propres	84
5.2	Méthodes directes de résolution des équations linéaires	87
5.3	Méthodes itératives de résolution numérique des systèmes d'équations linéaires	92
5.4	Conditionnement	97
5.5	Résultats comparatifs et choix de l'algorithme de résolution	102
6	Mise-en-oeuvre	105
6.1	Langage de programmation et programmation orientée objet	105
6.2	Description des objets et de la librairie	106
6.3	Programmes pour le pré et le post-traitement	116
6.4	Installation et disponibilité	117
7	Résultats numériques	118
7.1	Écoulement entre deux plans parallèles	119
7.2	Écoulement engendré par le déplacement d'une paroi	122
7.3	Convection naturelle dans une cavité carrée	127
7.4	Écoulement turbulent au-dessus d'une marche	131
7.5	Écoulement autour d'un cylindre	136
7.6	Écoulement thermique 3D dans un cylindre	146

8	Extension de la méthode aux écoulements avec densité variable	153
8.1	Discretisation temporelle	154
8.2	Calcul de la densité d'interface	155
8.3	Projection	155
8.4	Choix de l'algorithme de résolution des équations linéaires	157
8.5	Respect du principe du maximum	158
	Conclusion	159

Table des figures

3.1	Volume de contrôle pour un maillage Voronoï	48
3.2	Extrapolation du gradient de pression	58
3.3	Illustration du problème de l'échiquier pour la vitesse	59
3.4	Maillage décalé structuré	60
3.5	Élément d'un maillage non structuré "décalé"	60
4.1	Position des I.D.O.s	64
4.2	Configurations des I.D.O.s	65
4.3	Illustration du passage des éléments géométriques aux volumes de contrôle	67
4.4	Problème d'interpolation à l'interface	68
4.5	Algorithme de calcul de la vitesse de frottement	78
4.6	Volume de contrôle chevauchant deux milieux hétérogènes	82
5.1	Algorithme de Gauss	87
5.2	Factorisation LU , décomposition de Crout	89
5.3	Factorisation de Choleski	91
5.4	Algorithme du Gradient conjugué	94
5.5	Algorithme Orthomin2	95
5.6	Algorithme d'Arnoldi	96
5.7	Algorithme GMRES	97
6.1	Format AMDBA d'un maillage	114
6.2	Diagramme de relation entre les classes	115
7.1	Géométrie, écoulement entre deux plans parallèles	118

7.2	Convergence, écoulement entre deux plans parallèles	119
7.3	Vitesse horizontale v , écoulement entre deux plans parallèles	121
7.4	Pression, écoulement entre deux plans parallèles	122
7.5	Coupes, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi	124
7.6	Vélocité, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi	125
7.7	Pression, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi	126
7.8	Convergence, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi	126
7.9	Convergence, convection naturelle dans une cavité carrée	129
7.10	Vélocité, convection naturelle dans une cavité carrée	130
7.11	Pression, convection naturelle dans une cavité carrée	130
7.12	Température, convection naturelle dans une cavité carrée	131
7.13	Géométrie, écoulement turbulent au-dessus d'une marche	131
7.14	Profils de vitesse, écoulement au-dessus d'une marche	134
7.15	Convergence, écoulement au-dessus d'une marche	135
7.16	Géométrie, écoulement 2D autour d'un cylindre	136
7.17	Coupes du maillage, écoulement 2D permanent autour d'un cylindre	138
7.18	Convergence, écoulement permanent 2D autour d'un cylindre	140
7.19	Géométrie, écoulement 3D autour d'un cylindre	142
7.20	Convergence, écoulement 3D permanent autour d'un cylindre	145
7.21	Vitesse transversale, écoulement thermique 3D dans un cylindre	149
7.22	Profil de vitesse à la sortie, écoulement thermique 3D dans un cylindre	149
7.23	Profil de température, écoulement thermique 3D dans un cylindre	150
7.24	Gradient de pression, écoulement thermique 3D dans un cylindre	151
7.25	Convergence, écoulement thermique 3D dans un cylindre	152

Liste des tableaux

3.1	Schémas convectifs	53
5.1	Temps de résolution pour différents algorithmes de résolution, problème de l'écoulement 3D thermique dans une conduite	103
7.1	Résultats comparatifs, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi .	124
7.2	Résultats comparatifs, convection naturelle dans une cavité carrée	128
7.3	Coefficients, écoulement 2D permanent autour d'un cylindre	140
7.4	Coefficients, écoulement 2D périodique autour d'un cylindre	142
7.5	Coefficients et statistiques, écoulement 3D permanent autour d'un cylindre . .	146

Nomenclature

Caractères usuels

dS	: Élément de surface	m^2
dV	: Élément de volume	m^3
D	: Longueur de référence	m
c_p	: Chaleur massique à pression constante	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
c_v	: Chaleur massique à volume constant	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
e	: Énergie interne par unité de masse	$J \cdot kg^{-1}$
\mathcal{E}_K	: Ensemble des interfaces du volume K	
\mathcal{E}_{ext}	: Ensemble des interfaces sur le bord du domaine	
\mathcal{E}_{int}	: Ensemble des interfaces à l'intérieur du domaine	
\underline{F}	: Vecteur des flux par unité de surface	
F	: Flux total	
\underline{f}	: Vecteur des forces de volume	$N \cdot m^{-3}$
h	: Enthalpie massique	$J \cdot kg^{-1}$
h_c	: Coefficient de transfert convectif	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$
h_r	: Coefficient de transfert radiatif	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$
k	: Énergie cinétique turbulente	$m^2 \cdot s^{-2}$
$m(\dots)$: Mesure d'un hyperplan	
M	: Nombre de Mach	
\underline{n}	: Vecteur normal unitaire.	
p	: Pression	$N \cdot m^{-2}$
P	: Pression cinétique	$m^2 \cdot s^{-2}$

Caractères usuels

\underline{q}''	: Vecteur des flux de chaleur par unité de surface	$W \cdot m^{-2}$
r	: Constante des gaz parfaits par unité de masse	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
s	: Fonction de production par unité de volume	
t	: Coordonnée de temps	s
$\underline{t}(n)$: Vecteur des contraintes normales	$N \cdot m^{-2}$
T	: Température	K
u^*	: Vitesse de frottement à la paroi	$m \cdot s^{-1}$
u^+	: Vitesse de frottement sans dimension	
u_τ	: Vitesse tangente à la paroi	$m \cdot s^{-1}$
v	: Norme du vecteur vitesse	$m \cdot s^{-1}$
v_i	: Composante du vecteur vitesse	$m \cdot s^{-1}$
\underline{v}	: Vecteur vitesse (vélocité)	$m \cdot s^{-1}$
x, y, z	: Coordonnées spatiales	m
\underline{x}	: Vecteur position	m
X_K	: Position d'un point associé à un volume ou un élément K	
y	: Distance fictive entre la paroi réelle et la frontière de calcul	m
y^+	: Distance fictive sans dimension entre la paroi réelle et la frontière de calcul (valeur sans dimension)	

Caractères grecs

α	: Paramètre de diffusion	
β	: Coefficient d'expansion volumique	K^{-1}
$\underline{\delta}$: Delta de Kronecker	
ϵ	: Émissivité thermique	
e	: Taux de dissipation de l'énergie turbulente	$m^2 \cdot s^{-3}$
λ	: Conductivité thermique	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
μ	: Viscosité dynamique moléculaire	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
μ_t	: Viscosité dynamique turbulente	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
ν	: Viscosité cinématique moléculaire	$m^2 \cdot s^{-1}$
ν_t	: Viscosité cinématique turbulente	$m^2 \cdot s^{-1}$
Ω	: Volume de contrôle arbitraire	m^3
$\Omega_{m(t)}$: Volume de contrôle matériel dépendant du temps	m^3
ϕ	: Variable scalaire	
ρ	: Masse volumique	$kg \cdot m^{-3}$
σ_B	: Constante de Boltzman	$5.67 \times 10^{-8} \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
$\sigma_{K,L}$: Interface séparant les volumes (éléments) K et L	
$\underline{\underline{\sigma}}$: Tenseur des contraintes visqueuses	$N \cdot m^{-2}$
$\tau_{K,L}$: Transmittivité de l'interface $\sigma_{K,L}$	

Principales notations

$\underline{\phi}$:	Tenseur d'ordre 1 (ou vecteur)
$\underline{\underline{\phi}}$:	Tenseur d'ordre 2 (ou matrice)
$\overline{\phi}$:	Valeur moyenne de la variable ϕ
ϕ'	:	Fluctuation de la variable ϕ
$\underline{\phi}_1 \otimes \underline{\phi}_2$:	Produit dichotomique entre deux vecteurs
$\nabla \cdot \underline{\phi}$:	Divergence d'un vecteur
$\nabla \phi$:	Gradient d'une fonction scalaire

Introduction

Cette thèse de doctorat porte sur le développement d'une nouvelle méthode numérique de résolution d'écoulements fluides. Les écoulements considérés sont incompressibles et les propriétés physiques telles la viscosité ou la densité peuvent être variables. Ces problèmes sont caractérisés par la résolution d'un système d'équations de transport du type

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} [\underline{v}\rho\phi - \alpha\nabla\phi] \cdot \underline{n} dS = \int_{\Omega} s(\dots) dV,$$

où :

- Ω est un volume de contrôle arbitraire, $\partial\Omega$ est sa surface ;
- \underline{n} est un vecteur unitaire normal à la surface $\partial\Omega$;
- ρ est la masse volumique qui n'est pas nécessairement constante ;
- ϕ est une variable scalaire qui dépend de la position \underline{x} et du temps t ;
- $\int_{\partial\Omega} [\underline{v}\rho\phi] \cdot \underline{n} dS$ est le flux convectif, \underline{v} étant la vitesse ;
- $\int_{\partial\Omega} -\alpha\nabla\phi \cdot \underline{n} dS$ est le flux diffusif, α étant un paramètre de diffusion telle la viscosité ;
- $\int_{\Omega} s(\dots) dV$ est un terme source, s étant une fonction de production ou de destruction de $(\rho\phi)$.

En général, les problèmes d'écoulements fluides sont très complexes et les équations du modèle mathématique doivent être résolues avec des schémas numériques. Ces schémas sont basés sur des méthodes de discrétisation des équations de transport qui peuvent être

regroupées en quatre familles :

1. les méthodes de différences finies ;
2. les méthodes d'éléments finis ;
3. les méthodes de volumes finis de type éléments finis (ou volumes finis de type Galerkin) ;
4. les méthodes de volumes finis classiques.

La discrétisation par la méthode des différences finies (voir [60], [34] et [38]) est basée sur une approximation des opérateurs de dérivées. Ces opérateurs sont approximés à l'aide de développements par série de Taylor ou bien par la dérivation d'un polynôme d'approximation. En général, les schémas basés sur une telle discrétisation sont peu flexibles et il est difficile de tenir compte de propriétés physiques (telle la conductivité) qui peuvent être discontinues lorsque le milieu est hétérogène. De plus, le maillage est généralement structuré, orthogonal et le pas d'espace constant pour une direction donnée : la résolution d'écoulements fluides dans des géométries complexes est alors problématique.

Les schémas de la famille des éléments finis (voir [15],[20],[34],[43] et [61]) sont basés sur une formulation variationnelle du problème continu et du problème discret. Cette formulation est obtenue en multipliant les équations aux dérivées partielles par une "fonction test". Les inconnues sont ensuite approximées par une combinaison linéaire de "fonctions formes" (ou fonctions de base). Les équations discrètes sont obtenues en intégrant l'équation résultante sur tout le domaine. Les schémas de cette famille permettent l'utilisation de maillages non structurés et sont particulièrement bien adaptés aux géométries complexes. Les flux sont conservés globalement. Localement, la conservation des flux n'est toutefois pas assurée. Les schémas de cette famille sont particulièrement bien convenir à l'adaptation de maillages, l'adaptation du maillage permettant dans de nombreux cas une amélioration significative de la qualité des solutions.

Les méthodes de volumes finis de type éléments finis sont elles aussi très bien adaptées aux géométries complexes (voir [36],[6] et [28]) : le maillage étant composé d'éléments géométriques pouvant avoir des formes différentes (quadrangles, triangles, tétraèdres, hexaèdres, ...). Sur les éléments, les inconnues sont approximées avec des fonctions polynômiales. L'équation discrète pour une inconnue est obtenue en intégrant les équations de transport

sur des parties d'éléments associés à l'inconnue considérée. Tout comme pour les méthodes d'éléments finis, ces méthodes de volumes finis sont compatibles avec l'adaptation de maillages.

En ce qui concerne les méthodes de volumes finis classiques (voir [21],[34],[36] et [59]), le domaine peut être discrétisé avec des éléments convexes divers (quadrangles, tétraèdres...). Les inconnues sont approximées avec des fonctions constantes par volume de contrôle et une position de référence est associée à chacun des volumes. Les équations discrètes sont obtenues en intégrant les équations de transport sur les volumes de contrôle, les flux entre les volumes étant approximés avec des formules aux différences. Dans la pratique, pour les problèmes de convection-diffusion, les maillages sont essentiellement structurés ou obtenus avec une technique Voronoï. Pour toutes les méthodes de volumes finis (incluant les volumes finis de type éléments finis), les flux sont localement conservés lorsque les équations de transport sont écrites sous forme conservative et il est possible de tenir compte de propriétés physiques discontinues. Les schémas de cette famille ne se sont toutefois pas compatibles avec l'adaptation de maillages : la qualité de la solution peut être dégradée par l'étirement des éléments. Dans ces conditions, compte tenue du faible degré des fonctions d'approximation, les dérivées secondes ne seront pas être bien évaluées. Une propriété qualitative propre à ces schémas est le respect du principe du maximum discret lorsqu'il s'applique, et ce, pour des maillages généraux.

Finalement, on peut mentionner les méthodes de volumes finis où les fonctions d'approximations ne sont pas nécessairement les mêmes dans tous les termes des équations de transport.. Pour ces méthodes, les inconnues sont constantes par volume de contrôle dans le terme transitoire. Pour évaluer les flux, des polynômes d'approximation d'un degré supérieur peuvent être utilisés afin d'obtenir une approximation consistante des flux lorsque le maillage n'est pas orthogonal (voir [72]). Toutefois, en augmentant l'ordre des fonctions d'approximation, le principe du maximum discret ne sera pas nécessairement respecté.

Lorsque l'écoulement est incompressible, trois catégories de difficultés sont inhérentes à toutes les méthodes de discrétisation :

1. la détermination de la pression ;
2. le couplage vitesse-pression ;
3. la discrétisation du terme de convection.

Avec des conditions de bord adéquates, les équations de Navier-Stokes et l'équation de la quantité de mouvement peuvent être résolues directement (sans découplage des équations) et la matrice représentant le système d'équations est alors singulière. Pour faciliter la résolution, une dérivée temporelle de la pression peut être ajoutée à l'équation de continuité (méthode de compressibilité artificielle). Chorin[24], en 1967, a été le précurseur de cette approche qui est mal-adaptée aux problèmes transitoires : une boucle devant être effectuée à chacun des pas de temps pour que la solution soit satisfaisante [23]. Les méthodes les plus populaires sont basées sur un découplage des équations et sont souvent appelées méthodes de correction de pression. En 1965, Harlow et Welsh[37] ont proposé la première méthode où les équations sont découplées, soit le schéma "Marker-and-Cell" (MAC). Leur méthode était explicite et inefficace pour la résolution d'écoulements permanents. En 1972, Patankar et Spalding[58] ont proposé l'algorithme "SIMPLE" ("Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations") où l'équation de correction de pression est déterminée à l'aide des coefficients de l'équation discrétisée de la quantité de mouvement. Pour être vraiment efficace, cet algorithme nécessite l'optimisation de paramètres de relaxation. Une version améliorée et largement utilisée encore aujourd'hui a ensuite été proposée, il s'agit de l'algorithme SIMPLER ("SIMPLE Revised")[59]. Ce dernier algorithme peut, lui aussi, diverger lorsque des paramètres de relaxation ne sont pas adéquatement déterminés. En 1984, Doormal et Raithby[33] ont introduit l'algorithme SIMPLEC ("SIMPLE Consistent") qui ne nécessite aucun paramètre de relaxation.

Parallèlement à la famille SIMPLE, les méthodes à pas fractionnaires se sont développées à partir de 1968 avec le schéma proposé par Chorin[25], soit le schéma de projection-1. Ce schéma est basé sur une séparation complète des opérateurs : le terme de pression est omis des équations de conservation de la quantité de mouvement et une deuxième équation transitoire est construite en utilisant l'équation de continuité et le terme de pression. Un champ de vitesse satisfaisant l'équation de continuité est déterminé avec cette dernière équation. La séparation complète des opérateurs n'est pas sans conséquence, la solution finale étant fortement dépendante du pas de temps (même lorsque l'écoulement est permanent). En 1981, Leveque[54] a démontré que pour résoudre des équations évolutives avec une séparation complète des opérateurs, il fallait modifier les conditions de bord. En 1985, à partir de ce résultat, Kim et Moin[46] ont proposé un schéma à pas fractionnaires avec lequel il

est possible d'obtenir de bons résultats avec une discrétisation temporelle explicite du terme de convection. D'autres chercheurs ont proposé de conserver le gradient de pression dans les équations de conservation de la quantité de mouvement et d'introduire une correction de pression (voir [67], [68], [69] et [55]). Avec ces schémas, il est possible d'obtenir de bons résultats lorsque la discrétisation temporelle est implicite. Les schémas de cette famille sont souvent appelés schémas de projection-2 ou projection-3. A priori, contrairement aux algorithmes SIMPLE et SIMPLER, ces méthodes de projection ne nécessitent aucun paramètre de relaxation.

Enfin, on peut mentionner qu'au lieu de procéder avec des méthodes de projection (méthodes à pas fractionnaires et algorithmes de la famille SIMPLE), il est aussi possible de résoudre les équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse à l'aide d'un changement de variable. Ce changement de variable est effectué en calculant le rotationnel des équations de la quantité de mouvement et en introduisant les fonctions de vorticit (ω) et de courant(ψ)[44]. Bien que l'on puisse, avec ces m ethodes, r esoudre tr es rapidement les  coulements qui ne d ependent pas d'autres quantit es scalaires, il y a des d esavantages. Entre autre chose, la formulation des conditions de bord est probl ematique et il est difficile d'ad equatement tenir compte de propri et es physiques variables. Finalement, l'extension 3D est peu pratique, le nombre de variables   d eterminer passant de 4   6 ($\psi_x, \psi_y, \psi_z, \omega_x, \omega_y, \omega_z$).

Pour bien r esoudre les  coulements incompressibles, les chercheurs ont constat e qu'il fallait introduire des espaces d'approximation diff erents pour la v elocit e et la pression. Cette construction est n ecessaire car elle permet de faire un bon couplage entre la pression et la vitesse et d' eviter des oscillations non r ealistes de la fonction de pression (ces oscillations sont souvent appel ees faux modes de pression). En 1965, Harlow et Welsch[37] ont propos e d'utiliser des maillages d ecal es ("staggered grid") o u la pression et la v elocit e ne reposent pas aux m emes positions. Durant de nombreuses ann ees, cette formulation a pratiquement  t e la seule avenue possible pour les m ethodes de volumes finis et de diff erences finis. En 1983, Rhie et Chow[26] ont montr e que les faux modes de pression pouvaient  tre  vit es   l'aide d'une r e-interpolation de la v elocit e. Ainsi, le m eme maillage peut alors  tre utilis e pour la vitesse et la pression. Il a  t e d emontr e que la r e-interpolation de Rhie-Chow et les maillages d ecal es sont  quivalents[48]. En ce qui concerne les m ethodes de la famille des  l ements

finis, des espaces d'approximation différents pour la vitesse et la pression sont directement introduits à l'aide d'éléments dits "admissibles". La combinaison d'espaces est admissible si et seulement si la condition Brezzi-Babuska[34] est satisfaite. Les principales familles d'éléments admissibles sont les éléments de Taylor-Hood[42] et de Crouzeix-Raviart[29].

Outre la problématique liée à l'incompressibilité, la résolution numérique d'équations de convection-diffusion introduit des difficultés qui lui sont propres. En effet, lorsque le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses ou de diffusion (nombres de Reynolds et de Peclet) est grand, les solutions obtenues avec une approximation du deuxième ordre (différence centrée) du terme de convection présentent généralement des oscillations qui sont physiquement irréalistes. La convergence des schémas est alors dépendante du pas d'espace, une solution réaliste ne pouvant être obtenue qu'avec un maillage comportant un très grand nombre d'éléments. Dans la pratique, particulièrement en 3D, cette solution est extrêmement coûteuse en temps de calcul et en espace mémoire et ne peut pas être envisagée. L'approximation (ou discrétisation) en amont du terme de convection s'est très tôt avérée une solution à ce problème. Les schémas amont n'ont pas tendance à produire de solutions irréalistes lorsque le nombre de Peclet (ou le nombre de Reynolds) est grand. Pour de petits nombres de Peclet ou de Reynolds, ils sont toutefois moins précis que les schémas utilisant une différence centrée du terme de convection.

En 1962, Spalding[70] proposa le schéma hybride qui fut par la suite perfectionné par d'autres chercheurs ([7] et [59]). Le schéma hybride tente de combiner les avantages des schémas amont et centrés : le terme de convection est approximé avec une discrétisation amont dans les régions où la convection prédomine et une différence centrée dans les autres régions. Ce schéma donne de bons résultats lorsque l'écoulement est permanent et orienté avec le maillage. De plus, les termes sources doivent être constants et négligeables (voir [30], [62] et [53]). D'autres schémas n'ayant pas les désavantages du schéma hybride ont aussi été proposés pour les maillages structurés (Leonard[52] et Raithby[63]). Le schéma de Leonard résout avec succès les problèmes liés à la présence du terme source et de la fausse diffusion causée par le non-alignement de l'écoulement avec le maillage. Toutefois, il n'assure pas une solution monotone ou satisfaisant le principe du maximum.

Un effort considérable a été fait pour résoudre le problème de la fausse diffusion causée par un écoulement oblique aux lignes directrices du maillage¹. En 1979, Van Leer[51] a introduit les schémas d'approximation basés sur une reconstruction de la solution par volume de contrôle, les flux d'interface étant ajustés en fonction de paramètres d'interpolation. Ces schémas, qui sont souvent appelés schémas MUSCL ("Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws"), sont particulièrement bien adaptés aux méthodes de volumes finis classiques. Ils ne sont toutefois pas adaptés à une discrétisation temporelle implicite et le pas de temps doit respecter des contraintes de type CFL : le pas de temps est alors limité par un quotient qui dépend de la vitesse et de la taille des mailles. De plus, cette plus grande précision est atteinte au détriment de la stabilité, la solution n'étant pas nécessairement bornée. Afin d'éviter les oscillations et d'obtenir une solution monotone, de nombreux schémas d'ordre 2 ont par la suite été construits avec l'approche "TVD" ("Total Variation Diminishing"). Cette approche est assez générale : l'idée centrale étant de limiter les flux pour que qu'il n'y ait pas d'accroissement des variations. En 1987, Yee[75], proposa une approche générale pour la construction de schémas dits "TVD". Les solutions calculées avec ces schémas ne présenteront pas d'oscillations causées par un trop grand pas d'espace. De plus, ces schémas sont bien adaptés à la résolution d'écoulements transitoires où les équations de conservation n'ont pas de terme source. En effet, la discrétisation temporelle est souvent explicite et les limiteurs de flux ne tiennent pas compte des termes sources.

En 1980, Baliga et Patankar ([5], [4] et [5]) ont proposé d'approximer les scalaires et les composantes du vecteur vitesse avec une fonction solution d'un problème de convection diffusion mono-dimensionnel. Cette approche a été utilisée avec succès avec des méthodes de volumes finis de type éléments finis, de volumes finis classiques et d'éléments finis. L'avantage de cette approche est d'introduire beaucoup moins de dissipation numérique que les schémas amont. Il est toutefois possible d'obtenir des solutions qui ne respectent pas le principe du maximum.

Pour les méthodes d'éléments finis, la construction de schémas dont la stabilité n'est pas conditionnelle à la taille des mailles ni au pas de temps est encore aujourd'hui un problème ouvert. Des schémas plus stables peuvent être construits en introduisant implicitement

¹Précisons que ces lignes directrices peuvent ne pas exister lorsque le maillage est non structuré (non orienté avec un système de coordonnées orthogonales).

de la dissipation numérique (voir [11], [12] et [14]) ou en modifiant les fonctions tests. Ces schémas numériques sont souvent appelées méthodes d'éléments finis Petrov-Galerkin diffusion ligne de courant (SUPG) ou méthodes de diffusion ligne de courant (méthodes SD), elles ont été introduites par Brooks et al.[35] et elles sont discutées en détail dans l'ouvrage collectif [28].

Il n'existe donc pas de solution idéale au problème de la discrétisation du terme de convection. Les méthodes les plus stables sont théoriquement moins précises et souvent conçues en étudiant des problèmes mono-dimensionnels. Les méthodes les plus précises sont construites au détriment de la stabilité où ne peuvent être utilisées que pour certains problèmes en particulier. Finalement, on tient à préciser que la fausse diffusion causée par un écoulement oblique aux lignes directrices du maillage est atténuée lorsque le maillage est non structuré (on rappelle que ces maillages ne possèdent pas nécessairement de lignes directrices).

À la lecture de ces résultats, il s'avère que la discrétisation spatiale par la méthode des volumes finis classiques soit la seule qui, théoriquement pour des maillages et des problèmes de convection-diffusion généraux, permette de construire un schéma qui respecte les propriétés suivantes :

1. la conservation locale des flux ;
2. le respect du principe du maximum discret lorsqu'il s'applique.

Ces deux propriétés sont particulièrement importantes pour la résolution de problèmes industriels où l'écoulement peut dépendre des quantités scalaires transportées. En effet, lorsque ces propriétés sont respectées, les quantités scalaires transportées par l'écoulement seront toujours en accord avec la physique du problème, et ce, sans qu'il soit nécessaire d'utiliser un maillage possédant un très grand nombre d'éléments. Malheureusement, pour utiliser une approximation constante par élément (méthodes de volumes finis classiques) lorsque la géométrie est complexe, une ou l'autre de ces techniques de construction de maillage doit être envisagées :

1. une décomposition par bloc du domaine et l'utilisation d'un maillage structuré par bloc avec changement local de coordonnées ;
2. un maillage construit avec une technique Voronoï.

En ce qui concerne les maillages structurés par bloc, il y a des problèmes liés à la conservation des flux entre les blocs. De plus, lorsque le domaine est relativement complexe, il peut être difficile (si non impossible) de le décomposer en blocs. Les maillages de type Voronoï sont quant à eux difficiles (ou impossibles) à générer lorsque le domaine est tridimensionnel et qu'il comporte des obstacles. Finalement, dans les deux cas, il peut être impossible de construire un maillage qui soit bien adapté à la solution. On tient à préciser que ces contraintes sur le maillage sont essentiellement liées à une approximation consistante des flux diffusifs entre les cellules. Lorsqu'il n'y a pas de diffusion et qu'aucune dérivée seconde n'a à être approximée, le maillage n'a pas à être orthogonal ou bien Voronoï (ce sujet sera discuté dans le chapitre 3).

Le schéma numérique présenté dans cette thèse est une nouvelle méthode de volumes finis classiques. Ce schéma est inspiré des résultats théoriques publiés par Eymard et al.[36] et d'une autre méthode de volumes finis classique 2D pour maillages non structurés proposée par Boivin et al. ([9], [10] et [19]). Les principales caractéristiques de ce nouveau schéma sont les suivantes :

1. toutes les variables scalaires et les composantes du vecteur vitesse sont approximées avec des fonctions constantes par volume de contrôle ;
2. les bilans sont calculés sur des volumes de contrôle arbitraires composés d'un assemblage de tétraèdres ;
3. les flux sont localement conservés ;
4. le principe du maximum discret est localement respecté lorsqu'il s'applique.

L'idée principale de cette méthode de volumes finis est d'associer à tous les éléments géométriques de la discrétisation (triangles en 2D ou tétraèdres en 3D) une position de référence pour le calcul des flux. Les éléments géométriques sont ensuite combinés pour former les volumes de contrôle. Les fonctions d'interpolation pour toutes les variables du système d'équations sont constantes par volume de contrôle. Ce schéma numérique est convergent, stable et permet de respecter des lois importantes des modèles continus : notamment la conservation locale des flux et le principe du maximum lorsqu'il s'applique.

Cette thèse est organisée comme suit :

- Le chapitre 1 présente un rappel de la dérivation des équations de conservation qui déterminent les écoulements incompressibles.
- Dans le chapitre 2, on présente une description du modèle de turbulence qui a été utilisé pour valider le schéma.
- Les résultats théoriques qui ont été utilisés pour développer le schéma sont présentés dans le chapitre 3.
- Le schéma numérique est présenté dans le chapitre 4. La discrétisation temporelle, la discrétisation spatiale, la formation des volumes de contrôle, le calcul des flux et l'approximation des gradients sur les volumes de contrôle y sont discutés.
- Dans le chapitre 5, on présente les algorithmes de résolution numérique de systèmes d'équations linéaires qui ont été mis en oeuvre avec notre schéma.
- Suite aux résultats obtenus avec notre schéma, une librairie informatique destinée à être utilisée par d'autres chercheurs a été développée. Cette librairie est présentée dans le chapitre 6.
- Les principaux résultats numériques obtenus lors de validation du schéma sont présentés dans le chapitre 7.
- Finalement, dans le chapitre 8, on propose des modifications au schéma pour les problèmes où la densité est variable.

Chapitre 1

Modèle mathématique, écoulement laminaire

Introduction

De nombreux problèmes d'ingénierie sont liés au transport d'une ou plusieurs quantités scalaires par un fluide newtonien. Lorsque le fluide est homogène, le modèle mathématique décrivant l'écoulement est composé des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'équation de conservation de l'énergie. Dans ce chapitre, on présente ces équations ainsi qu'un rappel de leur développement.

1.1 Notions fondamentales

Toutes les équations de conservation sont dérivées en établissant un bilan sur un milieu isolé séparé du milieu extérieur par une surface réelle ou imaginaire. Ce milieu isolé est souvent appelé **volume de contrôle**. Ce volume de contrôle peut être fixe (**volume de contrôle fixe**), avoir un déplacement arbitraire (**volume de contrôle arbitraire**) ou bien se déplacer avec l'écoulement (**volume de contrôle matériel**).

Soit \underline{f} un flux quelconque (flux de masse, d'énergie, ...) ou une force s'exerçant sur la surface $\partial\Omega$ d'un volume de contrôle arbitraire Ω . Le bilan surfacique de ce flux peut-être calculé à l'aide d'une intégrale volumique de la divergence de ce flux à l'intérieur du volume. Ce passage d'une intégrale de volume à une intégrale de surface (ou l'inverse) est effectué à l'aide du théorème de **Gauss-Ostrogradsky** (ou **théorème de la divergence**).

Théorème 1.1 *Théorème de Gauss-Ostrogradsky (Joyal et Mercier[47])*

Considérons le volume Ω borné de \mathbb{R}^3 dont le bord $\partial\Omega$ est une réunion finie de surfaces fermées lisses par morceaux et orientables. Si $\underline{\phi}(\underline{x}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ est de classe C^1 sur $\Omega \cup \partial\Omega$, alors¹

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{\phi} dV = \int_{\partial\Omega} \underline{\phi} \cdot \underline{n} dA,$$

où :

- \underline{n} est le vecteur unitaire normal pointant vers l'extérieur de $\partial\Omega$;
- dA est un élément de surface.

Considérons une particule et une quantité scalaire ϕ . Lorsque cette particule est fixe, le taux de variation de ϕ par rapport au temps est exprimé à l'aide de la dérivée partielle

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}.$$

Lorsque ϕ est une variable d'un écoulement, cette dérivée est souvent appelée **dérivée locale**. En générale, la quantité ϕ dépend de la position dans l'espace. Donc, lorsque cette particule se déplace, la variation de ϕ par rapport au temps doit aussi tenir compte de la variation de ϕ par rapport à l'espace. La **dérivée convective**

$$(\underline{v} \cdot \nabla)\phi$$

permet de calculer cette variation. Pour tenir compte à la fois de la variation locale et de la variation spatiale, le taux de variation de ϕ par rapport au temps est calculé à l'aide de la **dérivée matérielle** (ou **dérivée particulaire**)

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla\phi.$$

Cette dérivée exprime le taux de variation de ϕ par rapport au temps lorsque l'on suit une particule se déplaçant à une vitesse \underline{v} .

Considérons une quantité scalaire ϕ et un volume de contrôle isolé Ω . Le taux de variation de ϕ dans ce volume de contrôle est égal à la somme du bilan de la variation locale

¹On rappelle qu'une fonction de classe C^1 est une fonction au moins une fois dérivable et ses dérivées sont continues.

de ϕ dans Ω et du flux de ϕ traversant la surface $\partial\Omega$. Ce taux de variation peut être calculé à l'aide du **théorème de transport** (ou **règle de Leibnitz**).

Théorème 1.2 *Théorème de transport*(Candel[16])

Soit $\Omega_{m(t)}$ un volume de contrôle matériel quelconque limité par une surface $\partial\Omega_{m(t)}$ et $\phi(\underline{x}, t)$ une fonction définie sur Ω . Le taux de variation dans le temps de l'intégrale

$$\int_{\Omega_{m(t)}} \phi dV$$

est donné par l'expression

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{m(t)}} \phi dV = \int_{\Omega_{m(t)}} \frac{\partial\phi}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega_{m(t)}} \phi \underline{v} \cdot \underline{n} dA \quad (1.1)$$

où \underline{v} est la vitesse locale du fluide et \underline{n} est la normale extérieure de $\partial\Omega_{m(t)}$.

Remarques.

1. Le théorème de transport peut aussi être appliqué (sous une forme différente) à un volume de contrôle arbitraire ou fixe.
2. Lorsque le volume matériel $\Omega_{m(t)}$ et le volume fixe Ω coïncident à l'instant t , le taux de variation pour un volume matériel peut être exprimé à l'aide de l'expression suivante :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{m(t)}} \phi dV = \int_{\Omega} \frac{\partial\phi}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} \phi \underline{v} \cdot \underline{n} dA.$$

3. Pour alléger la notation, on laissera tomber le sous-indice $m(t)$ pour indiquer si le volume est matériel ou fixe.

Le théorème de la divergence permet de transformer l'intégrale de surface de l'équation (1.1) en une intégrale de volume :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi dV = \int_{\Omega} \frac{\partial\phi}{\partial t} dV + \int_{\Omega} (\underline{v} \cdot \nabla\phi + \phi \nabla \cdot \underline{v}) dV.$$

Cette équation fait apparaître deux termes dont la signification physique est importante :

1. $\int_{\Omega} \underline{v} \cdot \nabla\phi dV$ détermine le taux de variation de ϕ causé par la variation spatiale de ϕ (les particules se déplaçant) ;

2. $\int_{\Omega} \phi \nabla \cdot \underline{v} dV$ est le taux de variation déterminé par la dilatation (ou la compression) du volume. Cette dilatation (ou compression) du volume est le taux de changement du volume par rapport au temps. Il est égal à la divergence de la vitesse $\nabla \cdot \underline{v}$.

1.2 Conservation de la masse

Considérons un volume matériel Ω . La masse m contenue dans ce volume peut être calculée à l'aide de l'expression

$$m = \int_{\Omega} \rho dV$$

où ρ est la **masse volumique (ou densité)** qui peut dépendre du temps et de l'espace. Si ce volume ne contient ni source ni puit, la masse contenue dans ce volume est constante. Le taux de variation de la masse contenue dans ce volume doit donc être nul :

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho dV = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{\partial \Omega} \rho \underline{v} \cdot \underline{n} dA = 0.$$

Lorsque l'on applique le théorème de la divergence à l'intégrale de surface on obtient :

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho dV = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) dA = 0.$$

Puisque le volume de contrôle est arbitraire, seul l'intégrand peut être considéré :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0.$$

Souvent, cette équation est appelée **équation de continuité**.

Remarque. Bien que seul le volume matériel soit considéré, l'équation de conservation pour tout autre volume de contrôle est la même, seul le domaine d'intégration est modifié.

Lorsque l'écoulement est incompressible, la pression et la température ne font varier que très faiblement la densité du fluide. Si le fluide est homogène, la densité peut alors être considérée comme étant constante. Pour ces cas, le respect de l'équation

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0$$

en tout point impliquera le respect de la conservation de la masse sur tout volume de contrôle. D'un point de vue physique, il ne peut donc pas y avoir de compression ou de dilatation d'un volume de contrôle matériel lorsque l'écoulement est incompressible. Toutefois, ce volume peut être déformé puisque le **cisaillement**

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}, \quad i \neq j$$

n'est pas nécessairement nul.

Il est important de préciser que la distinction compressible/incompressible s'applique à l'écoulement plutôt qu'au fluide. En effet, la densité d'un fluide est en général dépendante de la température et de la pression. Toutefois, la compressibilité de l'écoulement peut être caractérisée par le nombre de Mach

$$M = \frac{v}{c}$$

où :

- $c = \frac{c_p}{c_v} r T$ est la vitesse locale de perturbation acoustique,
- c_p est la chaleur spécifique à pression constante,
- c_v est la chaleur spécifique à volume constant,
- r est la constante des gaz parfaits par unité de masse.

En effet, le rapport $\frac{\Delta \rho}{\rho}$ est de l'ordre du nombre de Mach. Lorsque $M \ll 1$ l'écoulement peut être considéré incompressible.

Forme conservative d'une équation de conservation

Toutes les équations de bilan sont des équations de conservation et elles sont conservatives. Il existe plusieurs façons de représenter ces équations. Pour s'assurer de la conservation locale des flux entre les volumes de contrôle, les équations de bilan doivent être écrites sous **forme conservative**. Soit ϕ une quantité scalaire quelconque, une équation de conservation pour ϕ est sous forme conservative lorsqu'elle peut s'écrire :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{f} = s,$$

où s est un terme source et \underline{f} représente un mécanisme de transport telle la convection ou la diffusion. Cette formulation des équations de bilan convient bien à la résolution numérique.

Entre autre, elle permet :

1. d'éliminer les "faux" puits ou sources de masse ;
2. d'abaisser l'ordre des dérivées à l'aide du théorème de la divergence ;
3. d'obtenir plus facilement une formulation stable des équations de convection-diffusion à l'aide d'une dérivée amont (section 3.2.3).

1.3 Conservation de la quantité de mouvement

La quantité de mouvement contenue dans un volume de contrôle matériel est :

$$\int_{\Omega} \underline{v} \rho dV ,$$

où $\underline{v}(\underline{x}, t)$ et $\rho(\underline{x}, t)$ peuvent dépendre de la position et du temps. La variation de quantité de mouvement est déterminée par le principe fondamental de la dynamique. Cette variation est égale à la somme des forces s'exerçant sur le volume :

$$\frac{d}{dt} \int_{\partial\Omega} \underline{v} \rho dV = \int_{\Omega} \underline{f} dV + \int_{\partial\Omega} \underline{t}(\underline{n}) dS$$

où :

- $\int_{\Omega} \underline{f} dV$ est l'ensemble des forces volumiques (telle la gravité) s'exerçant sur Ω ;
- $\int_{\partial\Omega} \underline{t}(\underline{n}) dA$ représente les forces appliquées sur la surface $\partial\Omega$, $\underline{t}(\underline{n})$ étant le **vecteur des contraintes**.

1.3.1 Vecteur des contraintes

Lorsque le fluide est au repos, la contrainte agissant sur un volume est normale à sa surface :

$$\underline{t}(\underline{n}) = -p\underline{n} ,$$

p étant la pression. Lorsque le fluide est en mouvement, en plus de subir la contrainte de pression, le volume doit opposer une résistance à la déformation et il y a friction entre les particules. Cette résistance est déterminée par le **tenseur des contraintes visqueuses** $\underline{\underline{\sigma}}$. Ainsi, pour un fluide en mouvement, $\underline{t}(\underline{n})$ est formé de deux composantes :

$$\underline{t}(\underline{n}) = -p\underline{n} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}.$$

La forme générale du tenseur des contraintes visqueuses peut être établi à partir des hypothèses suivantes (Landau et Libshitz[49]) :

- Le volume ne peut se déformer que lorsque les particules se déplacent avec des vitesses différentes. Ainsi ce tenseur ne doit dépendre que de la variation spatiale de la vitesse. Lorsque celle-ci est nulle ce tenseur doit être nul.
- Le fluide est newtonien, la relation entre la résistance du volume à la déformation et la variation de vitesse est linéaire.
- Lorsque la rotation du fluide est uniforme, il n'y a pas de friction entre les particules. Dans ce cas, ce tenseur doit être nul.

Une forme générale qui permet de respecter toutes ces hypothèses est :

$$\underline{\underline{\sigma}} = a\underline{\underline{d}} + b\underline{\underline{\delta}}\nabla \cdot \underline{v},$$

où :

1. a et b sont des constantes qui sont associées à la viscosité du fluide
2. $\underline{\underline{d}}$ est le **tenseur des taux de déformation** :

$$d_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

3. $\underline{\underline{\delta}}$ est le **delta de Kronecker** :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}.$$

Expérimentalement, on peut déterminer que $a = 2\mu$ où μ est la **viscosité dynamique** du fluide. Pour b la situation est plus complexe et controversée (White[73]) :

- Stokes a déterminé que b devait être posé égale à $-\frac{2}{3}\mu$.
- Karim et Rosenhead (1952) ont obtenu expérimentalement des résultats qui contredisent la valeur déterminée par Stokes : pour la majorité des liquides, cette valeur serait positive et beaucoup plus grande que μ .
- Truesdell (1954) a mis en doute les résultats des expériences de Karim et Rosehead.

D'après White, cette seconde viscosité ne devrait être considérée que pour les problèmes suivants :

1. absorption d'ondes par des liquides ;
2. les chocs.

Une des formes les plus courantes du tenseur des contraintes visqueuses est obtenue par l'introduction de la **viscosité volumique** (ou **seconde viscosité**) $\zeta = b - \frac{2}{3}\mu$:

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu \left(\underline{\underline{d}} - \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}}\nabla \cdot \underline{\underline{v}} \right) + \zeta \underline{\underline{\delta}}\nabla \cdot \underline{\underline{v}}.$$

Lorsque le gaz est mono-atomique, le coefficient de viscosité ζ est nul (en général, on n'en tient pas compte). De plus cette formulation est plus "réaliste", les coefficients de viscosité étant toujours positifs. Lorsque le fluide est incompressible, la divergence du vecteur vitesse est nulle et $\underline{\underline{\sigma}}$ peut être simplifiée :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mu (\nabla \underline{\underline{v}} + \nabla \underline{\underline{v}}^t) .$$

Lorsque l'écoulement est incompressible, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial (\rho \underline{\underline{v}})}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} [\underline{\underline{v}} \otimes (\rho \underline{\underline{v}}) - \mu (\nabla \underline{\underline{v}} + \nabla \underline{\underline{v}}^t)] \cdot \underline{\underline{n}} dS = \int_{\Omega} \underline{\underline{f}} dV - \int_{\partial\Omega} p \underline{\underline{n}} dS .$$

Généralement, cette équation est simplifiée. Lorsque la viscosité est constante le terme

$$\int_{\partial\Omega} (\mu \nabla \underline{\underline{v}}^t) \cdot \underline{\underline{n}} dS$$

est nul. Lorsque l'écoulement est incompressible, bien que la viscosité puisse être variable, il est fréquent de considérer que ce terme n'influence pas significativement l'écoulement et de ne pas le conserver (Chabard[20], Wilcox[74])² :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \underline{v})}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} [\underline{v} \otimes (\rho \underline{v}) - \mu \nabla \underline{v}] \cdot \underline{n} dS = \int_{\Omega} \underline{f} dV - \int_{\partial\Omega} p \underline{n} dS. \quad (1.2)$$

Pour regrouper tous les termes sous une intégrale volumique on a qu'à appliquer le théorème de divergence. Puisque notre volume d'intégration est quelconque seul l'intégrand de l'équation résultante peut être considéré :

$$\frac{\partial(\rho \underline{v})}{\partial t} + \nabla \cdot [\underline{v} \otimes (\rho \underline{v}) - \mu \nabla \underline{v}] = \underline{f} - \nabla p. \quad (1.3)$$

1.3.2 Conditions de bord pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement

La frontière $\partial\Omega$ peut être séparée en N éléments de frontière. En général, on distinguera trois types de frontières :

1. Entrée : la vitesse normale (ou le débit massique) à l'entrée est imposée :

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = v_b.$$

2. Sortie : la vitesse de sortie est inconnue, la contrainte normale est imposée :

$$-p \underline{\delta} + \mu (\nabla \underline{v}) = \underline{\sigma} \cdot \underline{n}.$$

Souvent, la sortie est libre et la contrainte normale est imposée égale à zéro à l'aide d'une isobare et d'une dérivée normale nulles.

3. Paroi : la vitesse normale et la vitesse tangente sont nulles :

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = 0, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau}_1 = v_{\tau_1}, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau}_2 = v_{\tau_2},$$

$\underline{\tau}_1$ et $\underline{\tau}_2$ sont des vecteurs orthogonaux tangents à la surface.

²Pour être tout à fait rigoureux, il faudrait conserver le terme $\int_{\partial\Omega} (\mu \nabla \underline{v}^t) \cdot \underline{n} dS$ lorsque la viscosité est variable.

1.3.3 Convection naturelle, approximation de Boussinesq

Dans de nombreux procédés thermiques, l'écoulement peut être induit par des forces de poussée liées à des fluctuations de température. Lorsqu'il y a de la convection naturelle, le fluide est mis en mouvement par des gradients de masse volumique résultants des gradients de température. Ces gradients de masse volumique entraînent des variations de force de volume induites par le champs gravitationnel :

$$\underline{f} = \rho \underline{g},$$

\underline{g} étant l'accélération gravitationnelle. Si l'on veut considérer la densité constante, cette force peut être prise en compte via l'**approximation de Boussinesq**.

La pression est décomposée en deux parties : p_h pour la pression hydrostatique et p_d la pression dynamique causée par le mouvement du fluide. La pression dynamique est inconnue et déterminée par les équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse. Lorsque le milieu ambiant est calme, le gradient de pression hydrostatique est connu et proportionnel au champs gravitationnel :

$$-\nabla p_h = \rho_0 \underline{g},$$

ρ_0 étant la masse volumique associée à l'état de référence. La force induite par la pression hydrostatique peut ainsi être incorporée aux forces volumiques :

$$\underline{f} = (\rho - \rho_0) \underline{g}.$$

Puisque l'écoulement est incompressible, la masse volumique du fluide ne varie qu'en fonction de la température. En procédant à une expansion en série de Taylor de ρ on obtient :

$$\rho = \rho_0 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p (T - T_0) + \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2} \right)_p (T - T_0)^2 \dots \quad (1.4)$$

Cette expression peut être simplifiée en introduisant le **coefficient d'expansion volumique** β :

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p.$$

En substituant ce coefficient dans l'équation (1.4) on a :

$$\rho = \rho_0 - \beta \rho (T - T_0) + \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2} \right)_p (T - T_0)^2 \dots$$

Pour les cas où la densité varie peu avec la température, $\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2} \right)_p \rightarrow 0$. La force volumique s'exerçant sur le fluide est alors approximée par :

$$\underline{f} \cong -g\beta\rho(T - T_0).$$

Toutefois, pour pouvoir utiliser cette approximation, deux autres conditions doivent être respectées. Premièrement, le rapport entre la variation de densité et la densité doit être petit :

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \simeq \beta(T - T_0) \ll 1.$$

Deuxièmement, dans l'équation de continuité, la variation de densité doit être négligeable par rapport à la variation de vitesse :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho \underline{v}) &\approx \rho \left(\frac{\Delta v_x}{\Delta x} + \frac{\Delta v_y}{\Delta y} + \frac{\Delta v_z}{\Delta z} \right) + \underline{v} \cdot \left(\frac{\Delta \rho}{\Delta x}, \frac{\Delta \rho}{\Delta y}, \frac{\Delta \rho}{\Delta z} \right) = 0 \\ &\iff \\ \frac{1}{\|\underline{v}\|} \left(\frac{\Delta v_x}{\Delta x} + \frac{\Delta v_y}{\Delta y} + \frac{\Delta v_z}{\Delta z} \right) + \frac{\underline{v}}{\|\underline{v}\|} \frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\Delta \rho}{\Delta x}, \frac{\Delta \rho}{\Delta y}, \frac{\Delta \rho}{\Delta z} \right) &= 0, \end{aligned}$$

où $\Delta \phi$ est la variation de ϕ . Dans les cas où

$$\frac{\Delta v}{\|\underline{v}\|} \simeq 1 \gg \frac{\Delta \rho}{\rho},$$

la densité peut être considérée constante dans l'équation de conservation de la masse puisque la contribution du terme $\underline{v} \cdot \left(\frac{\Delta \rho}{\Delta x}, \frac{\Delta \rho}{\Delta y}, \frac{\Delta \rho}{\Delta z} \right)$ est négligeable par rapport à celle de $\rho \left(\frac{\Delta v_x}{\Delta x} + \frac{\Delta v_y}{\Delta y} + \frac{\Delta v_z}{\Delta z} \right)$.

1.4 Équation de conservation de l'énergie

L'équation fondamentale pour établir un bilan d'énergie est l'équation de conservation de l'énergie totale. Elle tient compte de l'énergie interne, de l'énergie cinétique et lorsque nécessaire de l'énergie potentielle. Lorsque l'écoulement est compressible et que la densité dépend à la fois de la pression et de la température, cette équation est essentielle pour avoir un système complet.

1.4.1 Équations de conservation de l'énergie totale, cinétique et interne

L'équation de l'énergie totale est déterminée par l'application du premier principe de la thermodynamique : la variation d'énergie d'un système est égale au travail effectué sur ce système et à la chaleur apportée à ce système. L'application de ce principe à un volume matériel Ω donne :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) dV = \int_{\Omega} (s + \rho \underline{f} \cdot \underline{v}) dV + \int_{\partial\Omega} \underline{t}(\underline{n}) \cdot \underline{v} dS - \int_{\partial\Omega} \underline{q}'' \cdot \underline{n} dS,$$

où :

- $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) dV$ est la variation d'énergie interne et cinétique ;
- $\int_{\Omega} \underline{f} \cdot \underline{v} dV$ est le travail des forces de volume ;
- $\int_{\partial\Omega} \underline{t}(\underline{n}) \cdot \underline{v} dS$ représente le travail effectué par les contraintes sur la surface du volume ;
- $-\int_{\partial\Omega} \underline{q}'' \cdot \underline{n} dA$ représente la chaleur qui quitte le volume Ω par sa surface ;
- s est une source ou un puits de chaleur.

En appliquant le théorème de transport au membre de gauche de cette dernière équation et en explicitant le tenseur des contraintes on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial (\rho e + \frac{1}{2} \rho v^2)}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \underline{v} \cdot \underline{n} dA \\ &= \int_{\Omega} s + \rho \underline{f} \cdot \underline{v} dV + \int_{\partial\Omega} [(-p\underline{\delta} + \mu(\nabla \underline{v})) \cdot \underline{v}] \cdot \underline{n} dA - \int_{\partial\Omega} \underline{q}'' \cdot \underline{n} dA. \end{aligned}$$

Ensuite, le théorème de Gauss-Ostrogradsky permet de transformer les intégrales de surfaces en intégrales de volume. Le volume de contrôle étant quelconque, seul l'intégrand peut être considéré :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \underline{v} \right] \\ = & s + \rho \underline{f} \cdot \underline{v} + \nabla \cdot \left[(-p \underline{\delta} + \mu (\nabla \underline{v})) \cdot \underline{v} \right] - \nabla \cdot \underline{q}'' . \end{aligned}$$

Cette équation établit le bilan d'énergie totale. Pour obtenir l'équation de bilan de l'énergie interne, l'énergie cinétique doit être soustraite de cette équation. L'énergie cinétique est calculée en effectuant le produit scalaire entre l'équation de bilan de la quantité de mouvement écrite sous forme locale et le vecteur vitesse :

$$\begin{aligned} & \underline{v} \cdot \left[\frac{\partial (\rho \underline{v})}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\underline{v} \otimes (\rho \underline{v}) + p \underline{\delta} - \mu (\nabla \underline{v}) \right] - \rho \underline{f} \right] \\ = & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \underline{v} \right) + \underline{v} \cdot \nabla p - \underline{v} \cdot \nabla \cdot (\mu \nabla \underline{v}) - \rho \underline{f} \cdot \underline{v} = 0 . \end{aligned}$$

Cette équation détermine la variation d'énergie cinétique par rapport au temps. Lorsque soustraite de l'équation de conservation de l'énergie totale, on obtient l'équation de conservation de l'énergie interne :

$$\rho \frac{\partial (e)}{\partial t} + \rho \underline{v} \cdot \nabla e = s - p \nabla \cdot \underline{v} - \nabla \cdot \underline{q} + \nabla \cdot (\underline{\sigma} \underline{v}) .$$

1.4.2 Équation de bilan de l'énergie thermique

Lorsque l'on ne s'intéresse qu'à l'énergie thermique, l'énergie interne doit être remplacé par l'**enthalpie massique** $h = e + \frac{p}{\rho}$:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \underline{v} \cdot \nabla h = -\nabla \cdot (\underline{v} p) - \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \underline{q} + \nabla \cdot (\underline{\sigma} \underline{v}) + s .$$

De plus, il peut être démontré (Chabard [20]) que la dérivée particulière de l'enthalpie massique peut être écrite sous cette forme :

$$\frac{dh}{dt} = c_p \frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho} (1 - \beta T) \frac{dp}{dt} .$$

Cette équation permet d'écrire une équation de bilan thermique en fonction de la température :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \underline{v} \cdot \nabla T = \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla p \right) - \nabla \cdot \underline{q} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \underline{v}) + s.$$

Pour de nombreux cas, les simplifications suivantes sont appropriées :

- lorsque le nombre de Mach est faible, la dissipation visqueuse est faible :

$$\nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \underline{v}) \simeq 0;$$

- les effets de dilatation thermique sont négligeables :

$$\beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla p \right) \simeq 0;$$

- le flux local de chaleur par diffusion respecte la loi de Fourier :

$$\underline{q} = \lambda \nabla T,$$

λ est la conductivité thermique qui peut être variable.

En définitive, l'équation de bilan thermique locale est :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \underline{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + s.$$

Il est important de remarquer que cette équation n'est pas écrite sous forme conservative. Elle n'est donc pas appropriée pour la résolution numérique par volumes finis. Toutefois, lorsque la chaleur massique ne présente que de faibles variations spatiales et que l'écoulement est incompressible, cette équation peut être exprimée sous forme conservative :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} [(\underline{v} \rho c_p T) \cdot \underline{n} - \lambda \nabla T] \cdot \underline{n} dS &= \int_{\Omega} s dV, \\ &\iff \\ \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot [\underline{v} (\rho c_p T) - \lambda \nabla T] &= s. \end{aligned}$$

Conditions de bord de l'équation de l'énergie

La frontière du domaine peut être séparée en n éléments de frontière. Sur chacun de ces éléments de frontière, la condition de bord peut être du type :

1. Dirichlet, température T_b imposée

$$T = T_b;$$

2. Neuman, flux diffusif q_b'' imposé

$$\lambda \nabla T \cdot \underline{n} = q_b'';$$

3. Mixte (condition de Robin), flux convectif imposé

$$h_c(T - T_\infty) = q_b'',$$

où h_c est le **coefficient de transfert convectif**, T_∞ une température de référence ;

4. Radiatif, le flux radiatif est imposé

$$h_r(T - T_\infty) = q_b'',$$

$$h_r = \varepsilon \sigma_B (T^2 + T_\infty^2)(T + T_\infty),$$

où h_r est le **coefficient de transfert radiatif**, σ_B la **constante de Boltzman** et ε l'**émissivité thermique**.

1.5 Modèle complet

Lorsque les hypothèses suivantes sont respectées :

1. le nombre de Mach est petit : $M \ll 1$,
2. la viscosité est constante, ou bien lorsqu'elle est variable, les termes $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$ peuvent être négligés,
3. la chaleur massique ne présente que de faibles variations spatiales,

l'écoulement incompressible d'un fluide newtonien homogène peut être modélisé avec les équations de

- conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0, \quad (1.5)$$

- conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial (\rho \underline{v})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \underline{v} \otimes \underline{v} - p \underline{\underline{\delta}} - \mu \nabla \underline{v}] = \underline{f}, \quad (1.6)$$

- conservation de l'énergie

$$\frac{\partial (\rho c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho c_p T \underline{v} - \lambda \nabla T] = s. \quad (1.7)$$

1.6 Nombres sans dimension

Dans bien des cas, les principales caractéristiques d'un écoulement peuvent être déterminées à l'aide de nombres sans dimension. Dans cette section, on présente les nombres sans dimension qui sont utilisés dans ce document. La majorité de ces nombres apparaît naturellement lors de la construction des équations sans dimension[20]. Ces dernières équations ne seront toutefois pas présentées.

Nombre de Reynolds

La quantité

$$\frac{\rho v D}{\mu}$$

où

- D est une longueur caractéristique qui dépend de la géométrie du problème,
- v est une vitesse de référence telle la vitesse maximale (ou moyenne) d'entrée dans une conduite,

est appelée **nombre de Reynolds**. Il compare les forces d'inertie (termes convectifs) aux forces de viscosité. Il caractérise les écoulements forcés dans une conduite ou autour d'un obstacle. Ce nombre est souvent utilisé pour corrélérer des résultats expérimentaux à des résultats numériques. De plus, le passage du régime laminaire au régime turbulent est souvent

caractérisé par ce nombre. Par exemple, pour une conduite cylindrique, le passage du régime laminaire au régime turbulent a lieu dans l'intervalle $2100 \leq Re \leq 2500$.

Nombre de Mach

Le nombre de Mach au carré

$$M^2 = \frac{v^2}{c^2}$$

où

- $c = \frac{c_p}{c_v} r T$ est la vitesse locale de perturbation acoustique,
- c_p est la chaleur spécifique à pression constante,
- c_v est la chaleur spécifique à pression constante,
- r est la constante des gaz parfaits par unité de masse,

mesure le rapport entre l'énergie cinétique du gaz et son énergie interne. Pour les écoulements à faible nombre de Mach, ce rapport est faible et seul l'énergie thermique (interne) peut être considérée pour ces écoulements. De plus, le nombre de Mach mesure les effets de compressibilité. Pour un faible nombre de Mach, les effets de compressibilité peuvent être négligés et l'écoulement considéré incompressible. On peut aussi s'en servir pour qualifier la vitesse d'écoulement :

- $0 < M < 1$, vitesse subsonique ;
- $M > 1$, vitesse supersonique.

La structure des ondes de choc autour d'un objet étant dépendantes du nombre de Mach, il est souvent utilisé pour la description des principales caractéristiques des écoulements compressibles à haute vitesse.

Nombre de Prandtl

Dans les écoulements thermiques, le rapport entre les transferts de quantité de mouvement par les forces visqueuses sur le transfert de chaleur par conductivité thermique est appelé **nombre de Prandtl** :

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}$$

Ce nombre mesure l'efficacité des transferts de quantité de mouvement et d'énergie par diffusion. Pour un gaz, il est de l'ordre de 1 et les transferts d'énergie thermique et de quantité de mouvement par diffusion sont comparables. Pour un métal liquide, $Pr \ll 1$ et le transfert d'énergie par diffusion excède grandement le transfert de quantité de mouvement. Finalement, le développement de la couche laminaire thermique est caractérisé par le nombre de Prandtl puisque

$$\frac{\text{épaisseur de la couche limite de la vitesse}}{\text{épaisseur de la couche limite thermique}} \approx Pr^n,$$

n est un nombre entier positif dépendant de la nature du fluide (Incropera[45]).

Nombre de Peclet

Similaire au nombre de Reynolds, le **nombre de Peclet** mesure le rapport entre le transfert d'énergie thermique par convection et le transfert d'énergie par diffusion :

$$Pe = Pr \cdot Re = \frac{\rho c_p v D}{\lambda}.$$

Les nombres de Reynolds et de Prandtl lui étant préférés, il est rarement utilisé pour la caractérisation des écoulements. Toutefois, ce nombre est souvent employé pour établir une condition locale de stabilité lors de la discrétisation de l'équation de l'énergie avec des méthodes de volumes finis, d'éléments finis ou de différences finies (section 3.2.3)³.

Nombre de Grashof

Le nombre de Grashof

$$Gr = \frac{\rho^2 g D^3 \beta \Delta T}{\mu^2}$$

où

- g est l'accélération gravitationnelle ;
- β le coefficient d'expansion thermique ;

³Lorsque l'on établit cette condition de stabilité, c'est le nombre de Peclet local qui est utilisé. Son analogue pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement est le nombre de Reynolds local.

- ΔT un écart de température de référence (entre deux parois isothermes par exemple)

est employé pour comparer les forces de flottabilité causées par la différence de masse volumique entre le fluide chaud et le fluide froid et les forces visqueuses qui s'exercent sur un volume élémentaire de fluide. Il apparaît dans les problèmes de convection mixte ou de convection naturelle. Lorsque ce nombre est faible, la convection naturelle peut être négligée. Ce nombre est particulièrement important pour les problèmes de convection libre. En effet, pour ces problèmes, le nombre de Reynolds ne peut être calculé (il n'existe pas de vitesse de référence) et le passage du régime laminaire au régime turbulent est alors fortement lié au nombre de Grashof.

Nombre de Rayleigh

Un autre nombre utilisé pour l'analyse par similitude des écoulements engendrés par la convection naturelle ou la convection mixte est le **nombre de Rayleigh** :

$$Ra = \frac{c_p \rho^2 g D^3 \beta \Delta T}{\mu \lambda} = Pr \cdot Gr .$$

Ce nombre est similaire au nombre de Grashof. Il compare les forces de flottabilité dues à la différence de masse volumique entre le fluide chaud et le fluide froid au produit des forces visqueuses et thermiques qui s'exercent sur un volume élémentaire de fluide.

Pour faire une analyse par similitude d'un écoulement induit par la convection naturelle, une des deux combinaisons suivantes de nombres sans dimension est suffisante :

1. Pr et Gr ;
2. Pr et Ra .

Nombre de Strouhal

Lorsque l'écoulement doit contourner un obstacle, il peut devenir instationnaire et périodique. Alors, la vitesse dans le sillage de l'obstacle fluctue de façon quasi-sinusoïdale et la fréquence fondamentale du passage des tourbillons est corrélée avec une distance D et une vitesse caractéristique v via le **nombre de Strouhal** :

$$St = \frac{f D}{v}$$

Coefficient de portance

La portance est la force perpendiculaire à un corps en immersion dans un écoulement. C'est la composante verticale de cette force qui assure la sustentation d'un avion . Le **coefficient de portance** permet de procéder à l'analyse par similitude de la portance de corps placés dans un écoulement. Ce nombre est défini à l'aide du rapport

$$C_L = \frac{2 \cdot F_L}{\rho v^2 A}$$

où

- v est la vitesse moyenne de l'écoulement autour du corps, telle la vitesse moyenne à l'entrée d'une conduite,
- F_L est la force de portance autour du corps,
- A est l'aire du corps.

Pour une aile d'avion ou une voilure, ce coefficient dépend entre autre de l'angle d'incidence et du nombre de Reynolds, ce coefficient étant inversement proportionnel au nombre de Reynolds.

Coefficient de traînée

La traînée est la force qui s'oppose à l'avancement d'un corps dans un fluide (ou si l'on préfère, la résistance qu'oppose un corps fixe à un écoulement). Pour faire une analyse par similitude de la force de traînée F_D tangente à l'écoulement, on utilise le **coefficient de traînée**

$$C_D = \frac{2 \cdot F_D}{\rho v^2 A}.$$

Dans le cas d'un écoulement aérodynamique autour d'une aile d'avion, on calculera la composante horizontale de la force de traînée. Dans Landau et Lifchitz[49], on retrouve une discussion détaillée des forces de portance et de traînée pour les écoulements aérodynamiques.

Chapitre 2

Modèle mathématique, écoulement turbulent

Introduction

Lorsque les composantes du vecteur vitesse, la pression ou la température évoluent dans le temps de façon chaotique et que l'écoulement est instable, le régime de l'écoulement est qualifié de **turbulent**. Ces écoulements ont les caractéristiques suivantes :

- Les variables, telles la vitesse, la pression et la température varient de façon aléatoire et stochastique. Les variations spatiales sont nécessairement tridimensionnelles.
- Le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses ou le rapport entre les forces de flottabilité et les forces visqueuses sont très grands. On rappelle que ces rapports sont mesurés à l'aide des nombres de Reynolds et de Grashof (ou de Rayleigh).
- Ils sont généralement très dissipatifs, la diffusion de la quantité de mouvement, de la masse et de la température est beaucoup plus grande que pour un écoulement laminaire. Beaucoup d'énergie est éliminée et convertie en chaleur par dissipation visqueuse, l'écoulement a besoin d'un apport constant d'énergie. En fait, la turbulence accélère les processus de mélange.
- Ils sont caractérisés par une large gamme d'échelles. Les phénomènes à grande échelle sont liés à la configuration moyenne de l'écoulement. Les phénomènes à petite échelle ont, quant à eux, une dynamique propre.
- Des tourbillons de différentes échelles de grandeur sont présents et ceux-ci sont continuellement créés et détruits.

A priori, Les équations 3-D de Navier-Stokes sont valides à toutes les échelles de continuum, elles permettent de décrire mathématiquement les écoulements laminaires comme turbulents. Pour pouvoir simuler directement un écoulement turbulent, la dimension des mailles du maillage doit être inférieure aux plus petits tourbillons. La taille de ces tourbillons peut être approximée à l'aide de la loi de Kolmogorov et elle est de l'ordre de $\nu^{3/4}$. Pour un maillage structuré, le nombre de points de la discrétisation est de l'ordre de $O(Re^{9/4})$. Pour un nombre de Reynolds de 10^4 , le nombre de points serait donc de l'ordre de 10^9 . Lorsque l'on considère que beaucoup de problèmes d'aérodynamique sont caractérisés par des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^6 , il est impensable de pouvoir résoudre directement ce type de problèmes avec les ordinateurs présentement disponibles.

2.1 Modélisation de la turbulence

Lors de la résolution de problèmes d'écoulements, l'ingénieur s'intéresse souvent au comportement macroscopique de l'écoulement et non pas aux comportements à plus petite échelle. Donc, ce sont les valeurs moyennes de la vitesse, de la pression, de la température ou d'autres variables qui l'intéressent. Puisque l'interprétation des phénomènes observés lors de la simulation d'un écoulement turbulent ne demande pas de connaître les fluctuations à petite échelle, mais bien des valeurs moyennes de l'écoulement, une approche statistique de la turbulence est souvent utilisée.

Décomposition de Reynolds

Considérons une variable ϕ . Celle-ci peut être décomposée en une partie représentant sa valeur moyenne ($\bar{\phi}$) et une autre partie représentant sa fluctuation ϕ' :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'.$$

Soient ϕ et γ deux variables quelconque, l'opérateur de moyenne $\overline{(\quad)}$ possède les propriétés suivantes :

- $\overline{\overline{\phi}} = \overline{\phi}$;
- $\overline{\phi'} = 0$;
- $\overline{\phi\gamma'} = 0$;
- $\overline{\phi + \gamma} = \overline{\phi} + \overline{\gamma}$;
- $\overline{\overline{\phi} + \overline{\gamma}} = \overline{\phi} + \overline{\gamma}$.

Pour un écoulement turbulent, trois types de moyennes sont utilisées (Wilcox[74])¹. Soit $\phi(\underline{x}, t)$ une variable de l'écoulement, T un intervalle de temps et Ω un domaine quelconque :

1. Pour un problème où la turbulence n'est pas homogène et l'écoulement est stationnaire, **la moyenne temporelle est**

$$\overline{\phi}(\underline{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi(\underline{x}, t) dt.$$

2. Pour un problème où la turbulence est homogène, la **moyenne spatiale est**

$$\overline{\phi}(t) = \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\Omega} \int \phi(\underline{x}, t) dV.$$

3. Pour un problème où l'écoulement est transitoire et la turbulence non-homogène, la **moyenne d'ensemble est**

$$\overline{\phi}(\underline{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i(\underline{x}, t),$$

N étant un nombre de réalisations de l'expérience.

Les équations de conservation pour l'écoulement moyen sont obtenues en posant

$$\underline{v} = \overline{\underline{v}} + \underline{v}', \quad p = \overline{p} + p', \quad T = \overline{T} + T'.$$

¹Lorsque l'écoulement est compressible, la moyenne de Favre est plus appropriée. Il s'agit d'une moyenne pondérée avec la densité : $\tilde{\phi} = \frac{1}{\overline{\rho}} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \rho(\underline{x}, t) \phi(\underline{x}, t) dt..$

Ces valeurs sont ensuite substituées dans les équations de Navier-Stokes auxquelles on applique un opérateur de moyenne :

1. conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0;$$

2. conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial (\rho \bar{v})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \bar{v} \otimes \bar{v} + \overline{\rho v' \otimes v'} - \bar{p} \underline{\delta} - \mu (\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^t)] = \underline{f},$$

3. conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial (\rho c_p \bar{T})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho c_p T \bar{v} + \rho c_p \overline{T v'} - \lambda \nabla T] = s$$

Ces équations décrivent l'écoulement moyen et sont exactes puisqu'aucune simplification ou hypothèse n'a été faite. Ce système n'est cependant pas fermé, puisque les corrélations $\overline{\rho v' \otimes v'}$ et $\overline{T v'}$ sont inconnues. Le terme $\overline{v' \otimes v'}$ est le **tenseur de Reynolds** ou **tenseur des contraintes turbulentes**.

Le problème fondamental de la modélisation de la turbulence réside dans la modélisation de ces contraintes. Pour obtenir des équations de transport pour ces 6 contraintes (le tenseur étant symétrique), on définit l'opérateur $\mathcal{N}(v_i)$ (Wilcox[74]) :

$$\mathcal{N}(v_i) = \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho v v_i - \bar{p} \underline{\delta} - \mu (\nabla v_i + \nabla v_i^t)] - f_i = 0.$$

Ensuite, on forme la moyenne temporelle

$$\overline{v_j \mathcal{N}(v_i) + v_i \mathcal{N}(v_j)} = 0.$$

Après simplification, on obtient bien 6 nouvelles équations de transport. Toutefois, il y aura 22 nouvelles corrélations inconnues. Le système d'équations reste indéterminé, le nombre d'inconnues étant supérieur au nombre d'équations. Pour fermer le système d'équations, une des approches les plus utilisées est basée sur l'**hypothèse de Boussinesq**.

2.1.1 Hypothèse de Boussinesq

En 1877 Boussinesq a émis l'hypothèse que le tenseur des contraintes turbulentes est déterminé par les taux de déformation de l'écoulement moyen :

$$-\overline{\rho \underline{v}' \otimes \underline{v}'} = \mu_t (\nabla \underline{\bar{v}} + \nabla \underline{\bar{v}}^t) - \frac{2}{3} \rho k \underline{\underline{\delta}}, \quad (2.1)$$

μ_t étant la **viscosité turbulente** et $k = \frac{1}{2} \sum_i \overline{v'_i v'_i}$ l'**énergie cinétique des fluctuations turbulentes (énergie turbulente)**. Le terme $\frac{2}{3} \rho k \underline{\underline{\delta}}$ permet de tenir compte des contraintes normales. En effet, la somme des termes de la diagonale principale est égale à :

$$\sum_i \overline{v'_i v'_i} = 2k \neq 0.$$

Par analogie, les corrélations $\overline{T v'}$ sont déterminées à l'aide de la **conductivité turbulente** λ_t et du gradient de température :

$$-\rho c_p \overline{T v'} = \lambda_t \nabla \overline{T}. \quad (2.2)$$

En substituant les équations (2.1) et (2.2) dans les équations de conservation des valeurs moyennes de l'écoulement, on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \underline{\bar{v}})}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho \underline{\bar{v}} \otimes \underline{\bar{v}} - \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \rho k \right) \underline{\underline{\delta}} - (\mu + \mu_t) (\nabla \underline{\bar{v}} + \nabla \underline{\bar{v}}^t) \right] &= \underline{\underline{f}}, \\ \frac{\partial (\rho c_p \overline{T})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho c_p \overline{T} \underline{\bar{v}} - (\lambda + \lambda_t) \nabla \overline{T}] &= s. \end{aligned}$$

Le terme $\frac{2}{3} \rho k$ peut être omis. En effet, le gradient de ce terme peut être absorbé par le gradient de pression (voir Chabard[20]). La pression statique est alors remplacée par $\bar{p} + \frac{2}{3} \rho k$.

Ce système d'équations n'est toutefois pas fermé. En effet, les valeurs de la viscosité turbulente et de la conductivité turbulente sont inconnues. Pour déterminer ces valeurs, un modèle de turbulence doit être utilisé. Pour ce travail de recherche, on a choisi le modèle $k - \epsilon$ de Launder et Spalding[50]. Il s'agit d'un modèle général qui donne des résultats physiquement réalistes pour de nombreux cas. Toutefois, ce modèle est déficient pour certains types d'écoulements (Mohammadi[57], Wilcox[74], Speziale[71], Chang[22]) :

- Pour un écoulement turbulent dans une conduite carrée, le modèle $k - \epsilon$ ne permettra

pas de reproduire les zones de recirculation près des coins de la conduite, les variables k et ϵ prédites par ce modèle étant indépendantes de l'état de rotation du fluide.

- Ce modèle a tendance à surestimer le niveau de turbulence lorsque l'écoulement est perpendiculaire à un mur. Ainsi, pour tous les problèmes de contournement d'obstacles et de jets, les niveaux de turbulence prédits par ce modèle seront trop élevés.
- Pour les problèmes à bas nombre de Reynolds, les niveaux de turbulence ne seront pas prédits adéquatement.
- Lorsque le problème est fortement influencé par un gradient de pression inversé (tel le problème de l'écoulement au-dessus d'une marche), ce modèle sous-estimera toujours la longueur de la zone de recirculation.

Pour tous ces problèmes, des variantes du modèle $k - \epsilon$ ont été proposées par différents chercheurs et permettent d'obtenir de meilleurs résultats. Finalement, ce modèle a été utilisé, sous sa forme originale ou sous d'autres variantes, dans plusieurs codes industriels et par d'autres chercheurs. Ces faiblesses sont bien connues et pour de nombreux cas, il peut être adapté au problème considéré. Ces qualités en font un bon modèle de turbulence pour la validation d'un nouveau schéma numérique.

2.1.2 Équations de bilan du modèle $k - \epsilon$

L'étude détaillée du modèle $k - \epsilon$ ne fait pas partie des objectifs de cette thèse, la dérivation des équations de bilan pour k et ϵ ne sera donc pas présentée. Pour une présentation détaillée de la dérivation des équations de ce modèle, on propose le livre de Mohammadi et Pironneau[57].

Contrairement aux autres équations de bilan, ces équations ne sont pas basées sur la modélisation d'un phénomène physique. Elle sont obtenues à l'aide de manipulations mathématiques et la fermeture de ces équations est basée sur de nombreuses hypothèses simplificatrices. Il est toutefois important de spécifier que cette "modélisation des mathématiques" est un problème commun à tous les modèles statistiques de turbulence (Wilcox[74]).

Les variables k et ϵ sont déterminées à l'aide des équations de transport suivantes [73] :

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho \bar{u} k - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\alpha_\kappa} \right) \nabla k \right] &= P - \rho \epsilon + G, \\ \frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho \bar{u} \epsilon - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\alpha_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] &= \frac{\epsilon}{k} [C_{\epsilon 1} (P + (1 - C_{\epsilon 3})G) - \rho C_{\epsilon 2} \epsilon],\end{aligned}$$

où :

- $P = \mu_t |\bar{u} + \bar{v}^t|^2$ est un terme de production de l'énergie cinétique turbulente par cisaillement ;
- $G = \beta (\lambda_t / C_p) \underline{g} \cdot \nabla \bar{T}$ est un terme source dû aux forces de gravité, ce terme est présent dans les problèmes de convection naturelle ;
- $C_\mu = 0.09$, $C_{\mu T} = 0.09$, $\alpha_\kappa = 1.0$, $\alpha_\epsilon = 1.3$, $C_{\epsilon 1} = 1.44$, $C_{\epsilon 2} = 1.92$, $C_{\epsilon 3} = (G > 0 : 0, G < 1 : 1)$, sont des constantes qui ont été déterminées expérimentalement.

La viscosité turbulente et la conductivité turbulente sont calculées à l'aide des équations :

$$\begin{aligned}\mu_t &= \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \\ \lambda_t &= \rho C_p C_{\mu T} \frac{k^2}{\epsilon}.\end{aligned}$$

2.1.3 Conditions aux limites

Lorsque le domaine de calcul est borné par des parois, les conditions limites pour la vitesse sont en général des conditions de vitesse nulle et de forts gradients de vitesse sont présents près des parois. Il y a donc une couche limite où les phénomènes visqueux sont prépondérants et le modèle $k - \epsilon$ est inapproprié pour cette région (en général, le modèle $k - \epsilon$ est mal adapté aux régions où le nombre de Reynolds est petit). Pour bien modéliser la couche limite, il faudrait un très grand nombre d'éléments près de la frontière. Pour éviter la discrétisation de la couche limite, et ainsi réduire les coûts de calcul, la paroi est modélisée par son influence sur l'écoulement du fluide : la frontière de calcul est déplacée.

On considère généralement que la couche limite peut être découpée en trois couches (Chabard[20], Cardot[17]) :

1. une sous-couche visqueuse ;
2. un zone de transition ;
3. une sous-couche externe où l'écoulement turbulent est régi par les grosses structures, les effets visqueux y étant négligeables.

Dans les applications, la frontière de calcul est déplacée dans la sous-couche externe. Pour ce faire, on définit les quantités suivantes :

- y la distance fictive entre la paroi réelle et la frontière de calcul ;
- u_τ la vitesse tangente à la paroi ;
- $u^* = \left(\nu \frac{\partial u_\tau}{\partial n} \Big|_{y=0} \right)^{1/2}$ la vitesse de frottement au bord ;
- $y^+ = \frac{yu}{\nu}$ la distance sans dimension entre la paroi physique et la paroi fictive ;
- $u^+ = f \left(\frac{\rho y u^*}{\mu} \right)$ la vitesse de frottement sans dimension (f est une fonction qui sera précisée plus tard).

Pour la vélocité, les conditions de bord sur une paroi sont les suivantes :

- $\underline{v} \cdot \underline{n} = 0$;
- $(\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial n} (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_1) = -\rho(u^*)^2$;
- $(\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial n} (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_0) = 0$;
- $\tau_1 = \frac{\underline{v}}{|\underline{v}|}$;
- $\tau_2 = \underline{n} \times \underline{\tau}_1$.

Pour l'énergie turbulente et les taux de dissipation les conditions de bord sont les suivantes :

1. Entrée :

- énergie et taux de dissipation imposés.

2. Sortie :

- $\nabla k \cdot \underline{n} = 0$;
- $\nabla \epsilon \cdot \underline{n} = 0$.

3. Parois :

- $k = \frac{(u^*)^2}{\sqrt{C_\mu}}$;
- $\epsilon = \frac{|u^*|^3}{\sqrt{K}y}$, $K = 0.41$ est la constante de Karman.

Calcul de la vitesse de frottement

Dans la sous-couche visqueuse, la contrainte est proportionnelle à $\mu \frac{\partial u}{\partial y}$:

$$\mu \frac{\partial u}{\partial y} = \rho (u^*)^2 .$$

De plus, le profil est linéaire :

$$u^+ = \frac{u}{u^*} = y^+ , \quad 0 < y^+ < 5 .$$

Dans la zone de transition, u^+ vérifie une loi du type

$$u^+ = f(y^+) \quad 5 < y^+ < 30 .$$

Finalement, dans la zone externe , la vitesse est déterminée par une loi logarithmique :

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln(y^+) + C_1 , \quad 30 < y^+ < 100 .$$

Pour déterminer u^+ , on utilisera la loi de Reichardt :

$$u^+ = 2.5 \ln (1 + 0.4y^+) + 7.8 \left(1 - \exp \left(-\frac{y^+}{11} \right) - \frac{y^+}{11} \exp (-0.33y^+) \right) .$$

Cette loi permet de raccorder les différentes couches. Lors de la résolution numérique du système d'équations, la valeurs de la distance fictive entre la paroi réelle à la frontière de calcul y et la vitesse de frottement u^* doivent être déterminées pour chacun des éléments de frontière. L'algorithme utilisé pour déterminer ces valeurs sera présenté dans la section 4.8.

Chapitre 3

Définitions et résultats essentiels sur les méthodes de volumes finis classiques

Introduction

Pour mettre en oeuvre un schéma numérique de résolution d'écoulements incompressibles, de nombreux aspects autres que physique doivent être étudiés : la discrétisation temporelle, la discrétisation du terme de convection, la stabilité, la convergence, le choix des espaces d'approximation. Dans ce chapitre, tous ces aspects seront discutés en détails.

Pour simplifier la présentation, la densité est considérée constante. De plus, les équations de conservation sont présentées dans leur forme locale :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{F} = s(\dots), \quad (3.1)$$

où :

1. ϕ est la quantité scalaire conservée ;
2. $\underline{F} = [\underline{v}\phi - \alpha \nabla \phi]$ est le vecteur des flux convectif et diffusif ;
3. \underline{v} est le vecteur vitesse ;
4. α est un paramètre physique de diffusion telle la viscosité ou la conductivité ;
5. s est un terme source.

Dans ce chapitre, on fera souvent référence à trois définitions fondamentales de l'analyse numérique :

1. la **consistance** ;
2. la **stabilité** ;
3. la **convergence**.

Afin éviter les erreurs d'interprétation, on présente un bref rappel de ces définitions. Pour simplifier la présentation de ces définitions, on suppose que le problème continu est indépendant du temps.

Consistance

Une approximation discrète d'un problème continu est dite consistante lorsqu'on peut montrer que l'erreur de discrétisation tend vers zéro lorsque le pas d'espace h tend vers zéro.

Définition 3.1 (Consistance (au sens des différences finies)) (Anderson et al.[1])

Soit P une équation aux dérivées partielles et P_h le problème discrétisé, nous dirons que P_h est consistant par rapport à P si :

$$\lim_{h \rightarrow 0} P_h(\underline{x}) - P(\underline{x}) = 0, \quad \forall \underline{x} \in \Omega, ,$$

Ω étant le domaine de résolution.

Par la suite, la différence $P_h(\underline{x}_i) - P(\underline{x}_i)$ entre le problème continu et le problème discret sera appelée **résidu** (noté r_i).

Convergence

Un schéma convergent est un schéma pour lequel la solution numérique tend vers la solution exacte lorsque le pas d'espace tend vers zéro.

Définition 3.2 (Convergence) (Cuvelier et al.[34])

Soit $\phi(\underline{x}_i)$ la solution exacte à une position \underline{x}_i et ϕ_i la solution du problème discrétisé en ce point, le problème discrétisé P_h est dit convergent lorsque

$$\lim_{h \rightarrow 0} |\phi(\underline{x}) - \phi| = 0.$$

Par la suite, la différence $\phi(\underline{x}_i) - \phi_i$ entre la solution exacte et la solution discrète sera appelée **erreur d'approximation** (notée e_i).

On serait tenté de croire qu'une approximation consistante du problème continu implique la convergence, ce n'est toutefois pas le cas. Pour qu'un schéma soit convergent, il doit aussi être stable.

Stabilité

Définition 3.3 (Stabilité) (Cuvelier et al.[34])

Soit r_i le résidu au point \underline{x}_i et e_i l'erreur d'approximation en ce point, un schéma est stable en norme infinie ($|\cdot \cdot|_\infty$) lorsque

$$|e|_\infty \leq C |r|_\infty,$$

C étant une constante indépendante du pas d'espace.

Souvent, la stabilité d'un schéma dépend du pas d'espace ou du pas de temps et la convergence du schéma vers la solution exacte est alors dépendante du pas de temps ou du pas d'espace, peu importe si la discrétisation est consistante ou non. On peut aussi construire des schémas convergents (vers la bonne solution) dont la discrétisation spatiale n'est pas consistante au sens des différences finies avec la forme locale des équations de transport. C'est le cas des méthodes de volumes finis classiques lorsque le pas d'espace n'est pas constant (voir [36]). Essentiellement, si on peut démontrer la convergence d'un schéma de volumes finis et que l'on respecte les contraintes de stabilité, on est théoriquement assuré qu'un raffinement adéquat du maillage donnera une approximation plus précise de la bonne solution. Finalement, si la discrétisation est consistante et que les contraintes de stabilité sont respectées, le schéma est nécessairement convergent [1].

3.1 Discrétisation temporelle

L'équation transitoire (3.1) est résolue en introduisant une série croissante $(t_n)_{n \in \mathbb{N}}$ où en général $t_0 = 0$, et la différence $\delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$ est appelée **pas de temps**. La dérivée temporelle est approximée en introduisant un polynôme de Lagrange de degré m

$$\phi(t) = \sum_i^m \phi_i \prod_{j \neq i}^m \frac{t - t_j}{t_j - t_i}$$

et en le dérivant par rapport au temps. Pour un schéma à deux niveaux, tel le schéma d'Euler, l'approximation est la suivante :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} \approx \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\delta t}.$$

Pour un schéma à trois niveaux (tel le schéma de Gear) et un pas de temps constant, la dérivée temporelle est approximée à l'aide de l'expression

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} \approx \frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\delta t}.$$

Le choix dépend de la précision et de la stabilité recherchées. Lorsque le membre de droite de l'équation (3.1) est évalué au temps $t = t_{n+1}$ (schéma implicite), que la discrétisation spatiale n'est pas considérée et que le terme source est indépendant de ϕ , la stabilité de ces deux méthodes est indépendante du pas de temps. Lorsque le champ convecteur est connu, le schéma à trois niveaux est consistant d'ordre 2, le schéma à deux niveaux est quant à lui consistant d'ordre 1 (Pozrikidis[60]).

La discrétisation temporelle peut aussi être basée sur l'intégration en temps des flux et des termes sources. Dans ce cas-ci, l'équation (3.1) est intégrée sur un pas de temps générique :

$$\phi(\underline{x}, t_{n+1}) - \phi(\underline{x}, t_n) = \int_{t=t_n}^{t=t_{n+1}} [-\nabla \cdot \underline{F}(\underline{x}, t) + s(t, \dots)] dt.$$

Lorsque les flux et le terme source sont interpolés linéairement en temps, on a :

$$\begin{aligned} & \phi(\underline{x}, t_{n+1}) - \phi(\underline{x}, t_n) \\ = & \frac{\delta t}{2} \{[-\nabla \cdot \underline{F}(\underline{x}, t_{n+1}) + s(t_{n+1}, \dots)] + [-\nabla \cdot \underline{F}(\underline{x}, t_n) + s(t_n, \dots)]\} \end{aligned}$$

Cette discrétisation temporelle est souvent appelée discrétisation de **Crank-Nickolson** ou **méthode du trapèze**. Ce schéma est consistant et d'ordre deux. Cette discrétisation n'introduit pas de dissipation et elle est plus précise que le schéma de Gear. Puisque la méthode du trapèze n'introduit pas de dissipation, elle ne peut pas atténuer les petites oscillations et la stabilité dépend du pas de temps utilisé.

3.2 Discrétisation spatiale

Pour les méthodes de volumes finis classiques, la discrétisation spatiale est obtenue en introduisant un maillage T_h du domaine Ω . Ce maillage est constitué d'un ensemble d'éléments géométriques. Généralement, les bilans sont calculés en intégrant les équations de conservation sur ces mêmes éléments. Les éléments géométriques sont alors appelés **volumes de contrôle**. En tout temps $t = t_n$, une seule inconnue ϕ_K^n est associée à un volume de contrôle K .

3.2.1 Équations discrètes

L'équation discrète associée à une inconnue ϕ_K^{n+1} est obtenue en intégrant (3.1) sur un volume K générique. Lorsque la discrétisation temporelle des flux est implicite, on a :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} = - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_\sigma^{n+1} + m(K) s_K^n$$

où :

- $\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}}$ dépend de l'approximation de la dérivée temporelle ;
- \mathcal{E}_K est l'ensemble des faces du volume K ;
- F_σ^{n+1} est l'approximation du flux total à l'interface σ au temps $t = t_{n+1}$;

- $m(\cdot)$ est la mesure (volume, aire) d'un hyperplan ;
- s_K^n est une valeur moyenne du terme source par unité de volume.

La construction de l'équation discrète se termine par l'approximation du flux F_σ sur chacune des interfaces¹. Cette approximation du flux n'est pas arbitraire. En effet, pour s'assurer de la convergence d'un schéma vers la solution exacte, on doit construire une approximation du flux du volume K vers le volume L ,

$$F_{K,L} \approx \int_{K/L} \underline{F}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}_{K,L} dS,$$

qui respecte les propriétés suivantes (Eymard et al.[36]) :

1. les flux doivent être conservés :

$$F_{K,L} = -F_{L,K};$$

2. l'approximation doit être consistante :

$$F_{K,L} \rightarrow \int_{K/L} \underline{F}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}_{K,L} dS$$

lorsque la taille des volumes de contrôle tend vers zéro.

Bien sur, pour qu'il y ait convergence, les conditions de stabilité doivent être respectées.

3.2.2 Maillages admissibles

Pour que la discrétisation des flux d'interface soit consistante, le maillage doit posséder certaines propriétés que voici :

Définition 3.4 *Maillage admissible, domaines tridimensionnels(Eymard et al.[36])*

Soit Ω un domaine polygonal ouvert et borné de \mathbb{R}^3 . Un maillage T_h admissible pour Ω est constitué

- *d'un ensemble de volumes de contrôle, lesquels sont des polyèdres convexes ouverts sous-ensemble de \mathbb{R}^3 dont le volume n'est pas dégénéré (ou nul),*

¹Pour alléger la présentation, on omettra le sur-indice de temps.

- d'un ensemble d'hyperplans \mathcal{E} de \mathbb{R}^3 (ce sont les faces des volumes de contrôle) dont l'aire n'est pas dégénérée (ou nulle),
- d'un ensemble de points \mathcal{P} .

Ces ensembles doivent satisfaire les contraintes suivantes :

- (i) La fermeture de l'union de tous les volumes de contrôle est la fermeture du domaine (noté $\bar{\Omega}$).
- (ii) Soit $\mathcal{E} = \bigcap_{K \in T_h} \mathcal{E}_K$ pour tous volume de contrôle $K \in \Omega$, il existe un sous-ensemble \mathcal{E}_K de \mathcal{E} tel que $\partial K = \bar{K} \setminus K = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \bar{\sigma}$.
- (iii) Pour tous $(K, L) \in T_h^2$, $K \neq L$, la mesure de $\bar{K} \cap \bar{L}$ est 0 ou bien $\bar{K} \cap \bar{L} = \bar{\sigma}$. Pour tous $\sigma \in \mathcal{E}$, cette mesure sera notée $K \setminus L$.
- (iv) L'ensemble $\mathcal{P} = X_{K \in T_h}$ est tel que pour tous $K \in T_h$, $X_K \in \bar{K}$.
- (v) Si $\sigma = K \setminus L$, on assume que $X_K \neq X_L$.
- (vi) La droite $\mathcal{D}_{K,L}$ qui passe par les points X_K et X_L est orthogonale à $\sigma_{K,L}$.
- (vii) Pour tous $\sigma \in \partial\Omega$, soit $\mathcal{D}_{K,\sigma}$ la droite qui passe par X_K est orthogonale à σ_K , si $X_K \notin \sigma$ alors $\mathcal{D}_{K,\sigma} \cap \sigma \neq \emptyset$ et $X_\sigma = \mathcal{E}_{K,\sigma} \cap \sigma$.

Remarques

1. On rappelle que la fermeture d'un ensemble Ω est l'ensemble des points adhérents à Ω (si $\Omega = [0, 1)$, alors $\bar{\Omega} = [0, 1]$).
2. La condition $X_K \in \bar{K}$ (pour tous $K \in T_h$) peut être relaxée (item (iv)).
Un point associé à un volume de contrôle peut être à l'extérieur de celui-ci.
3. La contrainte $\sigma \in \mathcal{E}_{ext}$, $\mathcal{D}_{K,\sigma} \cap \sigma \neq \emptyset$ peut être relaxée (item (vii)).
Sur la frontière, le point d'intersection X_σ de la droite passant par X_K et orthogonale à σ_K peut ne pas être à l'intérieur de σ . En effet, cette contrainte n'est un problème que lorsque la condition de bord est de Dirichlet. Cette contrainte peut être négligée en imposant $\phi_K = g(X_K)$ lorsqu'elle n'est pas respectée, g étant la condition de bord.
4. La contrainte (v) implique que la **transmittivité**

$$\tau_{K/L} = \frac{m(\sigma_{K,L})}{(X_L - X_K) \cdot \underline{n}_{K,L}}$$

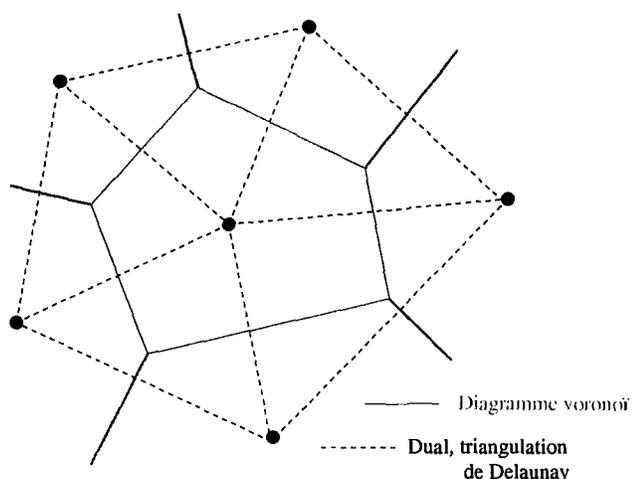


FIG. 3.1 – Volume de contrôle pour un maillage Voronoï

de l'interface $\sigma_{K,L}$ est définie pour toutes les interfaces du domaine.

5. Ensemble, les contraintes (iv) et (v) assurent la positivité de la transmittivité.
6. Dans le cas où la contrainte (v) n'est pas respectée à l'intérieur du domaine, un nouveau volume de contrôle peut-être construit en réunissant les deux volumes considérés. Ainsi, la contrainte (v) sera respectée.

Plus-tard, lorsque des résultats théoriques seront présentés, trois types de maillages seront considérés :

1. Maillages de type M_1 : la quantité $\tau_{K/L}$ est strictement positive et la contrainte $X_K \in \bar{K}$ est respectée sur tout le domaine.
2. Maillages de type M_2 : la quantité $\tau_{K/L}$ est strictement positive sur tout le domaine, la contrainte $X_K \in \bar{K}$ n'est pas respectée.
3. Maillages de type M_3 : la quantité $\tau_{K/L}$ est négative pour au moins une interface.

En 3D, une façon (qui est la seule à notre connaissance) pour directement construire des maillages admissibles est d'utiliser une technique Voronoï (figure 3.1). Un diagramme Voronoï est une partition du domaine en cellules. Une cellule K est associée à un point \underline{x}_K (appelé générateur) et est constitué des points plus proches de \underline{x}_K que de n'importe quel autre générateur.

Définition 3.5 (maillage Voronoï) (Eymard et al.[36])

Soit Ω un sous-espace polygonale ouvert borné de \mathbb{R}^n . Soit \mathcal{P} une famille de points de $\bar{\Omega}$. Les volumes sont définis par rapport aux positions \underline{x} des points de \mathcal{P} :

$$K_x = \{ \underline{y} \in \Omega \mid |\underline{x} - \underline{y}| < |\underline{z} - \underline{y}|, \forall \underline{z} \in \mathcal{P}, \underline{z} \neq \underline{x} \} .$$

La figure 3.1 illustre un partie d'un maillage 2D Voronoï. Les volumes de contrôle sont délimités par des lignes continues. Sur cette figure, on présente le dual du diagramme Voronoï, ce dual est appelé **triangulation de Delaunay**.

3.2.3 Approximation des flux

Flux convectif

La discrétisation du terme de convection

$$\int_{K,L} (\underline{v}\phi(\underline{x})) \cdot \underline{n}(\underline{x}) dS$$

doit être consistante et ne doit pas favoriser l'apparition d'oscillations qui ne sont pas physiquement réalistes. Considérons une discrétisation uniforme du domaine Ω de dimension 1. Il peut être démontré (Cuvelier [34]) que l'approximation du flux convectif par unité de surface avec la différence centrée

$$\underline{v} \frac{\phi_L + \phi_K}{2} \approx \underline{v}\phi(X_\sigma)$$

conduit à une solution fortement oscillatoire lorsque le nombre de Reynolds local (ou le nombre Peclet local) est supérieur à deux :

$$\frac{|v|h}{\alpha} > 2 ,$$

h étant la taille de la maille.

Pour assurer la stabilité du schéma lorsque le nombre de Peclet local est supérieur à deux, il est essentiel d'utiliser une approximation amont du terme de convection. Considérons les volumes de contrôle K et L , le flux convectif total du volume K au volume L peut être

approximé avec le schéma amont

$$m(\sigma_{K,L})v_\sigma\phi_{\sigma,+} \approx \int_{K/L} (\underline{v}\phi(\underline{x})) \cdot \underline{n}(\underline{x}) dS$$

où :

- $v_\sigma = \underline{v}_\sigma \cdot \underline{n}_{K,L}$ est la vitesse normale à l'interface σ , \underline{v}_σ est la vélocité à l'interface ;
- $\phi_{\sigma,+} = \begin{cases} \phi_K^{n+1}, & \text{si } v_\sigma \geq 0 \\ \phi_L^{n+1}, & \text{autrement} \end{cases}$

Cette expression est une approximation du premier ordre du flux convectif à l'interface. En effet, soit :

- $X_0 = \begin{cases} X_K, & \underline{v}_\sigma \cdot (X_L - X_K) > 0 \\ X_L, & \underline{v}_\sigma \cdot (X_L - X_K) < 0 \end{cases}$,
- $\underline{x}_{\sigma_{K,L}} = X_0 + r\Delta\underline{x}$ le point d'intersection de la droite joignant les points X_L et X_K et de l'interface $\sigma_{K,L}$,
- ϕ une fonction définie et dérivable sur l'intervalle $[X_K, X_L]$.

Alors, il existe une position $\underline{\xi}$ comprise entre X_K et X_L tel que

$$v_\sigma \phi(X_0 + r\Delta\underline{x}) = v_\sigma \phi(X_0) + v_\sigma \phi'(\underline{\xi}(r)) \|\Delta\underline{x}\| .$$

Ainsi, l'expression

$$v_\sigma \phi(X_0) \approx v_\sigma \phi(X_\sigma)$$

est bien une approximation d'ordre 1 du flux convectif à l'interface.

Flux diffusif

Considérons les volumes de contrôle adjacents K et L d'interface $\sigma_{K,L}$. Une approximation consistante du flux diffusif total du volume K au volume L est :

$$\alpha \tau_{K,L} (\phi_L - \phi_K) \approx \int_{K/L} \alpha \nabla \phi(\underline{x}) \cdot \underline{n}(\underline{x}) dS .$$

Elle est consistante puisque l'approximation du flux par unité de surface

$$\alpha \frac{\phi(X_L) - \phi(X_K)}{\|X_L - X_K\|} \approx \alpha \nabla \phi \cdot \underline{n}_{K,L}$$

est d'ordre un. En effet, considérons une droite passant par les points X_K et X_L , cette droite est décrite par le paramétrage

$$\underline{x}(r) = X_K + r(X_L - X_K).$$

Soit ϕ une fonction définie et trois fois dérivable sur l'intervalle $[X_K, X_L]$. Alors, il existe $\underline{\xi}$ compris entre X_K et X_L tel que

$$\begin{aligned} \phi(\underline{x}(r)) &= \phi(X_K) + \frac{\phi(X_L) - \phi(X_K)}{\|X_L - X_K\|} \|\underline{x}(r) - X_K\| \\ &\quad + \frac{\phi''(\underline{\xi}(r))}{2!} \|\underline{x}(r) - X_K\| \cdot \|\underline{x}(r) - X_L\|. \end{aligned}$$

La dérivée de cette expression par rapport à r est :

$$\nabla \phi \cdot \frac{d\underline{x}(r)}{dr} = \phi(X_L) - \phi(X_K) + R'(r)$$

où

$$\begin{aligned} R'(r) &= \frac{\phi'''(\underline{\xi}(r)) \underline{\xi}'(r)}{2!} \|\underline{x}(r) - X_K\| \cdot \|\underline{x}(r) - X_L\| \\ &\quad + \frac{\phi''(\underline{\xi}(r))}{2!} \|X_L - X_K\|^2 \end{aligned}$$

est la dérivée du reste. De plus, lorsque $0 < r < 1$

$$\begin{aligned} R'(r) &= \frac{\phi'''(\underline{\xi}(r)) \underline{\xi}'(r)}{2!} \|\underline{x}(r) - X_K\| \cdot \|\underline{x}(r) - X_L\| \\ &\quad + \frac{\phi''(\underline{\xi}(r))}{2!} \|X_L - X_K\|^2 \\ &\leq \|X_L - X_K\|^2 \left(\frac{\phi''(\underline{\xi}(r))}{2!} + C \frac{\phi'''(\underline{\xi}(r)) \underline{\xi}'(r)}{2!} \right) \end{aligned}$$

où $C < 1$ est une constante. Étant donné que

$$(X_L - X_K) = \underline{n}_{K,L} \cdot \|X_L - X_K\| ,$$

l'expression de l'approximation de la dérivée peut être simplifiée :

$$\nabla\phi \cdot \underline{n}_{K,L} \approx \frac{\phi(X_L) - \phi(X_K)}{\|X_L - X_K\|} .$$

Dans le cas où l'interface est à mi-chemin entre X_K et X_L cette approximation est d'ordre deux et la démonstration est similaire. Toutefois, au lieu de paramétrer avec un polynôme de degré un, un polynôme de degré deux passant par les points X_K , X_σ et X_L est utilisé.

Important. Dans certains codes de volumes finis classiques, les positions X_K et X_L reposent au centre de gravité de leur volume de contrôle respectif. Souvent, l'approximation

$$\alpha m(\sigma_{K,L}) \frac{(\phi_L - \phi_K)}{\|X_L - X_K\|} \approx \int_{K/L} \alpha \nabla\phi(\underline{x}) \underline{n}(\underline{x}) dS$$

est utilisée pour évaluer les flux d'interface. *Cette approximation n'est valide que pour un maillage rectangulaire et parallèle au système de coordonnées de référence.* Pour tout autre maillage, cette approximation des flux n'est pas consistante puisque la droite reliant les points X_K et X_L n'est pas perpendiculaire à l'interface $\sigma_{K,L}$. Un schéma basé sur cette technique de discrétisation ne sera pas nécessairement convergent vers la bonne solution. En pratique, pour un tel schéma, un raffinement adéquat du maillage n'augmentera pas nécessairement la précision de la solution numérique.

Anti-diffusion et diffusion numérique

On peut obtenir des solutions qui sont physiquement réalistes avec une discrétisation en amont du terme de convection. Cependant, il y a un problème bien connu inhérent à cette discrétisation : elle est trop diffusive. Il peut être démontré que la viscosité artificielle introduite par un tel schéma est de l'ordre de $\frac{vh}{2}$ lorsque la taille h des mailles est constante (Cuvelier et al[34]). Afin d'atténuer la diffusion introduite par cette discrétisation, différents schémas antidiffusifs ont été développés. On peut construire ces schémas à partir de la solu-

Schéma	$\phi_\sigma =$	$\Gamma =$
Hybride	$\begin{cases} \frac{\phi_K + \phi_L}{2}, & Re_l < 2 \\ \phi_{\sigma,+}, & \text{autrement} \end{cases}$	$\begin{cases} \Gamma, & Re_l < 2 \\ 0, & \text{autrement} \end{cases}$
Loi de puissance	$\phi_{\sigma,+}$	$\Gamma \cdot \max [0, (1 - 0.1 Re_l)^5]$
Exponentiel	$\phi_{\sigma,+}$	$\Gamma \cdot \frac{Re_l}{e^{Re_l} - 1}$

TAB. 3.1 – Schémas convectifs

tion du problème de convection-diffusion unidimensionnel

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(u\phi - \alpha \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = 0, \quad \phi(x_0) = \phi_0, \quad \phi(x_1) = \phi_1, \quad x_0 \leq x \leq x_1 \quad (3.2)$$

où u est un champ convecteur connu et constant. La solution à ce problème est donnée par l'expression

$$\frac{\phi(x) - \phi_0}{\phi_1 - \phi_0} = \frac{e^{\frac{(x-x_0)Re_l}{(x_1-x_0)}} - 1}{e^{Re_l} - 1}, \quad Re_l = \frac{|u| \cdot |x_1 - x_0|}{\alpha} \quad (3.3)$$

L'étude de cette solution permet la construction des schémas présentés dans le tableau 3.1 (Patankar [59]). Le schéma hybride est le plus simple des trois et permet une approximation d'ordre deux du terme de convection dans les régions où la convection n'est pas dominante. Toutefois, il est délicat à mettre en oeuvre, l'approximation du terme de convection avec une différence centrée pouvant nuire à la stabilité². Les schémas "loi de puissance" et "exponentiel" donnent essentiellement les mêmes résultats. Ils permettent de conserver la stabilité du schéma amont et d'atténuer efficacement la diffusion numérique. Toutefois, le schéma "loi de puissance" est moins coûteux en temps de calcul, il nécessite une seule évaluation de la fonction puissance comparativement à deux évaluations de la fonction exponentielle pour le schéma "exponentiel". À notre connaissance, **les schémas hybrides et "loi de puissance" n'ont été utilisés que dans le cadre de méthodes de volumes finis classiques sur maillages structurés**. Le schéma "exponentiel" a, quant à lui, été utilisé avec succès avec des méthodes de volumes finis classiques sur maillages structurés, d'éléments finis et de volumes finis de type Galerkin sur maillages non structurés triangulaires (Baliga et al. [3], [4] et [5]).

²En fait, lors du développement du schéma, le schéma hybride n'a pas donner de très bons résultats. Il n'a donc pas été conservé.

3.2.4 Quelques résultats théoriques

Gallouet et al.([36] et [39]) ont démontré de nombreux résultats théoriques sur la convergence et la stabilité des méthodes de volumes finis classiques. Dans cette section, on présente les principaux résultats qui nous ont inspiré pour le développement de notre schéma.

Soit ϕ une quantité scalaire obéissant à une loi de conservation, on considère le schéma de volumes finis suivant :

$$m(K) \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{t=t^{n+1}} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} = m(K) f_K^n$$

$$F_{K,\sigma} = -F_{L,\sigma}$$

$$F_{K,\sigma} = m(\sigma_{K,L}) v_\sigma \phi_{\sigma,+}^{n+1} - \tau_{K,L} \alpha (\phi_L^{n+1} - \phi_K^{n+1}), \quad \sigma \in \mathcal{E}_{int}$$

$$F_{K,\sigma} = m(\sigma) v_\sigma \phi_{\sigma,+}^{n+1} - \tau_\sigma \alpha (g(X_\sigma) - \phi_K^{n+1}), \quad \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, \quad \text{Condition de Dirichlet}$$

$$F_{K,\sigma} = m(\sigma) v_\sigma \phi_{\sigma,+}^{n+1} - \frac{1}{m(\sigma)} \int_\sigma g(\underline{x}) dS, \quad \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, \quad \text{Condition de Neumann}$$

$$F_{K,\sigma} = \tau_\sigma (\phi_\sigma - \phi_K^{n+1}) = -F_{\infty,\sigma}$$

$$F_{\infty,\sigma} = h_c m(\sigma) (\phi_\sigma - \phi_\infty), \quad \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, \quad \text{Condition de Robin}$$

où :

- $\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{t=t^{n+1}}$ est une approximation discrète de la dérivée temporelle ;
- \mathcal{E}_K est l'ensemble des interfaces du volume K , \mathcal{E}_{int} l'ensemble des interfaces à l'intérieur du domaine, \mathcal{E}_{ext} l'ensemble des interfaces sur le bord du domaine ;
- v_σ est la vitesse normale à l'interface σ ;
- $\phi_{\sigma,+}^{n+1}$ est la valeur en amont de l'interface ;
- $\tau_{K,L} = \frac{m(\sigma_{K,L})}{(X_L - X_K) \cdot \underline{n}_{K,L}}$ est la transmittivité de l'interface $\sigma_{K,L}$;
- X_L , et X_K sont les positions de calcul des flux associées aux volumes de contrôle K et L , $\underline{n}_{K,L}$ est le vecteur unitaire normal à l'interface $\sigma_{K,L}$ et pointant vers l'extérieur de K ;

- f_K^n est une valeur moyenne du terme source sur le volume K au temps t_n ;
- $g(\underline{x})$ est une fonction qui définit la valeur au bord (condition de Dirichlet), ou le flux au bord (condition de Neumann) ;
- h_c est un coefficient de transfert convectif et ϕ_∞ une valeur de référence.

Pour un maillage admissible, lorsque l'écoulement est permanent et que la condition de bord est de Dirichlet, de Neumann ou de Robin, Eymard et al. ont démontré que :

1. ce schéma converge vers une solution unique et que l'erreur d'approximation dépend de la taille du maillage³ $dim(\mathcal{T}_h)$:

$$\|\phi_K - \phi(\underline{x})\|_{L^2(\Omega)} \leq C \dim(\mathcal{T}_h),$$

où $C > 0$ est une constante qui est indépendante du pas d'espace.

2. le principe du maximum est respecté (condition de Dirichlet).

Pour une condition de bord de type Dirichlet, lorsque l'écoulement est transitoire et que la discrétisation temporelle est à deux niveaux (le schéma d'Euler), Eymard et al.[36] ont démontré que l'erreur est estimée par l'expression

$$\sqrt{\sum_{K \in \mathcal{T}} (\phi(X_K) - \phi_K)^2 m(K)} \leq C (h + \delta t),$$

où :

- h est la taille du maillage et δt le pas de temps ;
- $C > 0$, est une constante indépendante du pas de temps et du pas d'espace.

Remarque Dans certains cas, l'ordre de l'erreur d'approximation observée expérimentalement est souvent supérieur. Dans le cas de ce schéma de volumes finis, pour des problèmes de diffusion (elliptiques) en 2D lorsque le maillage est non structuré et composé de triangles, l'ordre de l'erreur d'approximation observée est égale à 2 (voir Cayré [18]).

³On rappelle que la taille du maillage est le diamètre de la plus grande maille.

3.3 Résolution de l'équation de conservation de la masse, méthodes de projection

Considérons un écoulement incompressible évolutif. Cet écoulement est déterminé par les équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse :

$$\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \nabla \cdot [\underline{v} \otimes \underline{v} - \nu \nabla \underline{v}] + \nabla P = \underline{f} \quad (3.4)$$

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (3.5)$$

P étant la pression cinétique. Le système étant fortement couplé et non-linéaire, la résolution numérique de ces équations est problématique. Bien que ce système d'équations puisse être résolu en considérant l'ensemble des équations, il est en général préférable de découpler les équations. Lorsque le problème considéré est instationnaire, le découplage des équations réduit significativement le temps nécessaire à la résolution (Turek[66]). Toutefois, pour certains problèmes stationnaires où le découplage n'est pas nécessaire, cette approche peut être beaucoup plus onéreuse en temps de calcul.

3.3.1 Projection

Les schémas les plus utilisés pour résoudre le système d'équations (3.4-3.5) sont des méthodes dites de **projection**. Ce sont les schémas développés à partir de l'algorithme "Simple" de Spalding et Patankar[59] et du schéma de projection initialement proposé par Chorin[25].

L'algorithme proposé par Chorin est basé sur un découplage des opérateurs. Le découplage des opérateurs est une procédure qui permet de séparer un pas de temps en une suite de pas de temps dans lesquels les opérateurs sont pris en compte séparément. Ainsi, le système d'équations évolutif

$$\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} = A_1 \underline{v} + A_2 \underline{v} + A_3 + \dots + A_n$$

(les $A_1 \dots A_n$ sont des opérateurs qui modélisent les forces s'exerçant sur le fluide) peut être

résolu en plusieurs étapes :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} &= A_1 \underline{v} \\ \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} &= A_2 \underline{v} \\ &\vdots \\ \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} &= A_n.\end{aligned}$$

La dernière solution est celle prévalant pour tout le pas de temps. Dans le schéma proposé par Chorin, le système d'équations (3.4-3.5) est résolu en deux étapes :

1. Convection-diffusion :

$$\frac{\underline{v}^{n+1/2} - \underline{v}^n}{\delta t} + \nabla \cdot [\underline{v} \otimes \underline{v} - \nu \nabla \underline{v}] = \underline{f}.$$

2. Projection :

$$\frac{\underline{v}^{n+1} - \underline{v}^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla P^{n+1}, \quad \nabla \cdot \underline{v}^{n+1} = 0.$$

La vitesse $\underline{v}^{n+1/2}$ est une vitesse intermédiaire qui ne satisfait pas nécessairement la contrainte d'incompressibilité. De plus, la discrétisation temporelle des termes de diffusion et de convection dépend du schéma employé. Pour obtenir des résultats réalistes avec ce type de schéma, le terme de convection doit absolument être discrétisé explicitement⁴. De plus, les conditions de bord doivent être modifiées pour tenir compte de la séparation complète des opérateurs (Kim et al. [46], Leveque et al.[54]). Pour éviter la limitation du pas de temps et stabiliser le schéma, la discrétisation suivante est préférable :

1. Convection-diffusion :

$$\frac{\underline{v}^{n+1/2} - \underline{v}^n}{\delta t} + \nabla \cdot [\underline{v}(t = t_{n+1}) \otimes \underline{v}^{n+1/2} - \nu \nabla \underline{v}^{n+1/2}] + \nabla P^n = \underline{s} \quad (3.6)$$

⁴Lorsque le terme de convection est discrétisé implicitement, on peut démontrer que la solution finale d'un écoulement permanent est fortement liée à la vitesse et au pas temps.

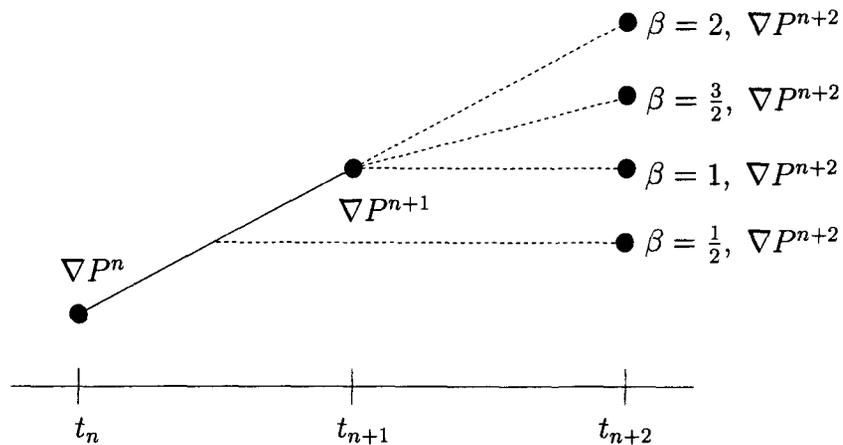


FIG. 3.2 – Extrapolation du gradient de pression

2. Projection :

$$\beta \frac{\underline{v}^{n+1} - \underline{v}^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla (\delta P^{n+1}), \quad \nabla (\delta P^{n+1}) = \nabla P^{n+1} - \nabla P^n \quad (3.7)$$

$$\nabla \cdot \underline{v}^{n+1} = 0 \quad (3.8)$$

où β est un paramètre de relaxation. Il permet de faire une interpolation ou une extrapolation de la valeur du gradient de pression au pas de temps suivant. Trois cas peuvent être considérés (figure 3.2) :

1. $\beta < 1$, interpolation, le gradient de pression est une combinaison linéaire des gradients de pression aux temps $t = t_n$ et $t = t_{n+1}$.
2. $\beta = 1$, le gradient de pression est celui du temps précédent ($t = t_{n+1}$);
3. $\beta > 1$, le gradient de pression est une extrapolation (sur-relaxation).

Théoriquement (Shen[67]), le choix $\beta = 2$ conduit à une discrétisation temporelle d'ordre deux. Toutefois, dans la pratique, la valeur optimale peut dépendre du problème considéré.

Pour respecter l'équation de conservation de la masse. On procède ainsi : \underline{v}^{n+1} est

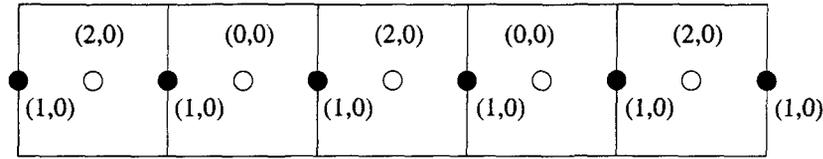


FIG. 3.3 – Illustration du problème de l'échiquier pour la vitesse

isolée dans l'équation (3.7) :

$$\underline{v}^{n+1} = -\frac{\delta t}{\beta} \nabla (\delta P^{n+1}) + \underline{v}^{n+1/2} \quad (3.9)$$

En substituant cette expression dans l'équation de continuité on obtient une équation où seule la variation de pression est inconnue :

$$-\nabla \cdot \nabla (\delta P^{n+1}) = -\frac{\beta}{\delta t} \nabla \cdot \underline{v}^{n+1/2} \quad (3.10)$$

La pression est modifiée en fonction de la solution à cette équation et la vitesse est ensuite mis à jour en appliquant l'équation (3.9).

3.3.2 Maillages décalés

Un autre problème associé à la résolution des équations de Navier-Stokes pour un écoulement incompressible est lié aux espaces d'approximation de la vitesse et de la pression. Si ces espaces d'approximation ne sont pas choisis judicieusement, la pression ne sera pas définie de façon unique à une constante près. Dans certains cas, la solution numérique présentera d'importantes oscillations qui ne sont pas physiquement réalistes (faux modes de pression). Ce problème est causé par les dérivées premières

$$\nabla P \quad \text{et} \quad \nabla \underline{v}$$

qui sont présentes dans les équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse. Si les espaces d'approximation ne sont pas choisis adéquatement, il est possible de construire une fonction \tilde{P} (ou \tilde{v}) non constante telle que $\nabla \tilde{P} = 0$ (ou $\nabla \tilde{v} = \underline{0}$). Cette construction est illustrée sur la figure 3.3. Sur cette figure, bien que la composante horizontale de la vitesse varie entre 0 et 2 sur tous les éléments, la valeur interpolée aux interfaces est

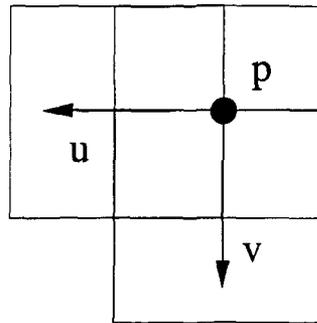


FIG. 3.4 – Maillage décalé structuré

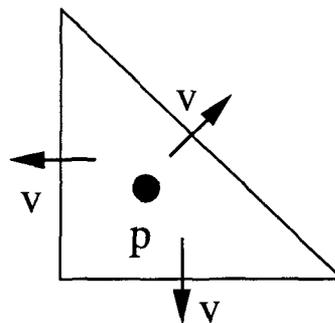


FIG. 3.5 – Élément d'un maillage non structuré "décalé"

constante et égale à 1. L'approximation de la dérivée pour cet exemple est nulle sur chacun des éléments, bien que la fonction ne soit pas constante.

Pour résoudre ce problème, on peut utiliser des maillages différents pour la pression et la vitesse. Ces maillages sont souvent appelés **maillages décalés**. Pour ces maillages, les degrés de liberté pour la vitesse et la pression reposent en des positions différentes. Pour un maillage structuré, la construction est illustrée sur la figure 3.4. Les degrés de liberté pour la pression reposent au centre des éléments. Pour la vitesse, les degrés de liberté sont au centre des interfaces. Ainsi, le volume de contrôle pour les composantes de la vitesse est "décalé" par rapport à celui de la pression.

Pour un maillage non structuré constitué de triangles ou de tétraèdres, Boivin et al[13] ont introduit une méthode pour éviter les faux modes de pression. Des espaces d'approximation différents pour la pression et la vitesse sont introduits en interpolant la vitesse sur les interfaces du maillage. Ces valeurs sont ensuite utilisées pour effectuer la projection. Boivin

et al. ont démontré que la pression calculée après les étapes de ré-interpolation et de projection est définie de façon unique à une constante près. Un élément pour ce maillage “décalé” est illustré sur la figure 3.5. On tient à préciser que la démonstration de Boivin et al. s’applique au schéma qui est présenté dans cette thèse.

Chapitre 4

Une nouvelle méthode de volumes finis pour des maillages non structurés

Notre nouveau schéma numérique est inspiré d'une méthode de volumes finis de résolution d'écoulements incompressibles 2D sur maillages non structurés proposé par Boivin et al. ([13], [9], [10], et [19]). Pour ce schéma, les volumes de contrôle sont les triangles qui forment le maillage (les éléments géométriques). Les positions de référence des volumes de contrôle ne sont pas au barycentre des cellules, mais placées à l'intersection des bissecteurs orthogonaux. Notre schéma est quant à lui plus général, le domaine peut être tridimensionnel et les volumes de contrôle ne sont pas nécessairement les éléments géométriques mais des assemblages d'éléments.

Les principales caractéristiques de notre schéma sont :

1. la méthode de discrétisation spatiale est de type volumes finis classiques ;
2. ce schéma permet l'utilisation de maillages non structurés généraux ;
3. pour toutes les variables du système d'équations les fonctions d'interpolation sont des constantes par volume de contrôle ;
4. la discrétisation temporelle est semi-implicite à pas fractionnaires.

Bien que le schéma puisse être utilisé lorsque la densité est variable, celle-ci est considérée constante pour l'instant.

4.1 Discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle est semi-implicite et basée sur la méthode de projection décrite dans la section 3.3.1. Soit,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} = \begin{cases} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\delta t}, & \text{cas stationnaire} \\ \frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n - \phi^{n-1}}{2\delta t}, & \text{autrement} \end{cases}$$

l'approximation discrète de la dérivée temporelle et

$$\underline{v}(t = t_{n+1}) = \begin{cases} \frac{3}{2}\underline{v}^n - \frac{1}{2}\underline{v}^{n-1} & \text{vélocité} \\ \underline{v}^{n+1} & \text{autrement} \end{cases}$$

l'approximation du champs convecteur au temps $t = t_{n+1}$, la discrétisation temporelle des systèmes d'équations est la suivante :

1. Extrapolation du champs de vitesse :

$$\left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} + \nabla \cdot [\underline{v}(t = t_{n+1}) \otimes \underline{v}^{n+1/2} - \nu \nabla \underline{v}^{n+1/2}] + \nabla P^n = \underline{f}^n. \quad (4.1)$$

2. Projection :

$$\beta \frac{\underline{v}^{n+1} - \underline{v}^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla (\delta P^{n+1}), \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \underline{v}^{n+1} = 0. \quad (4.3)$$

3. Convection et diffusion des autres variables scalaires telle la température :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t_{n+1}} + \nabla \cdot [\underline{v}(t_{n+1}) \phi^{n+1} - \alpha \nabla \phi^{n+1}] = s^n. \quad (4.4)$$

Remarque. Le problème est linéarisé à cette étape, le champs convecteur étant considéré connu pour le temps $t = t_{n+1}$. De plus, lorsque l'on ne tient pas compte de l'erreur introduite par la discrétisation spatiale, l'utilisation du schéma de Gear pour l'approximation de la dérivée temporelle nous donne un schéma qui est d'ordre 2 en temps pour la vitesse et les variables scalaires (Shen[55]).

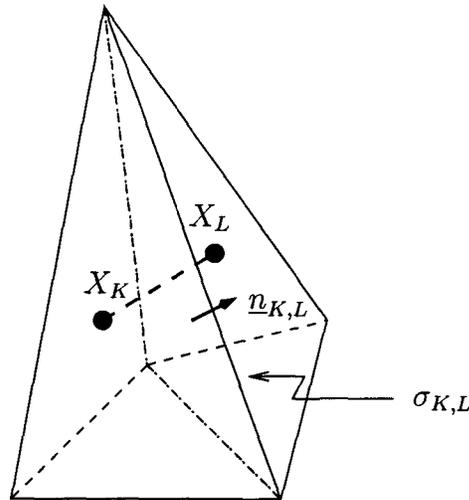


FIG. 4.1 – Position des I.D.O.s

4.2 Discrétisation spatiale

4.2.1 Fonctions d'approximation

Toutes les variables du système d'équations sont approximées avec des fonctions constantes par volume de contrôle. Il n'y a qu'un seul degré de liberté (**ddl**) par volume contrôle.

4.2.2 Éléments géométriques et volumes de contrôle

Éléments géométriques

Un ensemble d'éléments géométriques est utilisé pour discrétiser le domaine Ω . Cet ensemble d'éléments est constitué exclusivement de tétraèdres. Une position de référence X_K est associée à tout tétraèdre K de la discrétisation. Cette position est le centre de la sphère circonscrite au tétraèdre K . Ainsi, la droite reliant les positions X_K et X_L de deux tétraèdres adjacents est toujours perpendiculaire à l'interface $\sigma_{K,L}$ (Eymard[36]). Par la suite, cette position sera appelée **intersection des droites orthogonales (I.D.O.)**. La position de l'I.D.O. est illustrée sur la figure 4.1.

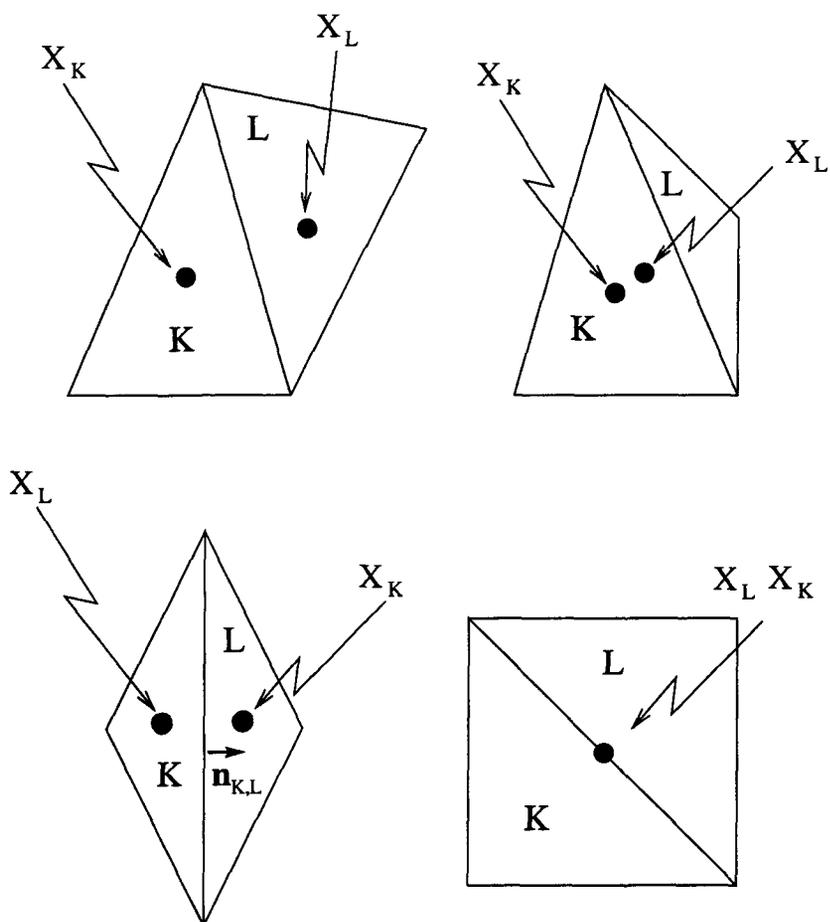


FIG. 4.2 – Configurations des I.D.O.s

Volumes de contrôle

Les volumes de contrôle sont des assemblages d'éléments (de tétraèdres) sur lesquels on réalise les bilans. À priori, les volumes de contrôle correspondent aux tétraèdres. Cependant, dans certains cas (nous verrons pourquoi plus-tard), des volumes de contrôle sont constitués en réunissant plusieurs tétraèdres. Même pour ces cas, le nombre de degrés de liberté associés à un volume de contrôle demeure égale à 1, toutes les variables étant constantes par volume de contrôle.

La construction des volumes de contrôle est déterminée par la valeur de la transmissivité de l'interface $\sigma_{K,L}$ séparant deux tétraèdres K et L :

$$\tau_{K,L} = \frac{m(\sigma_{K,L})}{(X_L - X_K) \cdot \underline{n}_{K,L}}.$$

Les possibilités sont les suivantes (ces configurations sont les mêmes en 2D, elles sont illustrées sur la figure 4.2 de la page 65 pour deux triangles voisins K et L) :

1. Configurations M_1 et M_2 :

$$\tau_{K,L} > 0.$$

Les volumes de contrôle sont les éléments géométriques.

2. Configuration M_3 :

$$\tau_{K,L} < 0,$$

X_K et X_L ne reposent pas dans leurs tétraèdres associés et sont inversés. Les éléments K et L sont combinés en un seul volume de contrôle. Ce volume de contrôle possède au moins deux I.D.O : X_K et X_L .

3. Configuration M_4 :

$$|\tau_{K,L}| \rightarrow \infty,$$

au moins deux I.D.O. occupent la même position (à epsilon près). Les éléments K et L sont combinés en un seul volume de contrôle. Ce volume de contrôle ne possède qu'un seul I.D.O. (tous les I.D.O. de l'ensemble des tétraèdres qui forment le volume occupent la même position).

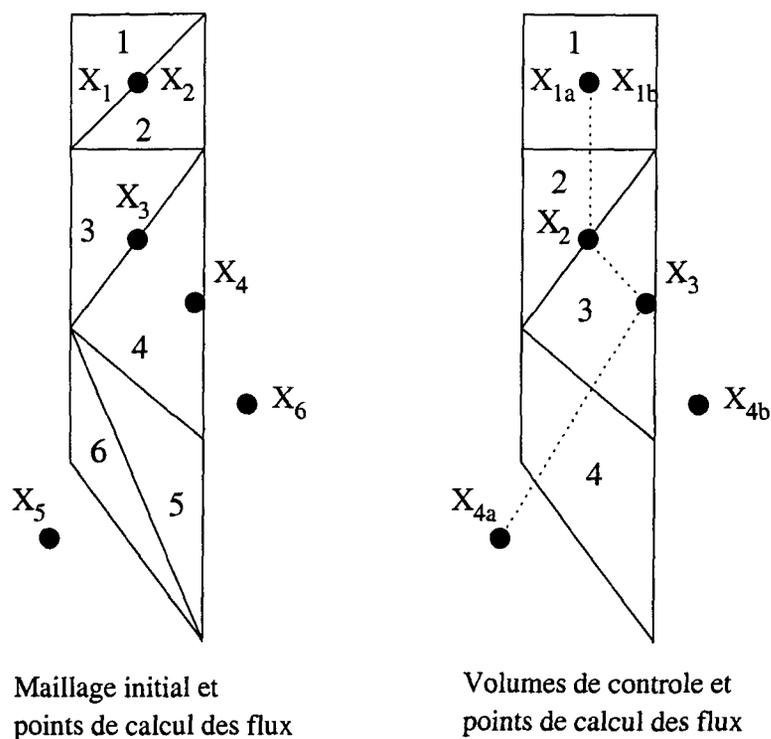


FIG. 4.3 – Illustration du passage des éléments géométriques aux volumes de contrôle

Exemple de construction des volumes de contrôle

La figure 4.3 illustre le passage des éléments géométriques aux volumes de contrôle. En premier lieu le maillage est constitué de 6 éléments. À chacun des éléments, on a associé une position de calcul des flux (un I.D.O.). Les points de calcul des flux des éléments 1 et 2 occupent la même position. Ces éléments sont combinés pour former le volume 1. Pour les éléments 3 et 4, aucun traitement n'est nécessaire, les éléments deviennent les volumes de contrôle 2 et 3. Pour les éléments 5 et 6, il y a inversion, ces éléments sont combinés pour former le volume 4. Ce volume possède deux positions de calcul des flux, les points X_{4a} et X_{4b} . Le calcul du flux entre les volumes 3 et 4 est effectué à partir des points X_{4a} et X_3 .

Remarque. Bien que des positions de calcul des flux puissent être à l'extérieur de leur volume de contrôle, c'est la solution associée à tout le volume de contrôle qui est utilisée pour calculer les flux.

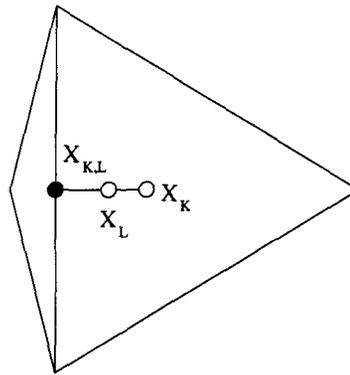


FIG. 4.4 – Problème d'interpolation à l'interface

4.3 Approximation discrète sur les interfaces

Les variables et paramètres du système d'équations sont interpolées sur les interfaces à l'aide d'une moyenne géométrique. Soit ϕ une variable ou un paramètre telle la conductivité, l'approximation discrète sur l'interface $\sigma_{K,L}$ est :

$$\phi_{K,L} = \frac{m(K)\phi_K + m(L)\phi_L}{m(K) + m(L)}.$$

L'approximation géométrique permet de respecter localement le minimum et le maximum de la solution. Mais, elle est moins précise que l'interpolation linéaire

$$\begin{aligned} \phi_{K,L} &= (1 - t_{K,L})\phi_K + t_{K,L}\phi_L, \\ t_{K,L} &= \frac{(X_K - X_{K,L}) \cdot (X_L - X_K)}{(X_L - X_K) \cdot (X_L - X_K)}. \end{aligned}$$

En effet, cette dernière interpolation préserve l'ordre d'approximation aux positions X_K et X_L lorsque $0 \leq t_{K,L} \leq 1$. Malheureusement, en 3D, il est fréquent que $t_{K,L} \gg 1$ ou $t_{K,L} \ll 0$ (figure 4.4). En ce qui concerne l'interpolation linéaire, le minimum et le maximum de la solution approximative ne sont pas préservés localement. Lors du développement du schéma, on a constaté que l'interpolation linéaire de la solution aux interfaces pouvait faire diverger le schéma : l'approximation géométrique a donc été privilégiée.

4.4 Calcul des flux d'interface

4.4.1 Opérateur de convection $C(\phi_{\sigma,+})$

L'approximation discrète du flux convectif entre les volumes K et L est calculée à l'aide du schéma amont :

$$\int_{K/L} (\underline{v}\phi(\underline{x})) \cdot \underline{n}(\underline{x}) dS \approx m(\sigma_{K,L})v_{\sigma}\phi_{\sigma,+}$$

où :

- $v_{\sigma} = \underline{v}(t = t_{n+1}) \cdot \underline{n}_{K,L}$ est une approximation de la vitesse normale à l'interface σ au temps $t = t_{n+1}$;
- $\phi_{\sigma,+} = \begin{cases} \phi_K^{n+1}, & v_{\sigma} \geq 0 \\ \phi_L^{n+1}, & \text{autrement} \end{cases}$.

4.4.2 Opérateur de diffusion $D(\phi_K, \phi_L)$

Considérons les volumes de contrôle adjacents K et L d'interface $\sigma_{K,L}$. Le flux diffusif total du volume K au volume L est approximé à l'aide de l'expression

$$\int_{K/L} \alpha \nabla \phi(\underline{x}) \underline{n}(\underline{x}) dS \approx \alpha_{\sigma} \tau_{K,L} (\phi_L - \phi_K) ,$$

où :

- α_{σ} est le coefficient de diffusivité à l'interface σ ;
- $\tau_{K,L}$ est la transmitivité de l'interface $\sigma_{K,L}$.

Calcul du coefficient de diffusivité

Pour un cas générique, le coefficient de diffusivité \mathcal{A} est un tenseur d'ordre 2 qui dépend de la direction et de la position. Pour avoir une bonne approximation du flux entre les point X_K et X_L , le coefficient de diffusivité est approximé comme suit :

1. Calcul de la valeur moyenne pour chacun des volumes de contrôle :

$$\mathcal{A}_K = \frac{1}{m(K)} \int_K \mathcal{A}(\underline{x}) dV = \mathcal{A}(X_K).$$

2. Calcul de la valeur absolue de la projection dans la direction normale à l'interface :

$$\alpha_{K,\sigma} = |\mathcal{A}_K \cdot \underline{n}_\sigma|.$$

3. Interpolation à l'aide d'une moyenne géométrique sur l'interface ;

$$\alpha_\sigma = \begin{cases} \frac{m(K)\alpha_{K,\sigma} + m(L)\alpha_{L,\sigma}}{m(K) + m(L)} & \sigma \in \mathcal{E}_{int} \\ \alpha_{K,\sigma} & \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \end{cases}.$$

Anti-diffusion

On utilise une dérivée amont pour discrétiser le terme de convection. On rappelle que cette dérivée introduit implicitement de la diffusion numérique. Pour les problèmes qui demandent une plus grande précision (tels ceux où l'on veut calculer les coefficients de portance et de traînée), le coefficient de diffusion moléculaire est ajusté avec le schéma "loi de puissance" :

$$\alpha_\sigma = \alpha_\sigma \cdot \max(0, (1 - 0.1Re_l)^5), \quad Re_l = \frac{|v_\sigma^{n+1}| \|X_L - X_K\|}{\alpha_\sigma}.$$

Remarque. Cet ajustement du coefficient de diffusion moléculaire permet de conserver les propriétés du schéma. Le schéma reste consistant puisque $h \rightarrow 0 \Rightarrow Re_l \rightarrow 0$ et le coefficient de diffusion tend vers sa valeur réelle. De plus, la stabilité du schéma est conservée puisque le terme de diffusion numérique introduit par la discrétisation amont du terme de convection n'est pas modifié.

4.5 Opérateur d'approximation du gradient $Grad(\phi)$

A priori, puisque nos fonctions d'approximation sont constantes par volume de contrôle, on ne peut pas calculer explicitement le gradient d'une fonction sur un volume. Pour

calculer un gradient , on procède avec l'approximation suivante.

Le gradient $\nabla\phi$ d'une fonction scalaire ϕ sur un volume de contrôle K est calculé à partir du gradient normal aux interfaces, ce dernier étant connu. On suppose que la projection du gradient pour le volume de contrôle K sur l'interface $\sigma_{K,L}$ est égale au gradient normal à l'interface :

$$\nabla\phi_K \cdot \underline{n}_{K,L} = (\nabla\phi)_{\sigma_{k,L}} , \quad (4.5)$$

$$(\nabla\phi)_{\sigma_{k,L}} = \frac{\tau_\sigma}{m(\sigma)} (\phi_L - \phi_K) . \quad (4.6)$$

En appliquant l'équation (4.5) à toutes les interfaces de la frontière du volume K , on obtient le système d'équations

$$\begin{bmatrix} \underline{n}_{\sigma_1} \\ \vdots \\ \underline{n}_{\sigma_n} \end{bmatrix} [\nabla\phi_K] = \begin{bmatrix} (\nabla\phi)_{\sigma_1} \\ \vdots \\ (\nabla\phi)_{\sigma_n} \end{bmatrix}$$

où, de façon plus compacte

$$N\nabla\phi_K = \nabla\phi_\sigma .$$

En général, ce système d'équations est incompatible. La "meilleure" solution pour ce système d'équations est calculée avec la méthode des moindres carrés : c'est le système d'équations

$$N^t N\nabla\phi_K = N^t \nabla\phi_\sigma .$$

qui est résolu.

4.6 Équations discrètes, opérateur de convection-diffusion $CD(\dots)$

Pour tout volume de contrôle K , les équations de convection-diffusion peuvent être écrites sous la forme :

$$\int_K \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} dV + \int_{\partial K} [\underline{v}(t=t_{n+1}) \phi^{n+1} - \alpha \nabla \phi^{n+1}] \cdot \underline{n} dA = \int_K s_\phi^n dV \quad (4.7)$$

L'évaluation des intégrales de surface à l'aide des opérateurs de convection et de diffusion ainsi que l'évaluation des intégrales volumiques nous donne :

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \left[m(\sigma) v_\sigma(t=t_{n+1}) \phi_{\sigma,+}^{n+1} - \alpha_{\sigma} \tau_\sigma (\phi_L^{n+1} - \phi_K^{n+1}) \right] + m(K) \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} = m(K) s_\phi^n \quad (4.8)$$

Les termes sources pour les différentes équations sont les suivants¹ :

1. Composantes du vecteur vitesse :

$$m(K) s_v^n = -m(K) \nabla P_K^n.$$

2. Énergie cinétique turbulente :

$$m(K) s_\kappa = m(K) \left[2\nu_t^n \sum_i \sum_j \left((\nabla v_i^{n+1})_j + (\nabla v_j^{n+1})_i \right)^2 - \epsilon_K^n \right],$$

3. Énergie de dissipation turbulente :

$$m(K) s_\epsilon = m(K) \frac{\epsilon_K^n}{k_K^n} \left[C_{\epsilon_1} \left[2\nu_t^n \sum_i \sum_j \left((\nabla v_i^{n+1})_j + (\nabla v_j^{n+1})_i \right)^2 \right] - C_{\epsilon_2} \epsilon_K^n \right].$$

¹Bien sur, ces termes sources peuvent être modifiés en fonction du problème considéré.

4.7 Projection

Après l'étape de convection-diffusion, l'équation de conservation de la masse n'est pas satisfaite. Lorsque la densité est constante, la vitesse n'est pas nécessairement à divergence nulle. Une étape de projection est donc nécessaire. Celle-ci se déroule en deux étapes :

1. Une étape d'extension (de ré-interpolation) sur les interfaces qui permet d'éviter les faux modes de pression.
2. Une étape de projection pour corriger la pression et la vitesse.

Opérateur d'extension $E(\dots)$.

Pour pouvoir procéder à la projection de la vitesse dans l'espace des fonctions solénoïdales, la vitesse doit être correctement définie sur les interfaces. Puisque le nombre de faces pour chacun des volumes de contrôle est variable, cette vitesse d'interface ne peut être définie à l'aide de la même fonction d'interpolation pour tous les volumes de contrôle. La vitesse d'interface ne peut donc pas être calculée explicitement.

La vitesse d'interface est calculée implicitement. Au même titre que la vitesse sur les volumes de contrôle, l'évolution de la vitesse sur les interfaces doit satisfaire les équations de Navier-Stokes. Soit $\underline{v}_{K,L}$ la vitesse à l'interface $\sigma_{K,L}$, son évolution du temps $t = t_n$ au temps $t = t_{n+1/2}$ doit satisfaire l'équation

$$\left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} = -\nabla \cdot [\underline{v}(t = t_{n+1}) \otimes \underline{v}^{n+1/2} - \nu \nabla \underline{v}^{n+1/2}] + \nabla P^n + \underline{f}^n \quad (4.9)$$

En intégrant le membre de gauche de l'équation (4.9) sur les volumes de contrôle associés à l'interface $\sigma_{K,L}$, on a :

$$\left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{\sigma, t=t_{n+1}} = \frac{m(K)}{m(K) + m(L)} \left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{K, t=t_{n+1}} + \frac{m(L)}{m(K) + m(L)} \left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{L, t=t_{n+1}}$$

où

$$\left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{K, t=t_{n+1}} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} \right|_{L, t=t_{n+1}}$$

désignent les approximations discrètes de la dérivée temporelle sur les volumes K et L . La vitesse d'interface est calculée à partir de l'expression

$$\begin{aligned} \underline{v}_\sigma^{n+1/2} &= E(\underline{v}_K, \underline{v}_L) \\ &= \underline{v}_\sigma^n + \begin{cases} \frac{m(K)(\underline{v}_K^{n+1/2} - \underline{v}_K^n) + m(L)(\underline{v}_L^{n+1/2} - \underline{v}_L^n)}{m(K) + m(L)}, & \sigma \in \mathcal{E}_{int} \\ (\underline{v}_K^{n+1/2} - \underline{v}_K), & \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \end{cases} \end{aligned}$$

pour un écoulement permanent. Lorsque l'écoulement est transitoire, la vitesse d'interface est déterminée par l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \underline{v}_\sigma^{n+1/2} &= E(\underline{v}_K, \underline{v}_L) \\ &= \frac{4\underline{v}_\sigma^n - \underline{v}_\sigma^{n-1}}{3} + \frac{1}{3} \begin{cases} \frac{m(K)(3\underline{v}_K^{n+1/2} - 4\underline{v}_K^n + \underline{v}_K^{n-1}) + m(L)(3\underline{v}_L^{n+1/2} - 4\underline{v}_L^n + \underline{v}_L^{n-1})}{m(K) + m(L)}, & \sigma \in \mathcal{E}_{int} \\ (3\underline{v}_K^{n+1/2} - 4\underline{v}_K^n + \underline{v}_K^{n-1}), & \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \end{cases} \end{aligned}$$

Opérateur de projection $P(\dots)$.

L'opérateur de projection est utilisé pour calculer un champ convecteur à divergence nulle et évaluer le champ de pression. Cet opérateur est défini à partir des équations

$$\beta \frac{\underline{v}^{n+1} - \underline{v}^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla (\delta P^{n+1}) \quad (4.10)$$

$$\nabla \cdot \underline{v}^{n+1} = 0 \quad (4.11)$$

On rappelle que β est un paramètre qui permet de faire de l'interpolation ou de l'extrapolation (section 3.3.1).

L'opérateur de projection est appliqué en quatre étapes :

1. Correction du champ de pression.
2. Correction du champ convecteur.
3. Mise-à-jour de la vitesse sur les volumes de contrôle.
4. Mise-à-jour du gradient de pression sur les volumes de contrôle.

Correction de la pression. Pour obtenir une équation dont la seule inconnue est la correction de pression, on considère l'équation (4.10) que l'on substitue dans l'équation (4.11) :

$$-\frac{\beta}{\delta t} \nabla \cdot \underline{v}^{n+1/2} = -\nabla \cdot \nabla (\delta P^{n+1}) .$$

Ensuite, cette équation est intégrée sur un volume générique K et le théorème de Gauss est appliqué pour obtenir l'intégrale de surface

$$\int_{\partial K} \nabla (\delta P^{n+1}) \cdot \underline{n} dS = \int_{\partial K} \frac{\beta}{\delta t} \underline{v}^{n+1/2} \cdot \underline{n} dS \quad (4.12)$$

L'opérateur de diffusion permet d'obtenir l'équation discrète

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma (\delta P_L - \delta P_K) = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \frac{\beta}{\delta t} m(\sigma) v_\sigma^{n+1/2} .$$

Deux types de conditions de bord peuvent être imposées :

1. vitesse normale v_b imposée :

$$\nabla (\delta P^{n+1}) \cdot \underline{n} = \frac{\beta}{\delta t} (v^{n+1/2} - v_b) ;$$

2. pression imposée :

$$\delta P = P^{n+1} - P^n .$$

Correction du champ convecteur. La résolution de l'équation (4.12) sur tout le domaine permet de projeter le champ de vitesse dans l'espace des fonctions solénoïdales. Après cette résolution, la vitesse d'interface est corrigée à l'aide de l'équation (4.10) :

$$v_\sigma^{n+1} = v_\sigma^{n+1/2} - \frac{\delta t}{\beta} \frac{\tau_\sigma}{m(\sigma)} (\delta P_L - \delta P_K) .$$

Mise-à-jour de la vitesse sur les volumes de contrôle. Lorsque la vitesse est un champ solénoïdal et que les volumes de contrôle sont des tétraèdres, la vitesse sur les volumes de contrôle doit satisfaire l'équation

$$\underline{v}_K^{n+1} \cdot \underline{n}_\sigma = v_\sigma^{n+1}$$

sur toutes les interfaces (Cayre [19]). Toutefois, puisque dans notre cas les volumes de contrôle ne sont pas nécessairement des tétraèdres, cette équation ne peut être satisfaite pour toutes les interfaces. Pour tous les volumes de contrôle, c'est l'équation (4.10) qui est utilisée. La correction de vitesse est calculée en résolvant le système d'équations

$$\begin{bmatrix} \underline{n}_{\sigma_1} \\ \vdots \\ \underline{n}_{\sigma_n} \end{bmatrix} [\delta \underline{v}_K^{n+1}] = \begin{bmatrix} -W_1 \frac{\delta t}{\beta} (\nabla \delta P^{n+1})_{\sigma_1} \\ \vdots \\ -W_n \frac{\delta t}{\beta} (\nabla \delta P^{n+1})_{\sigma_n} \end{bmatrix}$$

où :

- $\delta \underline{v}_K^{n+1} = \underline{v}^{n+1} - \underline{v}^{n+1/2}$;
- $-\frac{\delta t}{\beta} (\nabla \delta P^{n+1})_{\sigma_{k,L}} = -\frac{\delta t}{\beta} \frac{\tau_\sigma}{m(\sigma)} (\delta P_L - \delta P_K) = \delta v_{\sigma_{k,L}}^{n+1}$, est la correction de vitesse sur l'interface $\sigma_{K,L}$;
- $W_\sigma = \begin{cases} \epsilon_\infty, & \text{paroi imperméable} \\ 1 & \text{autrement} \end{cases}$;
- ϵ_∞ est un grand nombre.

Ce système d'équations est généralement sur contraint (incompatible) et la solution est calculée à l'aide d'une minimisation par la technique des moindres carrés.

Le paramètre W_σ est utilisé pour s'assurer que pour tous les volumes de contrôle adjacents aux parois, la vitesse au bord du domaine respecte la physique du problème. Les faux puits ou les fausses sources de masse près des parois imperméables sont ainsi évités.

Mise-à-jour du gradient de pression sur les volumes de contrôle. Le gradient de pression est approximé à l'aide de l'opérateur d'approximation discrète du gradient (page 70) :

$$\nabla P = Grad(P).$$

4.8 Discrétisation des lois de paroi pour les écoulements turbulents

Dans la section 2.1.3 (page 37) les conditions de bord pour les parois imperméables ont été présentées. On rappelle que ces conditions de bord modélisent l'influence de la paroi sur l'écoulement. Ces conditions de bord sont les suivantes :

- $\underline{v} \cdot \underline{n} = 0,$
- $(\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial n} (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_1) = -\rho (u^*)^2,$
- $(\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial n} (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_2) = 0,$
- $\tau_1 = \frac{v}{|\underline{v}|}, \tau_2 = \underline{n} \times \underline{\tau}_1,$
- $k = \frac{(u^*)^2}{\sqrt{C_\mu}},$
- $\epsilon = \frac{|u^*|^3}{\sqrt{K}y}, K = 0.41$ est la constante de Karman,
- u^* est la vitesse de frottement, elle satisfait l'équation

$$\begin{aligned}
 f(y^+) = \frac{|u_{\tau_1}|}{u^*} &= 2.5 \ln(1 + 0.4y^+) \\
 &+ 7.8 \left(1 - \exp\left(-\frac{y^+}{11}\right) - \frac{y^+}{11} \exp(-0.33y^+) \right) \quad (4.13) \\
 y^+ &= \frac{yu^*}{\nu}
 \end{aligned}$$

L'équation (4.13) doit être résolue sur toutes les faces qui discrétisent les parois imperméables. Pour résoudre cette équation, on emploie un algorithme qui a été utilisé avec succès par Cardot[17]. Cet algorithme est basé sur une méthode de sur-relaxation et il est présenté à la page 78.

Soit σ l'interface du volume K sur la frontière du domaine, $y = d_{K,\sigma}/10$ la distance initiale entre la paroi physique et la frontière de calcul et $v_{\tau_1} = \underline{v}^n \cdot \underline{\tau}_1$ la vitesse tangente à la paroi.

1. Poser $u_0^* = \frac{|v_{\tau_1}|}{f\left(\frac{y \cdot u_0^*}{\nu}\right)}$

- Pour $k = 1, 2, \dots$

- Pour $i = 1, 2, \dots, 5$

- Poser $u_i^* = \frac{|v_{\tau_1}|}{f\left(\frac{y \cdot u_i^*}{\nu}\right)}$

- Si $\frac{|u_5^* - u_4^*|}{|u_4^*|} < \epsilon$

- alors $u^* = u_5^*$ et fin.

- sinon, poser

$$u_0^* = (1 - \theta)^4 \cdot u_1^* + 4(1 - \theta)^3 \theta \cdot u_2^* + 6(1 - \theta)^2 \theta^2 \cdot u_3^* + 4(1 - \theta) \theta^3 \cdot u_4^* + \theta^4 \cdot u_5^*$$

et recommencer, θ étant un paramètre de relaxation dont la valeur est posée à 0.5.

2. A convergence, poser $y^+ = \frac{y \cdot u^*}{\nu}$,

- $y^+ \geq 11.63$, y^+ appartient à la sous-couche logarithmique et la solution est valide.

- si $y^+ < 11.63$, poser $y = \frac{11.63\nu}{u^*}$ et recommencer la résolution pour u^* , aller en 1.
-

FIG. 4.5 – Algorithme de calcul de la vitesse de frottement

Intégrales de bord pour les parois imperméables

En 3D, la vitesse est égale à la somme de trois vecteurs orthogonaux :

$$\underline{v} = (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_1)\underline{\tau}_1 + (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_2)\underline{\tau}_2 + (\underline{v} \cdot \underline{n})\underline{n},$$

où $\underline{\tau}_1, \underline{\tau}_2$ sont des vecteurs tangents à la paroi et \underline{n} la normale à la paroi. Puisque

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = \underline{v} \cdot \underline{\tau}_2 = 0,$$

l'égalité suivante est vérifiée :

$$\mu_e \nabla \underline{v} \cdot \underline{n} = \mu_e \frac{\partial}{\partial n} [(\underline{v} \cdot \underline{\tau}_1)\underline{\tau}_1 + (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_2)\underline{\tau}_2 + (\underline{v} \cdot \underline{n})\underline{n}] = \mu_e \frac{\partial ((\underline{v} \cdot \underline{\tau}_1)\underline{\tau}_1)}{\partial n} = -\rho(u^*)^2 \underline{\tau}_1.$$

Lorsque l'écoulement est turbulent, la dérivée normale à la paroi est calculée avec cette expression.

Pour les parois imperméables, les intégrales de bord sont les suivantes :

1. quantité de mouvement : $\int_{\sigma} \mu_e \nabla \underline{v} \cdot \underline{n} dA = -m(\sigma) \rho (u^*)^2 \underline{\tau}_1;$
2. énergie turbulente : $\int_{\sigma} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\alpha_k} \right) \nabla k \cdot \underline{n} dA = \tau_{\sigma} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\alpha_k} \right) \left(k_K - \frac{(u^*)^2}{\sqrt{C_{\mu}}} \right);$
3. dissipation turbulente : $\int_{\sigma} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\alpha_{\epsilon}} \right) \nabla \epsilon \cdot \underline{n} dA = \tau_{\sigma} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\alpha_{\epsilon}} \right) \left(\epsilon_K - \frac{|u^*|^3}{\sqrt{Ky}} \right).$

4.9 Algorithme de résolution

En résumé, lorsque la densité est constante, la résolution d'un problème d'écoulement se déroule comme suit :

- Étant donnée une solution initiale $\underline{v}^{-1}, P^{-1}, \phi^0$:
 - Appliquer l'opérateur de projection : $(\underline{v}^0, P^0, \nabla P^0) = P(\dots)$.
- Étant donnée la solution $\underline{v}^n, p^n, \phi^n$:
 - pour un écoulement turbulent, calculer les coefficients de diffusion turbulente et la vitesse de frottement sur la paroi ;
 - appliquer l'opérateur de convection-diffusion à la vitesse : $\underline{v}^{n+1/2} = CD(\dots)$;
 - appliquer l'opérateur de projection : $(\underline{v}^{n+1}, P^{n+1}, \nabla P^{n+1}) = P(\dots)$;
 - appliquer l'opérateur de convection-diffusion aux champs scalaires telle l'énergie cinétique turbulente et la température : $\phi^{n+1} = CD(\dots)$.

4.10 Remarques et résultats théoriques

Notre schéma permet la résolution d'écoulements incompressibles 3D dans des géométries complexes. Les bilans sont calculés sur des volumes de contrôle arbitraires. Lorsque les volumes de contrôle ne possèdent qu'une seule position de calcul des flux, les résultats théoriques présentés dans la section 3.2.4 s'appliquent à notre schéma :

1. le schéma est convergent et l'erreur d'approximation est $\mathcal{O}(h)$, h étant le diamètre de la plus grande maille du maillage ;
2. lorsqu'il s'applique, le principe du maximum est respecté pour toutes les variables scalaires.

4.10.1 Maillage

On rappelle que pour démontrer la convergence du schéma, le maillage doit être “admissible” :

1. une seule position de référence est associée à chacun des volumes de contrôle ;
2. la droite qui relie les positions de calcul des flux de deux volumes de contrôles adjacents est perpendiculaire à l’interface qui les sépare ;
3. les transmittivités de toutes les interfaces du maillage doivent être positives.

On rappelle que notre domaine de calcul est en premier lieu discrétisé avec des tétraèdres. Ensuite, nos volumes de contrôle sont construits en suivant les conditions présentées dans la section 4.2.2 à la page 66. Dans tous les cas, notre approximation des flux convectifs et diffusifs entre deux volumes de contrôle est consistante. Toutefois les résultats théoriques pourraient ne pas s’appliquer dans les situations suivantes :

1. un volume de contrôle possède plusieurs positions de calcul des flux diffusifs qui n’occupent pas la même position ;
2. un volume de contrôle chevauche deux milieux hétérogènes ;
3. un point de calcul des flux est à l’extérieur du domaine.

Lorsqu’un volume de contrôle a plusieurs positions de calcul des flux qui occupent des positions différentes, la valeur de l’inconnue associée à ce volume est supposée égale en au moins deux positions différentes. Localement, l’ordre d’approximation des flux peut ne pas être suffisant et on ne peut pas évaluer l’erreur à convergence. Dans Eymard[36], il est toutefois mentionné que le schéma peut continuer à converger vers la bonne solution lorsque

$$\frac{\sum_{\sigma \in \mathcal{E}} m(\sigma)}{\sum_{\sigma \in \Omega} m(\sigma)} \ll 1,$$

où $\sigma \in \mathcal{E}$ est l’ensemble des interfaces où l’approximation du flux diffusif n’est pas consistante et $\sigma \in \Omega$ est l’ensemble des interfaces du domaine.

Lorsque les éléments qui séparent deux milieux hétérogènes A et B (une phase liquide et une phase solide par exemple) sont séparés par une interface à transmittivité négative, ils

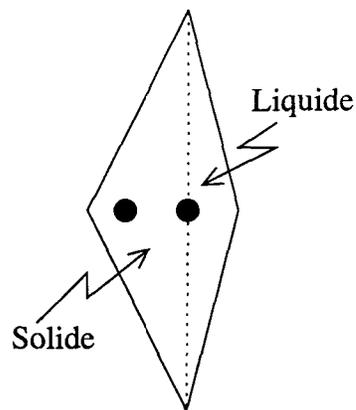


FIG. 4.6 – Volume de contrôle chevauchant deux milieux hétérogènes

sont combinés en un seul volume de contrôle qui chevauche deux milieux dont les propriétés physiques ne sont pas les mêmes (figure 4.6).

Lorsqu'une interface de bord à une transmittivité négative et que la condition de bord est de Dirichlet ou de Robin, on doit imposer la solution au volume associé à l'interface. En effet, si on ne procède pas ainsi, le schéma peut diverger (lors d'expérimentations, c'est ce qui a été observé). Pour une condition de Dirichlet, on impose la valeur à l'interface et, pour la condition de Robin, la valeur à l'infini. Une solution physiquement réaliste peut alors être obtenue. Néanmoins, localement, on ne peut pas évaluer l'erreur à convergence. On tient à préciser que de très bons résultats ont été obtenus avec ce traitement (le problème de l'écoulement engendré par le déplacement d'une paroi du chapitre 7 par exemple).

4.10.2 Modèle de turbulence

Pour la mise-en-oeuvre du schéma on a utilisé le modèle de turbulence $k - \epsilon$. On tient à préciser que notre schéma n'est aucunement dépendant de ce modèle de turbulence. Pour des problèmes où le modèle $k - \epsilon$ n'est pas adéquat, il serait possible d'utiliser d'autres modèles de turbulence.

Chapitre 5

Résolution numérique des systèmes d'équations linéaires

Introduction

La discrétisation temporelle privilégiée par notre schéma implique la résolution d'un ensemble de systèmes d'équations linéaires¹

$$A\underline{x} = \underline{b}$$

où :

- A est la matrice des coefficients ;
- \underline{x} est le vecteur des inconnues ;
- \underline{b} est le vecteur des termes constants.

Dans ce chapitre, on présente les algorithmes qui ont été mis en oeuvre avec notre schéma de résolution d'écoulements incompressibles. De plus, un rappel sur la classification des systèmes d'équations linéaires et le conditionnement de ces systèmes est présenté. Les références pour ce chapitre sont les suivantes :

1. caractérisation de la matrice des coefficients : Atkinson et al.[2], Ciarlet[27] et Greenbaum[41] ;
2. méthodes directes de résolution : Atkinson et al.[2], Cuvelier[34] et Fortin[38] ;
3. méthodes itératives de résolution : Cuvelier[34] et Greenbaum[41] ;
4. algorithmes de préconditionnement : Ciarlet[27] et Greenbaum[41].

¹Afin d'alléger la notation pour ce chapitre, les matrices seront simplement notées à l'aide d'une lettre majuscule.

5.1 Caractérisation de la matrice des coefficients et détermination des valeurs propres

5.1.1 Caractérisation de la matrice des coefficients

Il est bien connu que le comportement des méthodes de résolution numérique des systèmes d'équations linéaires dépendent du type de matrice considérée. Ces matrices peuvent être qualifiées comme suit :

1. matrice symétrique,

$$a_{ij} = a_{ji}, \quad 1 \leq i, j \leq n;$$

2. matrice symétrique à diagonale strictement dominante,

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad 0 \leq i \leq n;$$

3. matrice symétrique à diagonale faiblement dominante,

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad 0 \leq i \leq n;$$

4. matrice symétrique définie positive,

$$\underline{x}^t A \underline{x} > 0, \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \underline{x}^t \neq (0, 0, \dots, 0);$$

5. matrice symétrique semi-définie positive,

$$\underline{x}^t A \underline{x} \geq 0, \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \underline{x}^t \neq (0, 0, \dots, 0).$$

Une matrice symétrique à diagonale positive dominante est toujours définie positive. De plus, une matrice symétrique à diagonale positive faiblement dominante est au moins semi-définie positive et peut être définie positive.

5.1.2 Détermination des valeurs propres

Les méthodes de résolution numérique des systèmes d'équations linéaires sont fortement dépendantes des valeurs propres de la matrice des coefficients. Malheureusement, dans la pratique, il est aussi coûteux de calculer ces valeurs propres que de résoudre le système d'équations. On s'intéressera plutôt au domaine de définition des valeurs propres.

Pour toutes les matrices carrées, le théorème de Gerschgorin permet de connaître le domaine de définition des valeurs propres en fonction des coefficients de la matrice. Soit A une matrice carrée et

$$R_i(A) = \sum_{j, j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad 0 \leq i \leq n,$$

il peut être démontré que toutes les valeurs propres de A sont situées à l'intérieur de l'union des disques

$$\bigcup_{i=1}^n \{z \in \mathbb{C} \mid |z - a_{ii}| \leq R_i(A)\}, \quad 0 \leq i \leq n.$$

5.1.3 Matrices des coefficients associées à notre schéma

Pour notre schéma, la matrice des coefficients pour les équations de convection-diffusion est une matrice non-symétrique à diagonale positive dominante. La matrice pour la correction de pression est, quant à elle, symétrique à diagonale positive faiblement dominante.

Dans tous les cas, la matrice des coefficients est une **matrice creuse** (une matrice dont le nombre de coefficients nuls est largement supérieur au nombre de coefficients non-nuls). En effet, pour tout volume K , seules les inconnues associées aux volumes adjacents à K pourront générer des termes non-nuls dans la matrice.

Équations discrètes de convection-diffusion

On rappelle que toutes les équations discrètes de convection-diffusion peuvent être écrites sous la forme

$$m(K) \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} [m(\sigma) v_\sigma (t = t_{n+1}) \phi_{\sigma,+}^{n+1} - \alpha_\sigma \tau_\sigma (\phi_L^{n+1} - \phi_K^{n+1})] = m(K) s_\phi^n \quad (5.1)$$

où :

1. \mathcal{E}_K est l'ensemble des interfaces de la frontière du volume K ;
2. $\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} m(\sigma) v_\sigma = 0$;
3. $\phi_{\sigma,+}^{n+1} = \begin{cases} \phi_K, & v_\sigma \geq 0 \\ \phi_L, & \text{autrement} \end{cases}$.

Puisque les flux sont toujours conservés, l'inéquation

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \alpha_\sigma \tau_\sigma \geq \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_k, \sigma \in \mathcal{E}_{int}} \alpha_\sigma \tau_\sigma \quad (5.2)$$

est toujours satisfaite, \mathcal{E}_{int} étant l'ensemble des interfaces qui ne sont pas sur la frontière du domaine. Pour les termes de convection, l'inéquation

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K, v_\sigma \geq 0} m(\sigma) v_\sigma \geq \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K, \sigma \in \mathcal{E}_{int}, v_\sigma < 0} |m(\sigma) v_\sigma| \quad (5.3)$$

est elle aussi toujours satisfaite :

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} m(\sigma) v_\sigma = 0 \Rightarrow \sum_{\sigma, v_\sigma \geq 0} m(\sigma) v_\sigma = - \sum_{\sigma, v_\sigma < 0} m(\sigma) v_\sigma.$$

Puisque les inéquations (5.2) et (5.3) sont satisfaites et que le terme transitoire est toujours présent, la diagonale principale est positive et strictement dominante. La matrice est donc toujours inversible pour toute valeur de δt . De plus, la matrice inverse est à coefficient tous positifs. Cette propriétés garantit le principe de positivité discrète pour ϕ_K^n en tout temps et sur tout le domaine.

Soit A une matrice carrée inversible d'ordre n .

1. Construction de la matrice triangulaire supérieure U

Pour $i = 1, \dots, n - 1$

- Pour $j = i + 1, \dots, n$
 - Poser $m_{ji} = a_{ji}/a_{ii}$.
 - Pour $k = i + 1, \dots, n$.
 - Poser $a_{jk} = a_{jk} - m_{ji} \cdot a_{ik}$.
 - Poser $b_j = b_j - m_{ji} \cdot b_i$.

2. Résolution, une remontée triangulaire

Poser $x_n = b_n/a_{nn}$. Pour $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$

- Poser $x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right) / a_{ii}$.
-

FIG. 5.1 – Algorithme de Gauss

Pour nos systèmes d'équations de convection-diffusion, le théorème de Gershgorin permet d'affirmer que :

1. la partie réelle des valeurs propres sera toujours positive ;
2. une valeur propre nulle n'est pas une valeur propre admissible.

Matrice de correction de pression

Pour la matrice de correction de pression, seul les termes de diffusion sont présents. L'inéquation (5.2) est satisfaite et la matrice est symétrique à diagonale faiblement dominante. Cette matrice est au moins semi-définie positive et peut être définie positive.

5.2 Méthodes directes de résolution des équations linéaires

Les méthodes directes de résolution numérique des systèmes d'équations linéaires permettent de calculer directement la solution du système d'équations. Parmi ces méthodes, on retrouve les algorithmes de Gauss, la factorisation LU et la factorisation de Choleski (figures 5.1 à 5.3).

5.2.1 Algorithme de Gauss

L'algorithme de Gauss consiste à ramener la matrice A à une matrice U triangulaire supérieure et de procéder à la résolution du système linéaire équivalent. Lorsque A est inversible la matrice U peut toujours être calculée. Pour obtenir ce résultat, il est toutefois nécessaire d'adopter une stratégie de traitement des pivots nuls :

1. pivot partiel : lors de l'élimination de la colonne k , si $a_{kk} = 0$, on permute la ligne k avec la ligne i ($i > k$) dont l'élément $|a_{ik}|$ est le plus grand ;
2. pivot total : lors de l'élimination de la colonne k , si $a_{kk} = 0$, on choisit l'élément $|a_{ij}|$ ($i > k$), le plus grand, et on permute la colonne j avec la colonne k (ce qui modifie l'ordre des inconnues), puis on permute la ligne k avec la ligne i .

De plus, pour éviter les erreurs d'arrondi, une stratégie de permutation des lignes doit être définie. Par exemple, avant l'élimination de la colonne k , la ligne k sera permutée avec la ligne i ($i > k$) dont l'élément $|a_{ik}|$ est le plus grand. Toutefois, pour une matrice A à diagonale strictement dominante, aucune stratégie de pivot n'est nécessaire. Pour ces matrices, il n'y a pas d'accroissement des erreurs d'arrondi ni de pivots nuls.

Cet algorithme nécessite le stockage de tous les éléments de la matrice des coefficients². De plus le nombre d'opérations arithmétiques nécessaire pour toute la résolution est :

$$\frac{4n^3 + 9n^2 - 7n}{6}.$$

5.2.2 Factorisation LU

Pour cette méthode, la matrice A est factorisée (décomposée) en un produit d'une matrice triangulaire inférieure L et une matrice triangulaire supérieure U :

$$A = LU.$$

²Pour l'algorithme de Gauss, la factorisation LU et la décomposition de Choleski, le coût du stockage et le nombre d'opérations arithmétiques peuvent être significativement réduits en réduisant la largeur de bande de la matrice.

Soit A une matrice carrée inversible d'ordre n .

1. Factorisation LU , décomposition de Crout

- Première colonne de L :

- Pour $i = 1, \dots, n$, poser $l_{i1} = a_{i1}$

- Première ligne de U :

- Pour $i = 2, \dots, n$, poser $u_{1i} = a_{1i}/l_{11}$

- Pour $i = 2, \dots, n - 1$

- Calcul du pivot : $l_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{ki}$

- Pour $j = i + 1, \dots, n$.

- Calcul de la i^e colonne de L : $l_{ji} = a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki}$

- Calcul de la i^e ligne de U : $u_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} \right) / l_{ii}$

- Poser $l_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}u_{kn}$.

2. Descente et remontée triangulaires

- Descente triangulaire pour résoudre $L\underline{y} = \underline{b}$

- Poser $y_1 = b_1/l_{11}$.

- Pour $i = 2, \dots, n$, $y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k \right) / l_{ii}$

- Remontée triangulaire pour résoudre $U\underline{x} = \underline{y}$

- Poser $x_n = y_n$.

- Pour $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$, $x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik}x_k$

FIG. 5.2 – Factorisation LU , décomposition de Crout

La solution du système $A\underline{x} = \underline{b}$ est ensuite obtenue en résolvant les systèmes

$$L\underline{y} = \underline{b} \quad \text{et} \quad U\underline{x} = \underline{y}.$$

Les solutions de ces deux systèmes sont directement calculées à l'aide d'une descente et d'une remontée triangulaire.

Puisque les matrices L et U ne sont pas uniquement définies, la diagonale principale de la matrice L (décomposition de Doolittle) ou de la matrice U (décomposition de Crout) est imposée égale à 1. Tout comme pour la méthode de Gauss, il faut adopter une stratégie de traitement des pivots nuls. Dans ce cas-ci, la stratégie est plus complexe, l'historique des permutations devant être conservé. Cependant, lorsque l'algorithme de Gauss ne nécessite pas de pivots (lorsque A est à diagonale strictement dominante), la matrice A pourra toujours être factorisée sans permutation.

Tout comme pour l'algorithme de Gauss, cet algorithme nécessite l'entreposage de tous les coefficients (d'une matrice pleine). Le nombre d'opérations arithmétiques nécessaire est

- $\frac{4n^3 - 3n^2 - n}{6}$ pour la décomposition,
- $2n^2 - n$ pour la remontée et la descente triangulaires.

Ainsi, $\frac{4n^3 + 9n^2 - 7n}{6}$ opérations arithmétiques sont nécessaire pour décomposer et résoudre un système, le même que pour une élimination de Gauss. Cet algorithme est très avantageux lorsque plusieurs systèmes d'équations ont la même matrice des coefficients. En effet, la résolution de tous les systèmes d'équations ne nécessite qu'une factorisation et pour chacun des systèmes, une remontée et une descente triangulaires sont requises.

5.2.3 Factorisation de Choleski

Lorsque A est symétrique définie positive, il peut être démontré qu'il existe une matrice triangulaire inférieure C telle que

$$CC^t = A.$$

Soit A une matrice carrée symétrique inversible d'ordre n .

1. Factorisation de Choleski $CC^t = A$ (C est une matrice triangulaire inférieure).

- Poser $c_{11} = \sqrt{a_{11}}$
- Première colonne de C :
 - Pour $i = 2, \dots, n$, poser $c_{1i} = a_{1i}/c_{11}$
- Pour $k = 2, \dots, n$
 - Calcul du pivot :

$$c_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} c_{kj}c_{ki}}$$

- Pour $i = k + 1, \dots, n$.
 - Calcul de la i^e ligne de C :

$$c_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} c_{ij}c_{kj} \right) / c_{kk}$$

2. Descente et remontée triangulaires

- Descente triangulaire pour résoudre $C\underline{y} = \underline{b}$
 - Poser $y_1 = b_1/c_{11}$.
 - Pour $i = 2, \dots, n$,

$$y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} c_{ik}y_k \right) / c_{ii}$$

- Remontée triangulaire pour résoudre $C^t\underline{x} = \underline{y}$
 - Poser $x_n = y_n$.
 - Pour $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$,

$$x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^n c_{ki}x_k$$

FIG. 5.3 – Factorisation de Choleski

Cette factorisation est appelée factorisation (ou décomposition) de Choleski. Elle peut être obtenue de la factorisation LU en imposant $l_{ii} = u_{ii}$. Cette factorisation a l'avantage d'exiger un moins grand nombre d'opérations arithmétiques :

$$\frac{2n^3 + 15n^2 + n}{6}$$

(à peu près la moitié des opérations requises pour la méthode de Gauss et la factorisation LU).

5.2.4 Application des méthodes directes

Bien qu'on puisse toujours calculer la solution avec ces algorithmes, ils ne sont pas adaptés à nos systèmes d'équations. A priori, lorsqu'aucun algorithme de réduction de la largeur de bande n'est utilisé, tous ces algorithmes nécessitent le stockage de tous les coefficients de la matrice et un très grand nombre d'opérations arithmétiques.

En format double précision, le stockage de tous les coefficients d'une matrice requiert $8 \cdot n^2$ mots mémoire. Par exemple, pour un petit système avec 10000 variables, l'espace nécessaire au stockage de la matrice est de 800 mégaoctets.

Pour une station de travail équipé d'un microprocesseur Pentium III possédant une vitesse d'horloge de 733Mhz et capable d'effectuer 60 millions d'opérations arithmétiques par secondes (60 mégaflops), le temps nécessaire pour résoudre un seul système d'équations ou pour faire une factorisation LU est de 3 heures. Ce temps passe à 1 heure 30 minutes pour une factorisation de Choleski. Puisque la simulation d'un problème d'écoulement 3D requiert la résolution d'au moins 4 systèmes d'équations par pas de temps, il est indiscutable que ces méthodes ne sont pas adaptées à notre schéma.

5.3 Méthodes itératives de résolution numérique des systèmes d'équations linéaires

Les méthodes itératives permettent de résoudre les systèmes d'équations linéaires à l'aide d'une série d'approximations de la solution. À chaque itération, une nouvelle approxi-

mation de la solution

$$\underline{x}_{k+1} = \underline{x}_k + a_k \underline{p}_k$$

est calculée, a_k étant une matrice ou un scalaire et \underline{p}_k la direction de descente. Les algorithmes les plus simples sont :

1. la méthode de Jacobi : $a_k = D^{-1}$ où D est la matrice des éléments de la diagonale principale de A et $\underline{p}_k = \underline{b} - A\underline{x}_k$;
2. la méthode de Gauss-Siedel : $a_k = L^{-1}$ où L est la matrice des éléments de la partie triangulaire inférieure de A et $\underline{p}_k = \underline{b} - A\underline{x}_k$;
3. la méthode de relaxation (SOR) : $a_k = \omega^{-1}D - L$ où ω est un paramètre de relaxation, D est la matrice des éléments de la diagonale principale, L est la matrice des éléments de la partie triangulaire inférieure de A (excluant la diagonale principale) et $\underline{p}_k = \underline{b} - A\underline{x}_k$.

Malheureusement, pour tous ces algorithmes, la convergence est linéaire. Il n'y a donc pas d'accélération de la convergence lorsque le résidu $\underline{r}_k = \underline{b} - A\underline{x}_k$ diminue. Pour ces méthodes, le coefficient (ou la matrice) a_k et la direction de descente \underline{p}_k sont statiques. Aucun effort n'est fait pour les optimiser. Des méthodes itératives plus performantes peuvent être construites en procédant à des modifications appropriées du coefficient a_k et de la direction de descente \underline{p}_k . Ces méthodes itératives sont basées sur la minimisation de l'erreur $\|\underline{x} - \underline{x}_k\|$ (\underline{x} étant la solution) ou du résidu $\|\underline{r}_k - \underline{r}_{k-1}\|$. La prochaine direction de descente est calculée à l'aide d'une minimisation sur un espace vectoriel

$$\mathcal{V} = \text{span} \{ \underline{z}_i, \underline{z}_{i+1}, \dots, \underline{z}_k \} .$$

Ce sous-espace de dimension $k - i + 1$ est appelé **espace de Krilov**. Les vecteurs qui forment la base de cet espace sont orthogonaux. En général, les algorithmes qui convergent le plus rapidement sont ceux dont l'espace de Krilov est le plus grand. On présentera trois méthodes itératives de ce genre :

1. le gradient conjugué ;
2. Orthomin2 ;
3. GMRES.

Soit A une matrice carrée inversible d'ordre n , \underline{x}_0 une approximation de la solution, calculer

$\underline{r}_0 = \underline{b} - A\underline{x}_0$ et poser $p_0 = \underline{r}_0$.

Pour $k = 1, 2, \dots$,

- Calculer $a_{k-1} = \frac{\underline{r}_{k-1} \cdot \underline{r}_{k-1}}{\underline{p}_{k-1} \cdot A\underline{p}_{k-1}}$.
 - Poser $\underline{x}_k = \underline{x}_{k-1} + a_{k-1}\underline{p}_{k-1}$, $\underline{r}_k = \underline{r}_{k-1} - a_{k-1}A\underline{p}_{k-1}$.
 - Calculer $b_k = \frac{\underline{r}_k \cdot \underline{r}_k}{\underline{r}_{k-1} \cdot \underline{r}_{k-1}}$.
 - Poser $\underline{p}_k = \underline{r}_k + b_{k-1}\underline{p}_{k-1}$.
-

FIG. 5.4 – Algorithme du Gradient conjugué

5.3.1 Algorithme du gradient conjugué

Lorsque la matrice des coefficients est symétrique définie positive, la norme $\underline{e}_k^t A \underline{e}_k$ de l'erreur à l'itération k peut être minimisée sur tout l'espace

$$\mathcal{V} = \underline{e}_0 + \text{span} \{ A\underline{e}_0, A^2\underline{e}_0, \dots, A^{k-1}\underline{e}_0 \} = \underline{e}_0 + \{ \underline{p}_0, \underline{p}_1, \dots, \underline{p}_{k-1} \}$$

Pour ce faire, on choisit

$$\underline{p}_{k+1} = \underline{r}_k + \frac{\underline{r}_k \cdot \underline{r}_k}{\underline{r}_{k-1} \cdot \underline{r}_{k-1}} \underline{p}_k$$

comme prochaine direction de descente. L'algorithme du gradient conjugué est présenté sur la figure 5.4 (page 94).

Remrques.

1. La norme du résidu $\|\underline{r}_k\|$ n'est pas monotone décroissante.
2. La convergence est assurée en au plus N itérations pour $\underline{r} \in \mathbb{R}^N$.

Soit A une matrice carrée inversible d'ordre n , \underline{x}_0 une approximation de la solution, calculer

$\underline{r}_0 = \underline{b} - A\underline{x}_0$ et poser $p_0 = \underline{r}_0$.

Pour $k = 1, 2, \dots$,

- Calculer $a_{k-1} = \frac{\underline{r}_{k-1} \cdot A\underline{p}_{k-1}}{A\underline{p}_{k-1} \cdot A\underline{p}_{k-1}}$.
 - Poser $\underline{x}_k = \underline{x}_{k-1} + a_{k-1}\underline{p}_{k-1}$, $\underline{r}_k = \underline{r}_{k-1} - a_{k-1}A\underline{p}_{k-1}$.
 - Calculer $b_k = \frac{A\underline{r}_k \cdot A\underline{p}_{k-1}}{A\underline{p}_{k-1} \cdot A\underline{p}_{k-1}}$.
 - Poser $\underline{p}_k = \underline{r}_k - b_{k-1}\underline{p}_{k-1}$.
-

FIG. 5.5 – Algorithme Orthomin2

5.3.2 Algorithme Orthomin2

Soit A une matrice carrée inversible, lorsque

$$\underline{p}_{k+1} = \underline{r}_k - \frac{A\underline{r}_k \cdot A\underline{p}_k}{A\underline{p}_{k-1} \cdot A\underline{p}_{k-1}} \underline{p}_k$$

est choisi comme prochaine direction de descente, la norme du résidu peut-être minimisée sur l'espace

- $\mathcal{V} = \underline{r}_0 + \text{span} \{A\underline{r}_0, A^2\underline{r}_0, \dots, A^k\underline{r}_0\} = \underline{r}_0 + \text{span} \{A\underline{p}_0, A\underline{p}_1, \dots, A\underline{p}_{k-1}\}$ lorsque A est symétrique,
- $\mathcal{V} = \underline{r}_{k-1} + \text{span} \{A\underline{r}_{k-1}, A\underline{p}_{k-1}\}$ autrement.

L'algorithme Orthomin2 est présenté sur la figure 5.5. Il peut être démontré (Greenbaum[41]) que cet algorithme ne peut pas échouer lorsque toutes les valeurs propres sont différentes de zéro.

On rencontre moins souvent cet algorithme car ces itérations sont plus coûteuses que celles du gradient conjugué. Cet algorithme requiert à la fois un produit matrice vecteur ainsi qu'un produit scalaire supplémentaires à chacune des itérations. Il est toutefois plus polyvalent que l'algorithme précédent, la matrice des coefficients n'ayant pas à être symétrique

Soit \underline{q}_j , $j = 1 \dots n$ un ensemble de vecteurs unitaires de dimension n et A une matrice carrée d'ordre n . Pour $j = 1, 2 \dots$,

- Poser $\tilde{\underline{q}}_{j+1} = A\underline{q}_j$.
 - Pour $i = 1, \dots, j$
 - Poser $h_{ij} = \tilde{\underline{q}}_j \cdot \tilde{\underline{q}}_i$, $\tilde{\underline{q}}_{j+1} = \tilde{\underline{q}}_{j+1} - h_{ij}\underline{q}_i$
 - Poser $h_{j+1,j} = \|\tilde{\underline{q}}_{j+1}\|$, $\underline{q}_{j+1} = \tilde{\underline{q}}_{j+1}/h_{j+1,j}$.
-

FIG. 5.6 – Algorithme d'Arnoldi

définie positive.

5.3.3 Algorithme GMRES

Pour des matrices non-symétriques, on peut vouloir minimiser la norme sur un espace plus grand en construisant explicitement la base de l'espace de Krilov. L'algorithme GMRES de Saad et Schultz[64] (figure 5.7) permet d'augmenter la taille de l'espace de Krilov pour les matrices qui ne sont pas symétriques. La base de l'espace est construite à l'aide d'une procédure pour orthogonaliser tel l'**algorithme d'Arnoldi** (figure 5.6). Pour cet algorithme, le résidu est minimisé sur tout l'espace

$$\mathcal{V} = \underline{r}_0 + \text{span} \{ A\underline{r}_0, A^2\underline{r}_0, \dots, A^k\underline{r}_0 \} = \underline{r}_0 + \text{span} \{ A\underline{p}_0, A\underline{p}_1, \dots, A\underline{p}_{k-1} \}.$$

Pour qu'il soit efficace, l'algorithme GMRES doit converger assez rapidement. En effet, la construction de la base de Krilov est assez coûteuse et demande le stockage d'un vecteur pour chacune des itérations de GMRES. Pour diminuer les coûts liés à la construction de la base de l'espace de Krilov, l'algorithme GMRES est redémarré après un nombre m prédéterminé d'itérations. Le nombre optimal d'itérations ne peut toutefois pas être évalué et il dépend du problème considéré. Ce nombre ne peut être déterminé que par la pratique.

Cet algorithme est le seul des algorithmes présentés dans cette section qui puisse

Soit \underline{x}_0 une approximation de la solution, calculer $\underline{r}_0 = \underline{b} - A\underline{x}_0$ et poser $q_1 = \underline{r}_0 / \|\underline{r}_0\|$.

Pour $k = 1, 2 \dots$,

- Calculer q_{k+1} et $h_{i,k}$, $i = 1, k+1$ en utilisant l'algorithme d'Arnoldi. Entreposer ces vecteurs dans la matrice Q .
 - Calculer $\underline{x}_k = \underline{x}_0 + Q\underline{y}_k$, où \underline{y}_k minimise $\left\| \|\underline{r}_0\| \underline{e}_1 - H\underline{y}_k \right\|$. H étant la matrice des coefficients de l'algorithme d'Arnoldi et \underline{e}_1 le vecteur unitaire $(1, 0, \dots)$.
-

FIG. 5.7 – Algorithme GMRES

efficacement résoudre les problèmes où la diagonale principale n'est pas au moins faiblement dominante.

5.4 Conditionnement

5.4.1 Notions de base et opérateurs de conditionnement

Pour tous les algorithmes présentés dans la section précédente, le nombre d'itérations nécessaire pour converger ne dépend pas seulement de la dimension de l'espace de Krilov mais aussi du **conditionnement** de la matrice des coefficients. Le conditionnement d'une matrice mesure la sensibilité de la solution du système d'équations

$$A\underline{x} = \underline{b}$$

vis-à-vis des variations des coefficients de A et \underline{b} . Une matrice (ou le système linéaire associé) est bien conditionnée lorsque cette sensibilité est petite. Soit A une matrice inversible, le conditionnement de A est mesuré à l'aide du produit

$$\text{cond}(A)_i = \|A\|_i \|A^{-1}\|_i \geq 1,$$

où $\|\dots\|_i$ est une norme matricielle :

1. $\|A\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|$;
2. $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^t A)}$, $\rho(A^t A)$ étant la plus grande valeur propre de $A^t A$;
3. $\|A\|_{inf} = \max_i \sum_j |a_{ij}|$.

Plus ce nombre est petit, meilleur est le conditionnement de la matrice. Pour une matrice normale (donc symétrique), le nombre de conditionnement $\text{cond}_2(A)$ peut être déterminé à l'aide du rapport entre la plus grande et la plus petite de ses valeurs propres :

$$\text{cond}(A)_2 = \frac{\max_i |\lambda_i(A)|}{\min_i |\lambda_i(A)|}.$$

Malheureusement, dans la pratique, on ne connaît pas les valeurs propres de la matrice, ni son inverse. A priori, il est donc difficile de connaître le conditionnement d'une matrice.

Il est toutefois possible d'améliorer le conditionnement d'un système d'équations en appliquant des opérateurs de préconditionnement. Symboliquement, ces opérateurs sont appliqués comme suit :

$$M_g^{-1} A M_d^{-1} \underline{y} = M_g^{-1} \underline{b}, \quad \underline{y} = M_d \underline{x}$$

M_g et M_d étant des matrices d'ordre n tels que $M_g^{-1} A M_d^{-1} \approx I$, I étant la matrice identité. La matrice M_g est un préconditionneur à gauche et M_d un préconditionneur à droite. Soit \tilde{E} une matrice de correction et D la diagonale principale de A , les méthodes de préconditionnement les plus connues sont :

1. la méthode de factorisation incomplète *ILU* : $M_g = \tilde{L}$, $M_d = \tilde{U}$, $\tilde{L}\tilde{U} = A - \tilde{E}$
2. la méthode de factorisation de Choleski incomplète *IC* (A doit être symétrique) : $M_g = \tilde{C}$, $M_d = \tilde{C}^t$, $\tilde{C}\tilde{C}^t = A - \tilde{E}$;
3. la méthode de Jacobi :
 - (a) matrice symétrique : $M_g = \sqrt{D}$, $M_d = \sqrt{D}$;
 - (b) matrice non-symétrique : $M_g = D$, $M_d = I$.

Remarque. Lors de la mise-en-oeuvre, les matrices de la factorisation ne sont pas inversées. Pour tous les algorithmes itératifs (Orthomin2, gradient conjugué, GMRES...) plusieurs étapes sont ajoutées :

1. Avant de démarrer la méthode itérative :
 - (a) on effectue le changement de variable $\tilde{x}_0 = M_d x_0$, x_0 étant la solution initiale ;
 - (b) le système d'équations $M_g \tilde{b} = \underline{b}$ est résolu.
2. Tous les produits matrice vecteur $A\underline{v}$ sont remplacés par :
 - (a) la résolution du système $M_d \tilde{v}_1 = \underline{v}$;
 - (b) le calcul du produit $\tilde{v}_2 = A\tilde{v}_1$;
 - (c) la résolution du système $M_g \tilde{v} = \tilde{v}_2$.
3. À la fin de la résolution, on effectue un changement de variables en résolvant le système d'équations $M_d \underline{x} = \tilde{y}$, \tilde{y} étant la solution de l'algorithme itératif.

On rappelle que les matrices M_g et M_d sont des matrices triangulaires, la résolution des systèmes d'équations à l'intérieur des algorithmes itératifs se résume au calcul explicite de la solution.

En ce qui concerne les méthodes de factorisation incomplète, les algorithmes des figures 5.2 et 5.3 sont utilisés avec des stratégies de remplissage. La stratégie la plus simple consiste à ne conserver que les coefficients associés à des entrées non-nulles de la matrice A (factorisations $ILLU(0)$ et $IC(0)$). Malheureusement, les résultats obtenus avec ce type de factorisation sont quelque peu aléatoires :

1. L'apparition de pivots nuls peut obliger l'utilisation d'une stratégie de traitement des pivots nuls (même si théoriquement, la matrice des coefficients pourrait être décomposée sans stratégie de pivot).
2. La matrice du produit $M_g M_d$ peut dans bien des cas être significativement différente de A . Alors, le système d'équations

$$M_g^{-1} A M_d^{-1} \underline{y} = M_g^{-1} \underline{b}, \quad \underline{y} = M_d \underline{x}$$

peut être moins bien conditionné que le système initial et plus difficile à résoudre.

Pour tous les opérateurs de préconditionnement basés sur une factorisation incomplète de la matrice des coefficients, les problèmes sont essentiellement les mêmes :

1. le contrôle de l'espace mémoire utilisé pour la factorisation ;
2. la mise-en-oeuvre difficile des algorithmes les plus performants ;
3. il est difficile de prédire si le préconditionnement sera réellement efficace.

Une revue de la littérature sur ce sujet est présenté par Saad[65].

5.4.2 Équation de Poisson

Considérons l'équation de Poisson

$$\alpha \Delta \phi = s$$

où α est un paramètre qui n'est pas nécessairement constant, ϕ une variable quelconque et s un terme source. Les propriétés des systèmes d'équations discrètes résultant de la discrétisation par des méthodes de différences finies ont été étudiées en détail (Greenbaum[41]). Pour les problèmes où

- le domaine est carré (ou cubique) de longueur unitaire,
- le maillage est structuré et le pas d'espace constant,
- α est constant,

la matrice des coefficients est constante le long des diagonales, symétrique et tridiagonale par bloc (**TST par bloc**). Les valeurs propres pour une telle matrice sont connues explicitement. Il peut être démontré que pour cette catégorie de matrices le nombre de conditionnement est

$$\text{cond}(A) = \frac{4}{\pi^2 h^2} + O(1),$$

h étant le pas d'espace de la discrétisation (Greenbaum[41]). Ainsi, le conditionnement de la matrice est inversement proportionnel au pas d'espace. Lorsque le pas d'espace n'est pas constant ou lorsque le maillage n'est pas structuré, on peut présumer que le conditionnement est similaire.

On termine cette section en précisant qu'il existe des résolveurs et des préconditionneurs spécialement adaptés à ce problème et d'autres plus généraux (Greenbaum[41]) :

1. matrice TST par bloc : résolveurs directs d'équations de Poisson ("fast Poisson solvers");
2. matrice symétrique définie positive : méthode SOR avec paramètre w optimal déterminé par la plus grande valeur propre ($\beta \leq 1$)

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \beta^2}};$$

3. problèmes généraux : méthodes multi-grilles.

5.4.3 Conditionnement utilisé dans notre logiciel

Pour notre logiciel, on a opté pour la technique de conditionnement de Jacobi. Cette méthode ne nécessite le stockage que d'un seul vecteur (la diagonale principale de A) et sa mise-en-oeuvre est très simple. Pour toutes les résolutions de systèmes d'équations, les étapes suivantes sont ajoutées à l'algorithme itératif de résolution :

1. matrice symétrique :

(a) avant la résolution :

- i. mise à l'échelle des colonnes : $\tilde{a}_{ij} = a_{ij}/\sqrt{a_{jj}}$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq n$;
- ii. mise à l'échelle des lignes : $\tilde{a}_{ij} = \tilde{a}_{ij}/\sqrt{a_{ii}}$, $1 \leq j \leq n$, $1 \leq i \leq n$;
- iii. mise à l'échelle des variables : $y_i = x_i \cdot \sqrt{a_{ii}}$, $1 \leq i \leq n$;

(b) après la résolution :

- mise à l'échelle des variables : $x_i = y_i/\sqrt{a_{ii}}$, $1 \leq i \leq n$.

2. matrice non-symétrique :

- Avant la résolution, mise à l'échelle des lignes :

$$\tilde{a}_{ij} = a_{ij}/a_{ii}, \quad 1 \leq j \leq n, \quad 1 \leq i \leq n.$$

5.5 Résultats comparatifs et choix de l'algorithme de résolution

Pour comparer la performance des algorithmes de résolution et mesurer l'efficacité de notre préconditionneur, un problème d'écoulement thermique en régime permanent³ a été résolu avec les algorithmes du gradient conjugué, Orthomin2 et GMRES. L'algorithme GMRES a été testé avec deux configurations :

1. 30 itérations et 5 pas (4 redémarrages) ;
2. 50 itérations et 3 pas (2 redémarrages).

Critères de convergence et d'arrêt

Soit k le nombre d'itérations et \underline{r}_k le résidu à l'itération k , les critères de convergence et d'arrêt pour chacun des algorithmes sont les suivants :

1. équations de la conservation de la quantité de mouvement :

(a) orthomin2 :

$$\|\underline{r}_k\|_{L^2} < 1 \times 10^{-7} \quad \text{ou} \quad \|\underline{r}_k\|_{L^2} / \|\underline{r}_0\|_{L^2} < 1 \times 10^{-3} \quad \text{ou} \quad k \geq 40 ;$$

(b) GMRES :

$$\|\underline{r}_k\|_{L^2} < 1 \times 10^{-7} \quad \text{ou} \quad \|\underline{r}_k\|_{L^2} / \|\underline{r}_0\|_{L^2} < 1 \times 10^{-3} \quad \text{ou} \quad k \geq 30 ;$$

2. équations de correction de pression :

(a) gradient conjugué et Orthomin2 :

$$\|\underline{r}_k\|_{L^2} < 1 \times 10^{-7} \quad \text{ou} \quad \|\underline{r}_k\|_{L^2} / \|\underline{r}_0\|_{L^2} < 1 \times 10^{-3} \quad \text{ou} \quad k \geq 300 ;$$

(b) GMRES :

$$\|\underline{r}_k\|_{L^2} < 1 \times 10^{-7} \quad \text{ou} \quad \|\underline{r}_k\|_{L^2} / \|\underline{r}_0\|_{L^2} < 1 \times 10^{-3}.$$

³Ce problème est présenté dans le chapitre 7 à la page 146.

Algorithme	Temps CPU (secondes)	Pas de temps pour convergence	Norme infinie du bilan massique à convergence
Avec préconditionnement			
Gradient conjugué et Orthomin2	492.85	59	$3.04 \cdot 10^{-9}$
Orthomin2	548.09	53	$1.15 \cdot 10^{-9}$
GMRES(30x5)	1000.55	70*	$4.42 \cdot 10^{-7}$
GMRES(50x3)	1254.79	70*	$3.64 \cdot 10^{-7}$
Sans préconditionnement			
Gradient conjugué et Orthomin2	571.33	70*	$3.33 \cdot 10^{-7}$
Orthomin2	703.16	70*	$2.32 \cdot 10^{-8}$
GMRES(30x5)	963.72	70*	$1.85 \cdot 10^{-7}$
GMRES(50x3)	1203.28	70*	$1.48 \cdot 10^{-7}$

* indique que le critère de convergence $|w^{k+1} - w^k|_{\infty} < 1.e - 4$ n'a pas été satisfait après 70 pas de temps.

TAB. 5.1 – Temps de résolution pour différents algorithmes de résolution, problème de l'écoulement 3D thermique dans une conduite

Pour toutes les simulations, le critère d'arrêt est

$$|w^{n+1} - w^n|_{\infty} < 1.e - 4 \quad \text{ou} \quad n \geq 70,$$

n étant le nombre de pas de temps.

Résultats

Pour tous les algorithmes, deux résolutions ont été effectuées : une avec préconditionnement et une autre sans préconditionnement. Le tableau 5.1 présente le temps CPU nécessaire pour la résolution, le nombre de pas de temps pour satisfaire le critère de convergence et la norme infinie du bilan massique à convergence. Cette dernière information nous permet de juger de la qualité de la solution à convergence.

Les résultats montrent que le préconditionnement a facilité la résolution des systèmes d'équations. Lorsqu'il n'y a pas de conditionnement, aucun des algorithmes n'a permis de

résoudre tout le problème d'écoulement en moins de 70 pas de temps.

Avec et sans conditionnement, c'est l'algorithme Orthomin2 qui a permis d'obtenir "la meilleure" solution (dans les deux cas, la norme du bilan massique est inférieure à celle des autres algorithmes). De plus, c'est avec cet algorithme que la solution a été obtenue le plus rapidement (en nombre de pas de temps).

En ce qui concerne la vitesse d'exécution, c'est l'association gradient conjugué et Orthomin2 qui est la moins coûteuse en temps CPU (10% à 20%).

L'algorithme GMRES a été le moins efficace des trois algorithmes. Les temps de résolution sont significativement plus élevés et l'algorithme n'a permis dans aucun cas de satisfaire le critère de convergence pour tout le problème.

En ce qui concerne l'espace mémoire utilisé par ces algorithmes, on peut mentionner qu'aucun des algorithmes ne nécessite la construction explicite du système d'équations. Les vecteurs nécessaires à la résolution sont au nombre de 3 pour le gradient conjugué, 4 pour Orthomin2 et de la dimension de l'espace de Krilov plus 2 pour GMRES.

C'est l'algorithme Orthomin2 avec préconditionnement qui a été utilisé pour résoudre tous les systèmes d'équations linéaires des problèmes présentés dans le chapitre 7,

Chapitre 6

Mise-en-oeuvre

Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter une librairie informatique qui a été développée dans le cadre de cette thèse de doctorat. Une première librairie de routines a été mise en oeuvre pour faciliter le développement de notre schéma numérique. Bien que les routines de cette première librairie soient efficaces, elles ne sont pas adéquates pour le développement du schéma par d'autres chercheurs. Suite aux résultats obtenus avec notre schéma, on a décidé de mettre en oeuvre une librairie informatique qui soit plus appropriée à l'exploitation du schéma par d'autres chercheurs.

Notre librairie permet la résolution de problèmes 2D et 3D en régime permanent ou transitoire. Les écoulements peuvent être laminaires ou turbulents. Pour les écoulements turbulents, seul le modèle de turbulence $k - \epsilon$ a été mis en oeuvre. Il est toutefois possible d'ajouter d'autres modèles de turbulence. Des problèmes avec densité constante ou variable peuvent être résolus avec cette librairie. De plus, le nombre de variables scalaires transportées par l'écoulement est variable. Ainsi, avec cette librairie, des écoulements thermiques avec plusieurs composants chimiques peuvent être résolus.

6.1 Langage de programmation et programmation orientée objet

La librairie informatique a été mise en oeuvre avec le langage de programmation C++. Ce choix est en partie justifié parce que ce langage supporte la **programmation procédurale** (ou **programmation structurée**) et la **programmation orientée objet** ("POO"). La programmation procédurale consiste à résoudre un problème en construisant un ensemble de

fonctions (les algorithmes) et par la suite de déterminer la méthode de stockage des données. Les langages de programmation Fortran, C, Pascal sont des langages de programmation structurée. La POO inverse cet ordre. En premier lieu, on cherche à connaître les données nécessaires pour la représentation de notre problème. Ensuite, on associe des fonctions pour la manipulation de ces données. En POO, on combine les données (**les attributs**) et les fonctions (**les méthodes**) pour former des **objets**. Les principaux langages POO sont le JAVA, le Smalltalk et le C++. Le C++ est le seul de ces langages qui supporte à la fois une approche procédurale et une approche POO. Les langages Smalltalk et JAVA sont des langages purement POO : toutes les données devant être représentées par un objet (le programme principal est lui-même un objet). Deux concepts sont fondamentaux à la POO : l'**encapsulation** et l'**héritage**.

L'encapsulation (ou isolement des données) consiste à regrouper les attributs et interfaces (les interfaces sont des méthodes) entre l'objet et l'utilisateur dans un même contenant et de dissimuler l'implémentation de ces interfaces aux utilisateurs des objets. Lorsque l'encapsulation est respectée, on ne peut modifier ou accéder aux attributs d'un objet qu'en passant par une interface visible à l'utilisateur. Pour les gros projets, le respect de l'encapsulation permet de plus facilement déboguer les programmes : les attributs d'un objet ne pouvant être modifiés que par un nombre déterminé de fonctions.

L'héritage permet d'étendre la fonctionnalité d'un objet A à un (ou plusieurs) objet B. L'objet B possède toute la fonctionnalité de l'objet A (méthodes et attributs) et de nouvelles propriétés. Ainsi, avec l'héritage, on peut réutiliser des méthodes déjà existantes avec de nouveaux objets plus évolués.

Finalement, en C++, il est possible de créer des fonctions ou des objets génériques qui sont conçus pour manipuler des données hétérogènes. On dit que ces fonctions ou objets sont paramétrés. En C++ les fonctions ou objets sont paramétrés à l'aide de **template**.

6.2 Description des objets et de la librairie

Dans cette section, on présente une description des objets construits pour supporter la librairie. On tient à préciser qu'en C++ les objets sont construits via les classes.

6.2.1 Classe VecteurBase

C'est la classe principale utilisée pour l'allocation dynamique de vecteurs d'objets (Boivin[8]). La classe est assez générale et est destinée à être spécialisée par héritage. Ses principales caractéristiques sont :

- elle est entièrement paramétrée (template) ;
- les opérations sont optimisées pour les processeurs RISC ;
- l'accès au coefficient i est effectué via l'opérateur $[i]$;
- l'accès aux éléments peut être fait avec validation des indices.

6.2.2 Classe Vecteur

C'est une classe pour la manipulation de vecteurs numériques, elle est dérivée de la classe VecteurBase (Boivin[8]). Ses principales caractéristiques sont :

- elle est paramétrée (template) ;
- les opérations sont optimisées pour les processeurs RISC ;
- l'accès au coefficient i est effectué via l'opérateur $[i]$;
- elle permet d'effectuer les principales opérations arithmétiques vectorielles : produit scalaire, addition (soustraction), multiplication (division) par un scalaire, recherche de la valeur maximale (minimale), calcul de la moyenne, calcul de normes discrètes, multiplication vectorielle pour les vecteurs de dimension 2 et 3.

6.2.3 Classe Matrice

Les matrices pleines sont manipulées avec la classe Matrice (Boivin[8]). Ses principales caractéristiques sont :

- elle est entièrement paramétrée (template) ;
- les opérations sont optimisées pour les processeurs RISC ;
- les données de la matrice sont stockées via un objet Vecteur ;

- l'accès au coefficient sur la ligne i et la colonne j de la matrice est effectué via l'opérateur (i,j) ;
- elle permet d'effectuer les principales opérations mathématiques associées aux matrices numériques pleines : le produit matriciel, l'addition (la soustraction) matricielle, le produit matrice-vecteur, le produit matrice-scalaire ;
- le calcul de déterminants pour les matrices carrées d'ordre 4 ou moins ;
- la résolution directe par la méthode de Cramer de matrices carrées d'ordre 4 ou moins ;
- la résolution directe par la méthode de Gauss.

Les 3 dernières caractéristiques ont été ajoutées par l'auteur de cette thèse.

6.2.4 Classe Element

C'est une classe générique pour la représentation d'éléments géométriques ou de volumes de contrôle . Un Element possède une mesure (son aire, volume) et un Vecteur d'entiers pour l'entreposage de données liées à la connectivité du maillage (les sommets pour les éléments, les interfaces pour les volumes de contrôle).

6.2.5 Classe Face

C'est une classe qui est utilisée pour la représentation des faces d'un maillage, elle est dérivée de la classe Element. Elle est spécialisée à l'aide

- d'un Vecteur de nombres réels pour représenter le vecteur normal,
- de deux entiers pour identifier les numéros des éléments qui lui sont associés.

6.2.6 Classe InterFace

Cette classe est utilisée pour la représentation des interfaces entre les volumes de contrôle, elle est dérivée de la classe Face. Elle est spécialisée à l'aide

- des numéros de référence des positions de calcul des flux qui lui sont associées ;
- d'une valeur réelle pour la transmittivité ;
- d'une valeur réelle pour l'interpolation.

Remarque. Pour les classes `Element`, `Face` et `InterFace`, la recherche d'erreurs de programmation est facilitée par :

1. un mode développement pour contrôler les accès aux Vecteurs ;
2. l'emploi des macros `_LINE_` et `_FILE_` pour afficher la ligne et le fichier lorsqu'une opération non-permise est effectuée (ces macros sont standards aux langages C et C++).

6.2.7 Classe `EquLin`

La représentation et la manipulation des systèmes d'équations linéaires dont la matrice des coefficients est creuse est effectuée via la classe `EquLin`. Seules les entrées non-nulles de la matrice des coefficients et le vecteur des termes constants sont stockés. Quatre attributs sont utilisés pour représenter les systèmes d'équations :

1. un entier pour le nombre de lignes de la matrice ;
2. une liste de Vecteurs d'entiers pour la structure topologique ;
3. une liste de Vecteur de nombres réels de format double précision pour les coefficients ;
4. un Vecteur de nombres réels en format double précision pour représenter le vecteur des termes constants.

Soit i et j des entiers, les principales opérations possibles avec cette classe sont :

- l'accès direct aux attributs via des interfaces qui vérifient la validité des accès en mode développement ;
- l'accès direct à la structure topologique via l'opérateur $LI(i,j)$;
- l'accès direct aux coefficients via l'opérateur $A(i,j)$;
- l'accès direct aux termes constants via l'opérateur $B(i)$;
- la multiplication matrice-vecteur ;
- la multiplication matrice-transposée-vecteur ;
- la multiplication d'une ligne par un vecteur ;
- la mise à l'échelle des lignes ou des colonnes ;
- le calcul du résidu ;
- le calcul de la norme matricielle.

6.2.8 Classes VFNS et USAGER

Une instance de la classe VFNS est un algorithme de résolution d'un problème d'écoulement. Cette classe est utilisée via la classe USAGER (ou une autre classe), VFNS étant une classe template. C'est la classe USAGER qui sert d'interface entre l'utilisateur qui doit résoudre un problème d'écoulement et la classe VFNS. La classe USAGER est constituée d'un attribut qui est une instance de la classe VFNS et d'une série de méthodes dont la programmation est effectuée par l'utilisateur. Ces méthodes sont utilisées pour la description des conditions de bord, l'initialisation des paramètres qui décrivent l'écoulement (turbulent ou laminaire, transitoire ou permanent...), le calcul des termes sources et des paramètres de diffusion.

Cette classe comporte de nombreuses méthodes. Ici, seules les méthodes publiques¹ sont décrites.

Méthode Resoud()

Cette méthode est appelée pour débiter la résolution.

Méthode SauvegardeSol()

Cette méthode sauvegarde la solution. La solution peut être sauvegardée en format binaire ou ASCII.

6.2.9 Méthodes de la classe USAGER

La modélisation des différents problèmes d'écoulements est supportée via la programmation du corps de certaines des méthodes de la classe USAGER.

Méthode InitParametres()

Les principaux paramètres nécessaires à la résolution sont initialisés via cette méthode :

¹On peut distinguer deux types d'attributs : les attributs publiques et les attributs privées. Les attributs publiques sont visibles aux clients de la classe. Les attributs privés ne sont visibles qu'aux objets de la classe. Cette distinction est nécessaire pour l'encapsulation.

1. écoulement laminaire ou turbulent ;
2. écoulement permanent ou transitoire ;
3. valeur du paramètre d'anti-diffusion ;
4. nombre de variables scalaires à résoudre (la température, une concentration, ...);
5. dimension d'espace (2 ou 3) ;
6. le nom du fichier de maillage ;
7. le format des entrées-sorties (ASCII ou binaire).

Méthode ConditionFrontiere()

Le type et la valeur des conditions de frontière sont déterminés par la méthode ConditionFrontiere().

Méthode InitS0()

La solution initiale, pour toutes les variables, est déterminée à l'aide de cette méthode.

Méthode ChoixDt()

Avant chacune des itérations (ou pas de temps), la valeur du pas de temps est déterminée par un appel à cette méthode. L'utilisateur peut donc modifier son pas de temps en fonction du temps ou du nombre d'itérations.

Méthode Densite()

Avant la projection, la valeur de la densité peut être calculée en fonction de l'état de l'écoulement (température, pression, concentrations volumiques). Cette méthode autorise la résolution d'écoulements avec densité variable.

Méthode Diffusion()

Cette méthode est appelée pour déterminer le coefficient de diffusion avant le calcul des équations discrètes.

Méthode Source()

Les termes sources des équations de conservation sont déterminés avec cette méthode.

Méthode ParametresResolution()

Avant la résolution des systèmes d'équations linéaires, cette méthode est appelée pour déterminer les paramètres requis par le résolveur :

1. choix du résolveur (gradient conjugué, Orthomin2, GMRES)
2. conditionnement du système d'équations linéaires ;
3. critère de convergence ;
4. nombre maximal d'itérations.

Méthode Arrêt()

Cette méthode est appelée après chacun des pas de temps pour déterminer s'il faut arrêter la résolution. Le critère d'arrêt peut être choisi en fonction du nombre de pas de temps, de la norme résiduelle, de la variation des variables.

Méthode PostTraitement()

Après chacun des pas de temps, cette méthode est appelée pour permettre à l'utilisateur d'effectuer des opérations de post-traitement (le calcul des coefficients de portance ou de traînée par exemple).

6.2.10 Classe Geometrie

La manipulation des éléments du maillage est effectuée avec les objets de la classe Geometrie. Ses membres sont essentiellement des méthodes qui servent à la manipulation des structures de données qui représentent un maillage.

Méthode ConstruitFacesNS()

À partir de la liste des sommets des éléments du maillage, cette fonction construit la liste des faces du maillage. Le maillage peut-être constitué de triangles en 2D ou de tétraèdres en 3D.

Méthodes MesureTetra() et MesureTriangle()

Calcule le volume (l'aire) d'un tétraèdre (d'un triangle).

Méthode CalculeIDBO()

Détermine la position du point d'intersection des bissecteurs orthogonaux d'un triangle en 2D ou 3D.

Méthode CalculeIDO()

Détermine le centre de la sphère circonscrite à un tétraèdre.

Méthode LectureAMD()

Lecture d'un maillage en format AMDBA (figure 6.1, page 114). Le maillage peut être 2D ou 3D et écrit en format binaire ou ASCII.

Méthode ConstruitVC()

Cette fonction construit la liste des volumes de contrôle à partir des éléments géométriques du maillage.

6.2.11 Diagramme de relation entre les classes

La figure 6.2 (page 115) présente un diagramme de relation entre les classes.

Soit,

- ns le nombre de sommets (nombre entier),
- ne le nombre d'éléments (nombre entier),
- fr un entier qui peut indiquer le numéro de frontière,
- x, y et z des nombres réels qui indiquent les coordonnées d'une position,
- $s1, \dots, s4$ des nombres entiers qui indiquent une référence à un sommet,

le format AMDBA d'un maillage est :

1. Maillage 2D

```

ns ne
1 x y fr
2 x y fr
:
ns x y fr
1 s1 s2 s3 fr
2 s1 s2 s3 fr
:
nt s1 s2 s3 fr

```

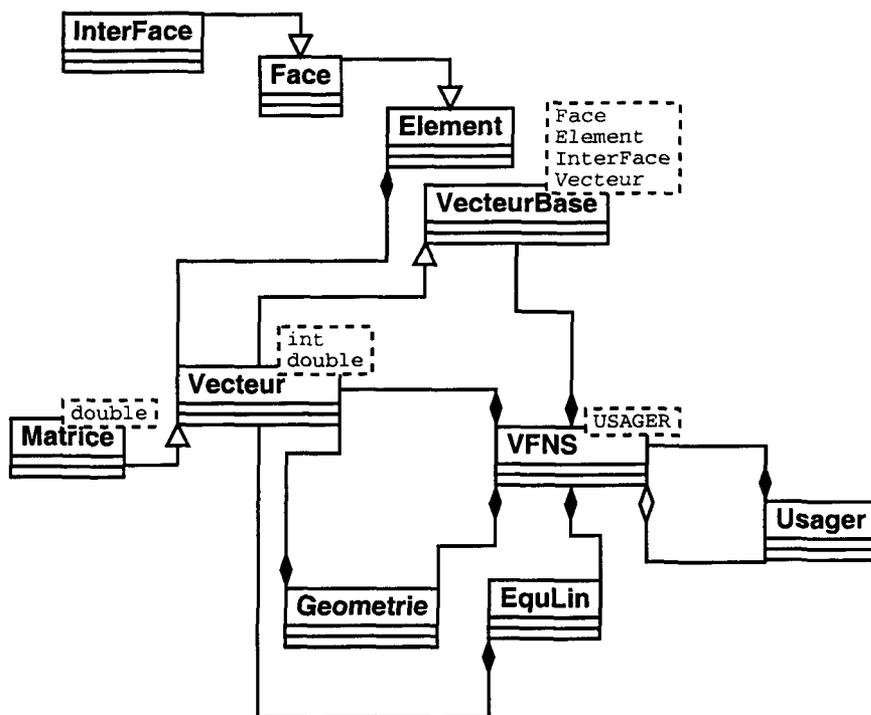
2. Maillage 3D

```

ns ne
1 x y z fr
2 x y z fr
:
ns x y z fr
1 s1 s2 s3 s4 fr
2 s1 s2 s3 s4 fr
:
nt s1 s2 s3 s4 fr

```

FIG. 6.1 – Format AMDBA d'un maillage



Légende

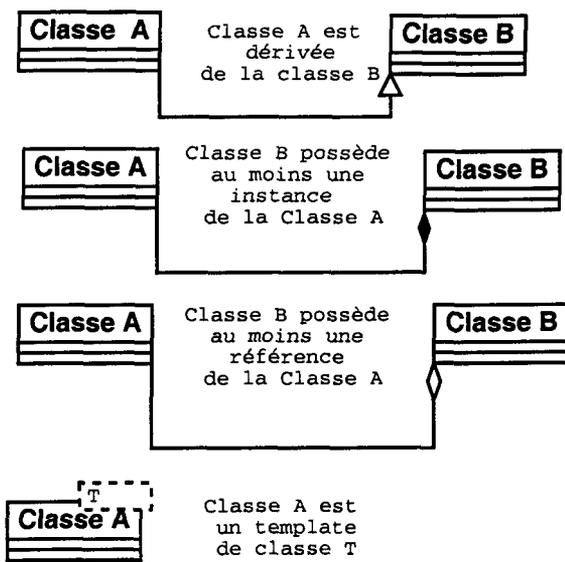


FIG. 6.2 – Diagramme de relation entre les classes

6.3 Programmes pour le pré et le post-traitement

Une suite de programme a été créée avec la librairie. Ces programmes sont de petits utilitaires qui sont utilisés pour le pré et le post-traitement.

6.3.1 Programme NopoToAMD

La plupart des maillages utilisés pour ce travail de recherche ont été créés avec la librairie *MODULEF*. Cette librairie a été développée à l'INRIA en France et elle est disponible gratuitement via internet (<http://www-rocq.inria.fr/modulef/>). Les maillages créés avec cette librairie ne sont pas tous sauvegardés en format AMDBA. Le format standard pour cette librairie est le format NOPO qui est binaire². Les maillages 2D et 3D de format nopo peuvent être traduits au format AMDBA avec le programme NopoToAMD³.

6.3.2 Programme VcToAMD

Une solution constante par volume de contrôle peut être convertie en une solution constante par élément à l'aide du programme VcToAMD.

6.3.3 Programme AmdToGMV

Le programme AmdToGMV est utilisé pour convertir une solution constante par élément et un maillage AMDBA en un format qui puisse être interprété par le logiciel GMV. GMV est un logiciel de visualisation de solutions 2D ou 3D développé au département de physique appliqué du laboratoire de Los Alamos aux États-Unis. Ce logiciel est disponible gratuitement pour de nombreuses architectures (SparcSolaris, HP-UX, Intel Linux...) à l'adresse web suivante : <http://www-xdiv.lanl.gov/XCM/gmv/GMVHome.html>.

²Comparativement au format ASCII, le format binaire ne peut pas être lu avec un éditeur de texte. Cependant, les accès à ce type de fichier sont beaucoup plus rapides. De plus, ces fichiers occupent beaucoup moins d'espace disque et il n'y a aucune perte d'information. Malheureusement, les fichiers binaires ne peuvent pas être transférés d'une architecture à une autre (d'un PC à une station Solaris par exemple).

³Pour compiler le programme NopoToAMD, il est nécessaire de posséder la librairie *MODULEF*.

6.4 Installation et disponibilité

La librairie informatique est disponible gratuitement à l'adresse web suivante :

<http://dimoiv.uqac.ca/~sboivin/sperron> .

Sur une station Unix ce fichier est décompressé à l'aide de la commande :

gunzip vfns.tar.gz ; tar -xf vfns.tar .

Lorsque l'archive est décompressée, le répertoire *vfns* est créé. Pour compiler toute la librairie sur une station Linux, il suffit de se placer dans le répertoire *vfns/bin* et de faire la commande *make all* . Pour les autres architectures Unix, il faut éditer le fichier *Makefile* et modifier les paramètres de compilation (ils ont été optimisés pour une architecture Intel Linux). Avec cette commande, toute la librairie est compilée ainsi que les programmes utilitaires et quelques programmes de démonstration. En ce qui concerne la documentation, la thèse de doctorat est disponible à la même adresse dans les formats PostScript compressé (*these.ps.gz*) et PDF (*these.pdf*).

Chapitre 7

Résultats numériques

Introduction

Dans ce chapitre, on présente quelques uns des résultats numériques qui ont été obtenus avec notre schéma. Les problèmes résolus sont des écoulements 2D et 3D, stationnaires ou instationnaires, en régime laminaire et turbulent. L'objectif était de valider le schéma numérique avec des problèmes où les difficultés sont bien identifiées, et non pas de résoudre des problèmes où les phénomènes sont nombreux et les difficultés difficilement identifiées.

On tient à préciser que bien que la majorité des écoulements présentés dans ce chapitre soient bidimensionnels, ils ont tous été résolus dans un domaine à trois dimensions.

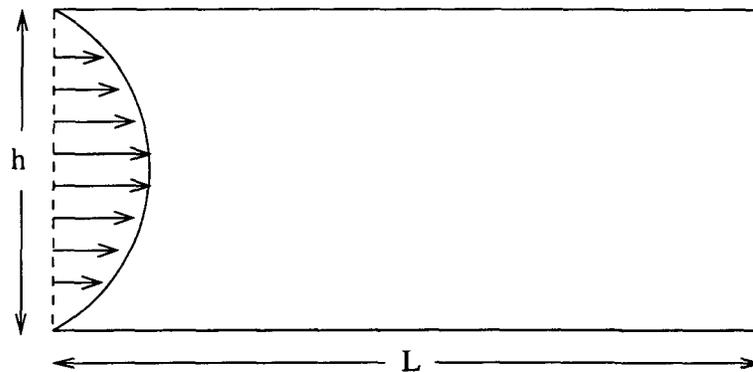


FIG. 7.1 – Géométrie, écoulement entre deux plans parallèles

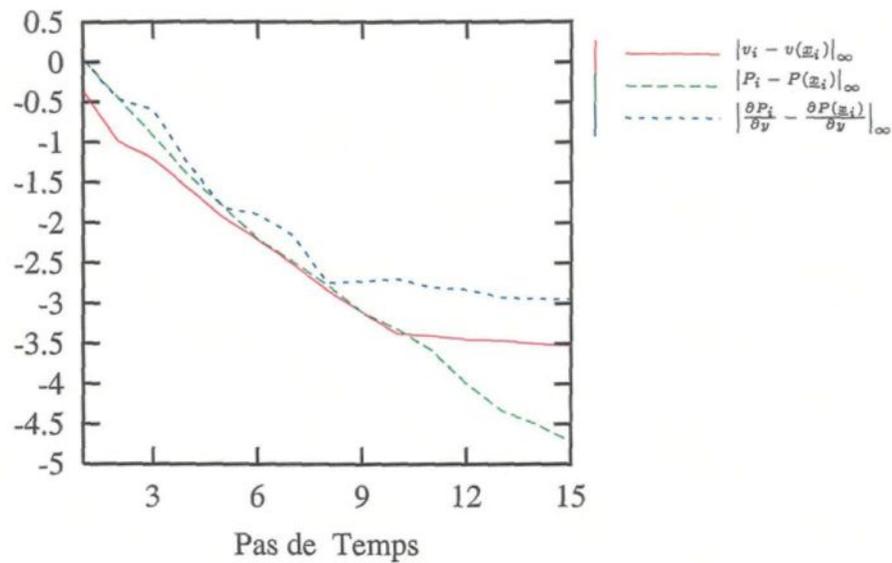


FIG. 7.2 – Convergence, écoulement entre deux plans parallèles

7.1 Écoulement entre deux plans parallèles

Il s'agit d'un écoulement entre deux plans parallèles dont le profil de vitesse est développé à l'entrée. La sortie est libre et les plans sont des parois imperméables. L'axe x est un axe de symétrie. Le maillage est constitué de parallélépipèdes droits (des macro-éléments formés de 6 tétraèdres), 60 suivant l'axe z , 20 suivant l'axe y . La solution initiale et les conditions de bord sont les suivantes :

Domaine :

$$[0.0, 0.1] \times [0.0, 1.0] \times [0.0, 0.2].$$

Conditions de bord :

Entrée :

$$v(y = 0, z) = 100z(h - z), \quad w(y = 0, z) = 0.$$

Sortie :

$$\left. \frac{\partial v}{\partial n} \right|_{y=L} = 0, \quad w(y=L, z) = 0, \quad P(y=L, z) = 0.$$

Parois :

$$\underline{v} \cdot \underline{n}|_{z=0, z=h} = 0, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau}|_{z=0, z=h} = 0.$$

Solution initiale

$$\underline{v}(\underline{x}) = 0, \quad P(\underline{x}) = 0.$$

Nombres caractéristiques :

$$Re = \frac{\rho v_{max} L}{\mu} = 100, \quad \rho = 1.0, \quad v_{max} = 1, \quad L = 1.0, \quad \mu = 0.01.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.1.$$

Critère de convergence :

$$|v^{n+1} - v^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-5}.$$

L'objectif, pour ce problème, est de vérifier si le schéma converge vers la solution analytique pour toutes les variables du système d'équations. Pour ce faire, on a calculé pour les variables v , p et $\frac{\partial p}{\partial y}$ les valeurs absolues des plus grandes différences entre les valeurs calculées numériquement et la solution analytique. La solution analytique pour ce problème est la suivante :

$$\begin{aligned} v(y, z) &= 100z(h - z). \\ P(y, z) &= P|_{y=L} - \frac{\partial P}{\partial y}(y - L). \\ \frac{\partial P}{\partial y} &= -2. \end{aligned}$$

Les courbes de convergence sont présentées sur la figure 7.2 (page 119). Ces courbes montrent que le schéma converge rapidement vers la solution. Après seulement 15 pas de temps,

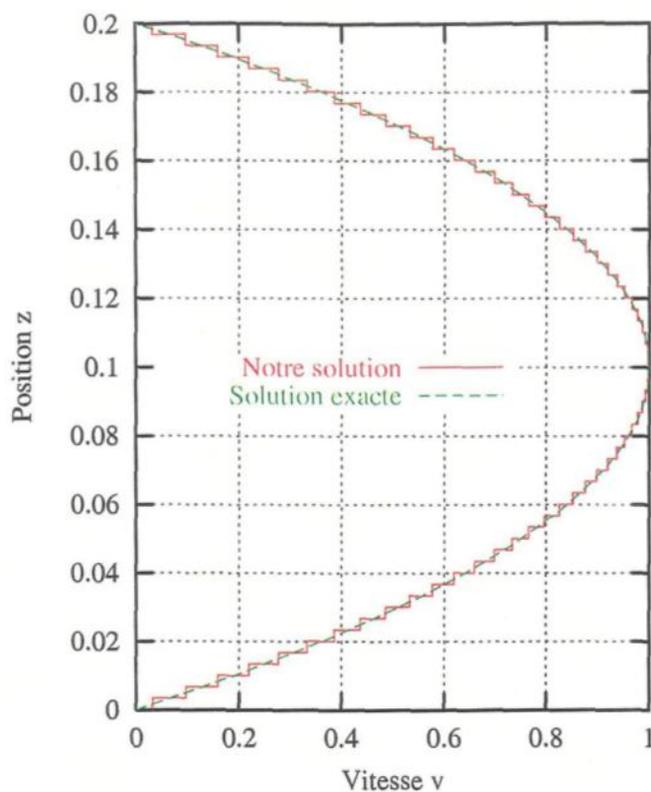


FIG. 7.3 – Vitesse horizontale v , écoulement entre deux plans parallèles

le système d'équations a satisfait le critère de convergence. À convergence, on remarque que la plus grande différence entre la vitesse calculée numériquement et la solution analytique est de l'ordre 1×10^{-3} . À la page 121 sur la figure 7.3, notre solution numérique et la solution analytique de la vitesse horizontale près de la sortie ($y = 0.98$) sont présentées. De plus, sur la figure 7.4 (page 122) on montre la solution numérique et la solution analytique de la pression au centre de la conduite ($z = 0.1$).

Ce problème montre que notre façon de mettre à jour la vitesse sur les volumes de contrôle ainsi que notre approximation du gradient de pression donnent des résultats numériques qui sont consistants avec la solution analytique du problème.

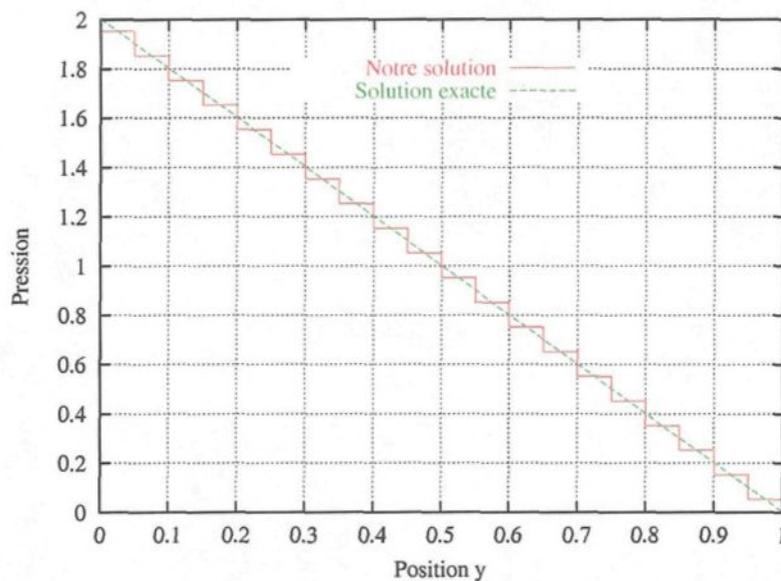


FIG. 7.4 – Pression, écoulement entre deux plans parallèles

7.2 Écoulement engendré par le déplacement d'une paroi

Le problème considéré est celui de l'écoulement dans une cavité carrée engendré par le déplacement d'une paroi. L'objectif, pour ce problème, est de vérifier :

1. si le schéma anti-diffusif permet d'améliorer significativement la précision de la solution numérique ;
2. l'accord entre le champ de vitesse calculé lors de la projection et la solution des équations de la quantité de mouvement.

Les conditions de bord, la solution initiale et les nombres caractéristiques pour ce problème sont les suivants :

Domaine :

$$[0.0, 0.1] \times [0.0, 1.0] \times [0.0, 1.0].$$

Conditions de bord :

$$\underline{v} \cdot \underline{n}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau} = \begin{cases} 1 & z = L \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}.$$

Solution initiale :

$$\underline{v}(\underline{x}) = \underline{0}, \quad P(\underline{x}) = 0.$$

Nombres Caractéristiques :

$$Re = \frac{\rho v_{max} L}{\mu} = 1000, \quad \rho = 1.0, \quad v_{max} = 1, \quad L = 1.0, \quad \mu = 0.001.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.1.$$

Critère de convergence :

$$|v^{n+1} - v^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-5} \text{ et } |w^{n+1} - w^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-5}.$$

Pour ce problème, on a utilisé plusieurs maillages constitués de prismes à base triangulaire¹. La base des prismes repose dans le plan $yo z$.

Ce problème a été étudié par de nombreux chercheurs et nos résultats ont donc pu être comparés. Dans le tableau 7.1, nos résultats sont comparés à ceux obtenus par Ghia et al.[40] avec un schéma d'ordre 2 et 10000 inconnues. Les extrémas des composantes de la vitesse sur les plans médians ainsi que la position où ils sont atteints y sont présentés. On tient à préciser que pour la composante v la valeur maximale n'est pas présentée, celle-ci étant bien sur atteinte lorsque $z = 1.0$ (sur la paroi supérieure).

On peut constater que l'on se rapproche de la solution de référence lorsque l'on augmente le nombre d'inconnues. De plus, les résultats sont plus précis lorsque le schéma anti-diffusif est utilisé. Pour bien juger de la précision de nos résultats, on montre, sur la figure 7.5 (page 124), les résultats sur les plans médians obtenus avec le maillage comportant 6178 volumes et les résultats de Ghia et al.

A des fins de comparaison, le champ de vitesse et les courbes de pression sont présentés sur les figures 7.6 et 7.7 (pages 125 et 126).

¹On rappelle que lorsque le problème considéré se déroule dans un plan, les variables du système d'équations sont indépendantes de la direction perpendiculaire à ce plan. Pour profiter de la symétrie et utiliser un maillage non-structuré, on utilise des prismes à base triangulaire.

Maillage	Antidiffusion	Min. v ($z =$)	Min. w ($y =$)	Max. w ($y =$)
2220 volumes	non	-0.299, (0.233)	-0.432, (0.883)	0.286, (0.184)
2220 volumes	oui	-0.341, (0.234)	-0.481, (0.883)	0.325, (0.184)
3982 volumes	non	-0.321, (0.233)	-0.448, (0.885)	0.304, (0.184)
3982 volumes	oui	-0.359, (0.202)	-0.492, (0.895)	0.347, (0.158)
6178 volumes	non	-0.351, (0.224)	-0.481, (0.886)	0.337, (0.184)
6178 volumes	oui	-0.387, (0.199)	-0.519, (0.886)	0.373, (0.167)
Ghia et al. 10000 noeuds	—	-0.383, (0.172)	-0.516, (0.906)	0.371, (0.156)

TAB. 7.1 – Résultats comparatifs, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi

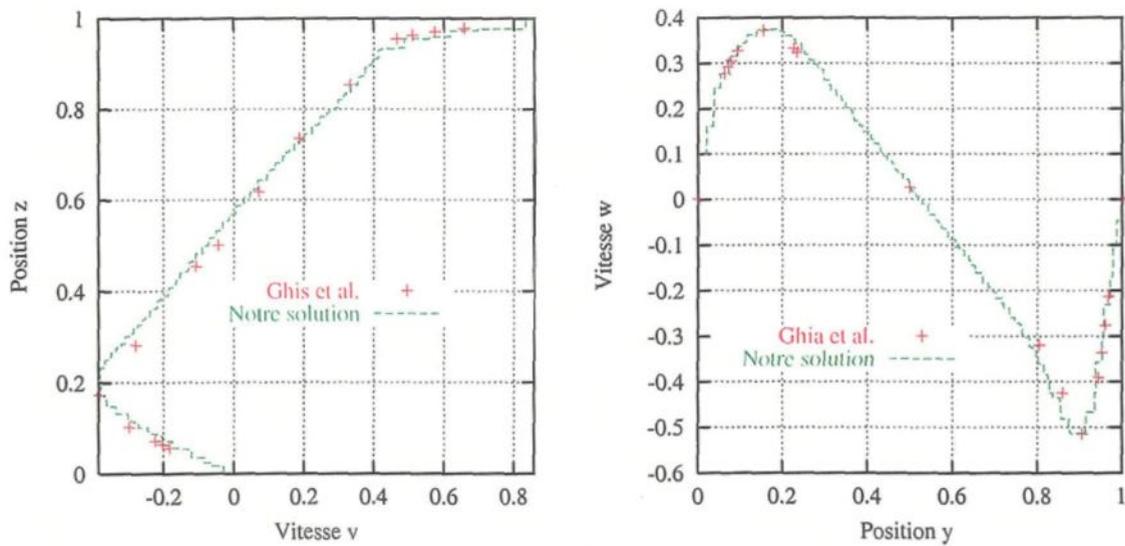


FIG. 7.5 – Coupes, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi

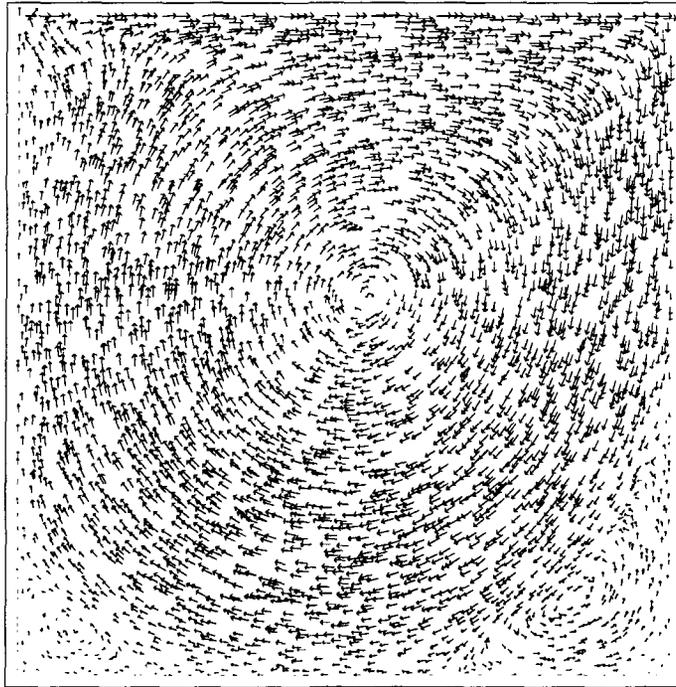


FIG. 7.6 – Vitesse, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi

Lorsque l'on utilise une méthode à pas fractionnaires, il est important de vérifier si le champ de vitesse calculé lors de l'étape de projection est bien une solution des équations de Navier-Stokes. Lorsqu'un schéma est mal construit, un état dit stationnaire peut être atteint bien que les équations de la quantité de mouvement ne soient pas bien résolues. Si c'était le cas avec notre schéma, on constaterait que le résidu des équations de Navier-Stokes atteint rapidement un point de stagnation bien que la variation des variables à chacun des pas de temps tend vers zéro. Afin de vérifier s'il y a bien accord entre la solution projetée et les équations de Navier-Stokes, on a tracé les courbes des résidus et celles des variations des inconnues à chacun des pas de temps. La figure 7.8 (page 126) montre que les courbes des variations et les courbes résiduelles sont en accord, la vitesse calculée lors de la projection est bien une solution des équations de la quantité de mouvement.

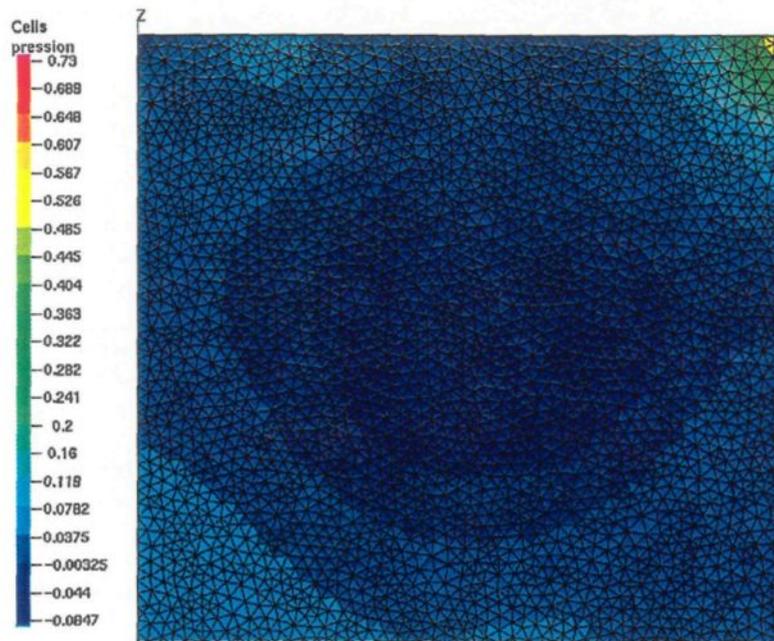


FIG. 7.7 – Pression, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi

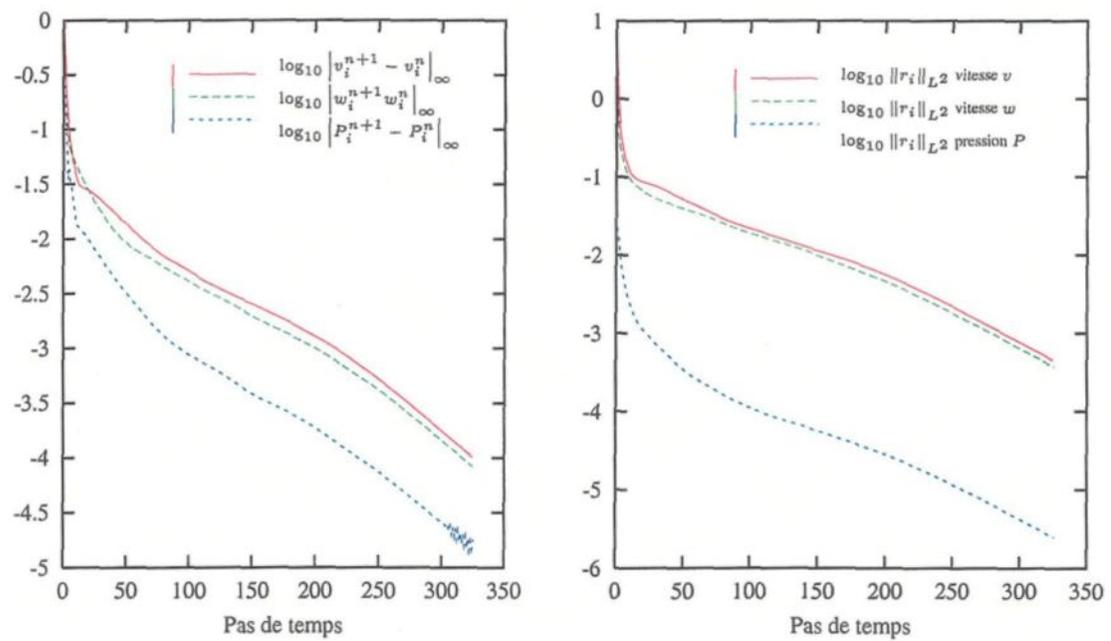


FIG. 7.8 – Convergence, écoulement engendré par le déplacement d'une paroi

7.3 Convection naturelle dans une cavité carrée

Le problème suivant est celui de l'écoulement thermique dans une cavité carrée. L'objectif, pour ce problème, est de vérifier le comportement du schéma lorsque l'écoulement dépend non seulement des équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse, mais d'une autre équation de conservation. Pour ce problème, toutes les équations sont fortement couplées, les solutions pour la température et la vitesse étant fortement dépendantes l'une de l'autre.

L'écoulement est engendré par l'impulsion causée par le changement de densité, celle-ci étant dépendante de la température. Toutefois, puisque la densité est considérée constante, on modélise l'impulsion causée par le changement de densité avec l'approximation de Boussinesq (chapitre 1).

Les données pour la mise-en-oeuvre du problème sont les suivantes :

Domaine :

$$[0.0, 0.1] \times [0.0, 1.0] \times [0.0, 1.0].$$

Conditions de bord :

$$\begin{aligned} \underline{v} \cdot \underline{n}|_{\partial\Omega} &= 0, \\ T(y=0, z) &= 0, \quad T(y=L, z) = 1, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{z=0, z=L} = 0. \end{aligned}$$

Solution initiale :

$$\underline{v}(\underline{x}) = 0, \quad p(\underline{x}) = 0, \quad T(\underline{x}) = 0.$$

Nombres caractéristiques :

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k} = 0.71, \quad Gr = \frac{\rho^2 g L^3 \beta \Delta T}{\mu^2} = 1408470, \quad Ra = Pr \cdot Gr = 10^6.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.001.$$

	$w_{max}(y =)$ $z = 1/2$	$v_{max}(z =)$ $y = 1/2$
Solution de référence	219.36 ($y = 0.962$)	64.63 ($z = 0.150$)
Nos résultats	220.35 ($y = 0.965$)	65.29 ($z = 0.159$)

TAB. 7.2 – Résultats comparatifs, convection naturelle dans une cavité carrée

Critère de convergence :

$$|v^{n+1} - v^n|_{\infty} < 1 \times 10^{-2} \quad \text{et} \quad |w^{n+1} - w^n|_{\infty} < 1 \times 10^{-2}.$$

Le maillage, pour ce problème, est non structuré et composé de prismes à base triangulaire, le maillage comportant 6178 volumes de contrôle (c'est le même maillage qui a été utilisé pour le problème de l'écoulement engendré par le déplacement d'une paroi). On a considéré que l'état stationnaire avait été atteint lorsque la variation de vitesse est devenue inférieure à 1×10^{-2} (soit $\approx 0.01\%$ de la vitesse maximale).

Dans le tableau 7.2 les valeurs maximales pour les composantes du vecteur vitesse sur les plans médians sont comparées aux résultats obtenus par d'autres chercheurs ([31] et [32]). Ces valeurs sont en très bon accord avec les solutions de référence. On tient à mentionner que la solution de référence a été obtenue avec une méthode de discrétisation d'un degré d'approximation supérieur et que cette dernière solution a été validée avec une solution expérimentale. On trouve sur la figure 7.9 (page 129), les courbes de convergence pour la variation des variables et les résidus. Les courbes des variations sont en accord avec les courbes résiduelles.

Finalement, pour des fins de comparaison, la vitesse, la pression et la température à convergence sont présentées sur les figures 7.10, 7.11, et 7.12 des pages 130 et 131.

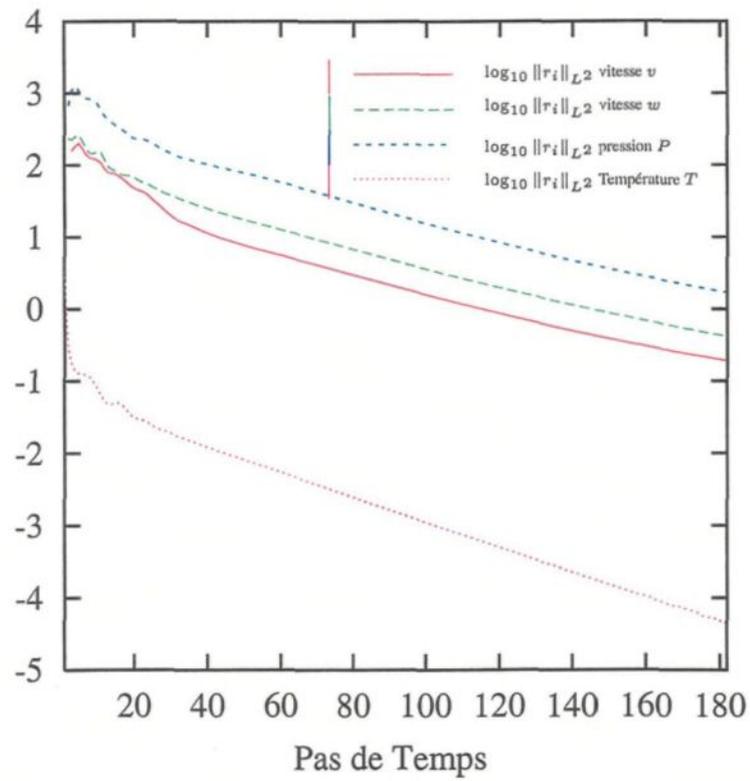
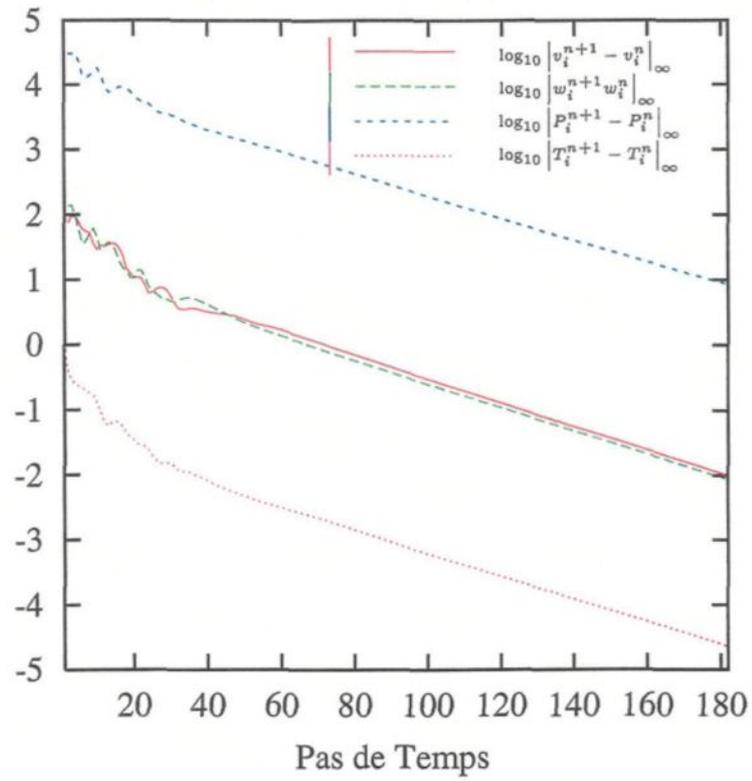


FIG. 7.9 – Convergence, convection naturelle dans une cavité carrée

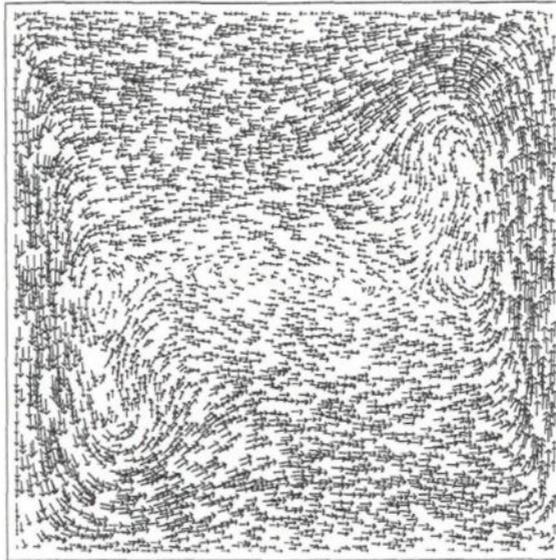


FIG. 7.10 – Vitesse, convection naturelle dans une cavité carrée



FIG. 7.11 – Pression, convection naturelle dans une cavité carrée

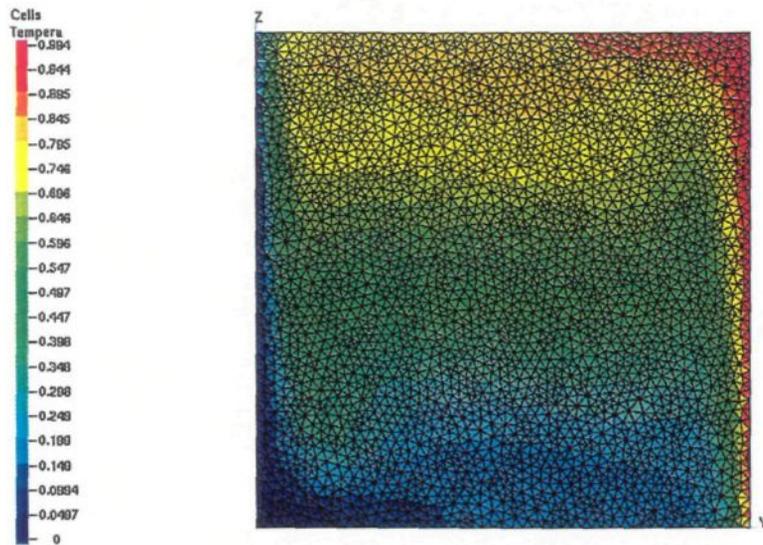


FIG. 7.12 – Température, convection naturelle dans une cavité carrée

7.4 Écoulement turbulent au-dessus d'une marche

Il s'agit d'un écoulement permanent turbulent au-dessus d'une marche (figure 7.13). L'objectif pour ce problème est de vérifier le comportement du schéma lorsqu'un modèle de turbulence est utilisé. Nos résultats seront comparés à des résultats expérimentaux obtenus par Makiola[56]. On tient à préciser que le modèle de turbulence qui a été mis en oeuvre, le modèle $k - \epsilon$, n'est pas bien adapté à ce type d'écoulement (voir Speziale[71], Chang et al.[22] et Wilcox[74]). En effet, avec ce modèle de turbulence, l'estimation de la longueur

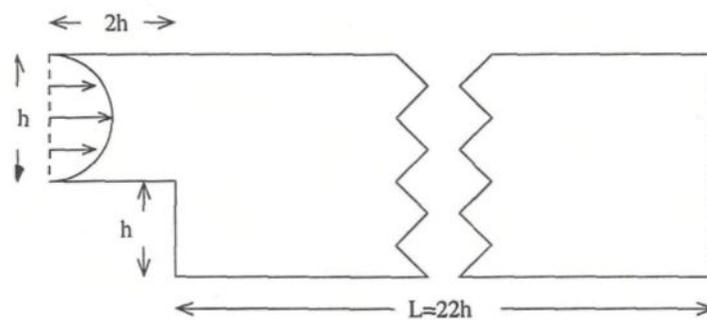


FIG. 7.13 – Géométrie, écoulement turbulent au-dessus d'une marche

de recirculation est toujours trop faible. L'objectif n'est donc pas d'obtenir une solution "exacte", mais une solution physiquement réaliste et comparable à celle obtenue par d'autres chercheurs. La solution initiale, les conditions de bord et les valeurs de référence pour ce problème sont les suivantes :

Conditions de Bord :

Entrée :

$$v(x, y = 0, z) = \text{Valeurs expérimentales}, \quad w(x, y = 0, z) = 0, \\ k(x, y = 0, z) = \frac{v^2}{\sqrt{C_\mu}}, \quad e(x, y = 0, z) = \frac{v^3}{h \cdot 0.41}.$$

Sortie :

$$\left. \frac{\partial v}{\partial n} \right|_{y=24h} = 0, \quad w(x, y = 24h, z) = 0, \quad P(x, y = 24h, z) = 0, \\ \left. \frac{\partial k}{\partial n} \right|_{y=24h} = 0, \quad \left. \frac{\partial e}{\partial n} \right|_{y=24h} = 0.$$

Parois :

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = 0, \quad (\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial n} (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_1) = -\rho (u^*)^2, \quad \tau_1 = \frac{v}{|\underline{v}|}, \\ \tau_2 = \underline{n} \times \underline{\tau}_1, \quad (\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial n} (\underline{v} \cdot \underline{\tau}_2) = 0, \\ k = \frac{(u^*)^2}{\sqrt{C_\mu}}, \quad \epsilon = \frac{|u^*|^3}{\sqrt{K y}}.$$

Solution initiale :

$$\underline{v}(\underline{x}) = \underline{0}, \quad P(\underline{x}) = 0, \\ k(\underline{x}) = 1.e - 4, \quad e(\underline{x}) = 1.e - 4.$$

Nombres caractéristiques :

$$Re = \frac{\rho v_{max} h}{\mu} = 15000, v_{max} = 1.0, h = 0.1, \rho = 1.0.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.02.$$

Critère de convergence :

$$|v^{n+1} - v^n|_{\infty} < 1 \times 10^{-4} \text{ et } |w^{n+1} - w^n|_{\infty} < 1 \times 10^{-4}.$$

Pour ce problème, tous nos volumes de contrôle sont des hexaèdres, le maillage étant constitué de 12527 volumes de contrôle.

La figure 7.14 (page 134) montre le profil de la vitesse le long de la conduite. Bien que nos résultats ne soient pas les mêmes que ceux obtenus expérimentalement, ceux-ci sont réalistes. Soit x la longueur de la zone de recirculation, le rapport $\frac{x}{h}$ est de 7.3, ce qui est de 11% inférieure à la valeur 8.2 prédite expérimentalement. Cette erreur est comparable à celle d'autres chercheurs pour un problème du même type et le modèle $k - e$. En effet, l'erreur que l'on retrouve dans la littérature pour des problèmes comparables varie de 14% à 31%.

Finalement, on trouve les courbes de convergence sur la figure 7.15.

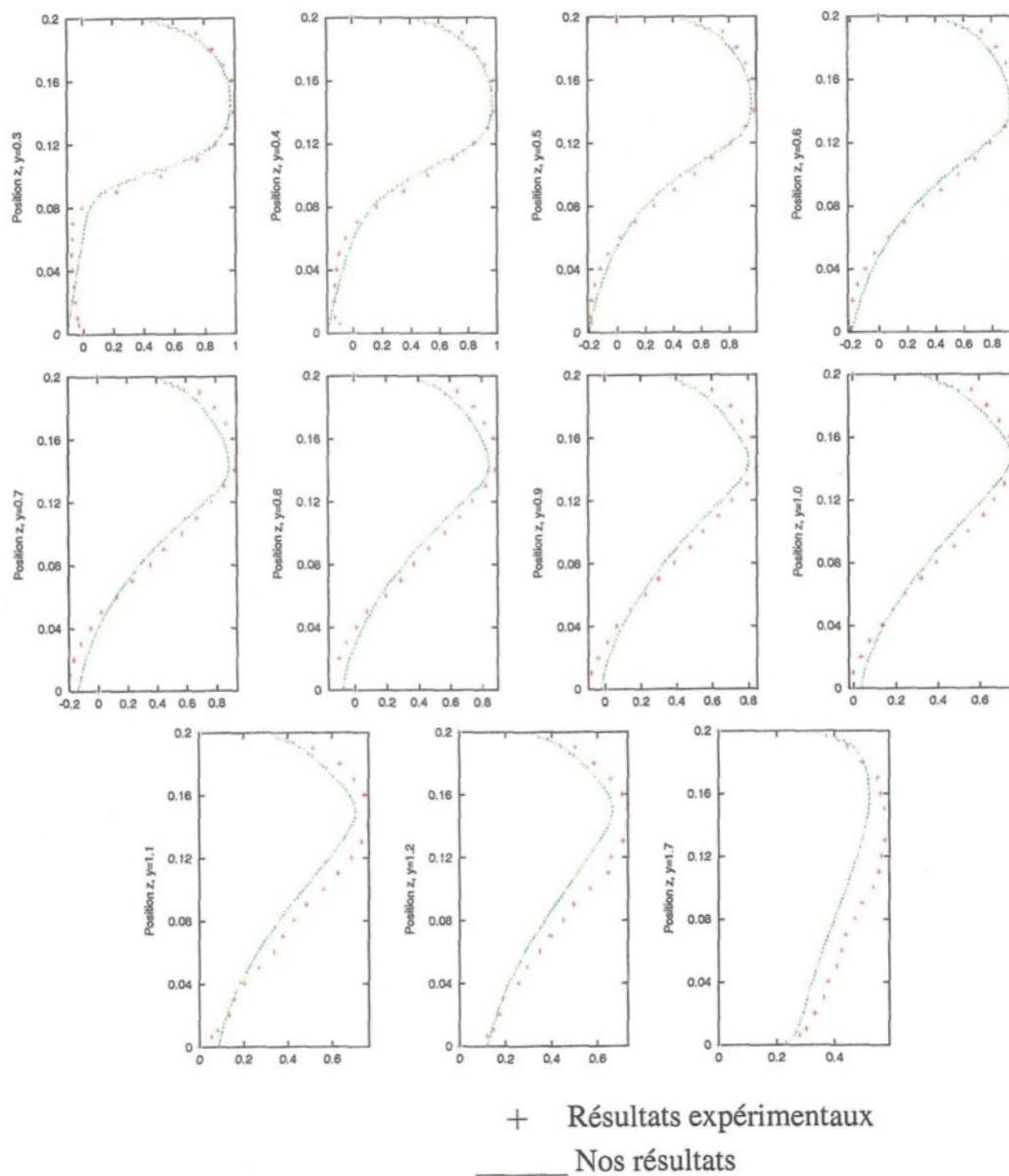


FIG. 7.14 – Profils de vitesse, écoulement au-dessus d'une marche

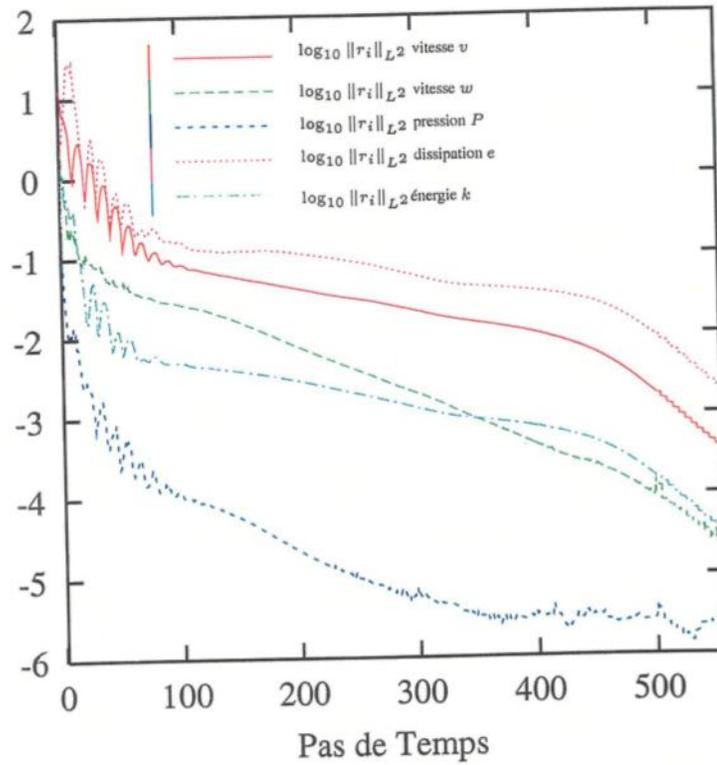
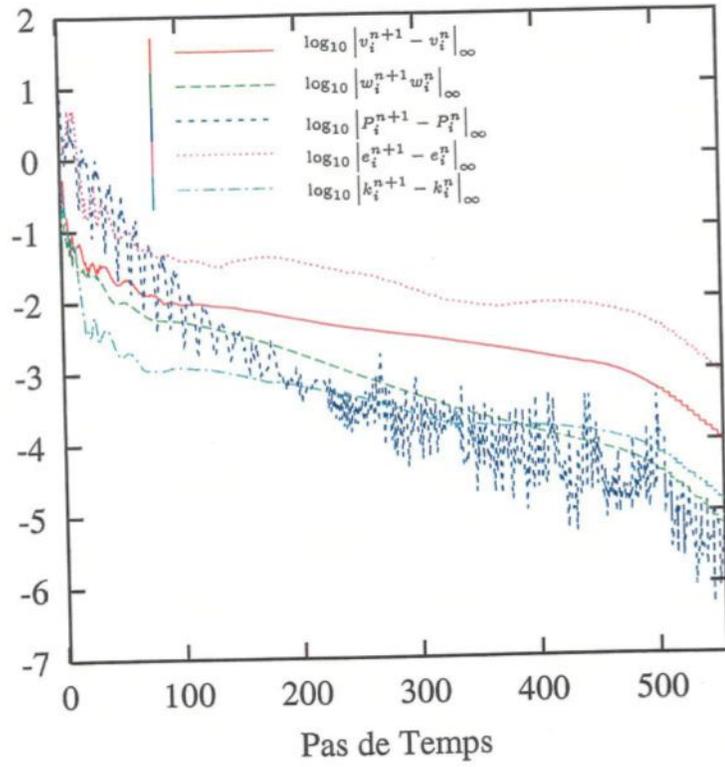


FIG. 7.15 – Convergence, écoulement au-dessus d'une marche

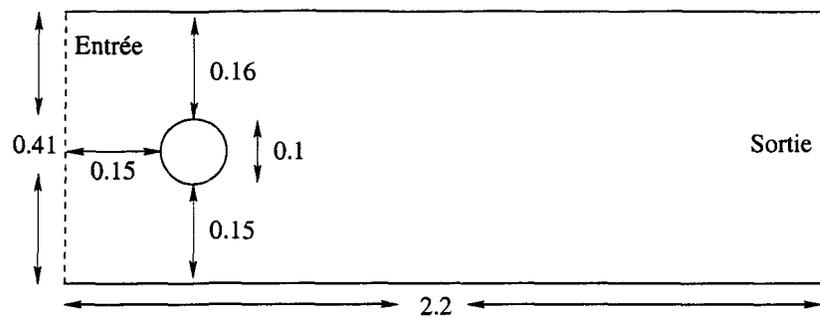


FIG. 7.16 – Géométrie, écoulement 2D autour d'un cylindre

7.5 Écoulement autour d'un cylindre

Il s'agit d'une série de problèmes d'écoulements laminaires incompressibles autour d'un obstacle. Le but est de vérifier si notre schéma peut adéquatement calculer les valeurs des coefficients de portance et de traînée pour des cas transitoires et permanents en 2D et 3D.

7.5.1 Écoulement 2D permanent autour d'un cylindre

Les données pour la mise-en-oeuvre de ce problème sont les suivantes :

Domaine : Figure 7.16.

Conditions de bord :

Entrée :

$$v(y = 0, z) = \frac{4 \cdot v_{moy} \cdot (H - z)}{H^2}, \quad w(y = 0, z) = 0.$$

Sortie :

$$\left. \frac{\partial v}{\partial n} \right|_{y=2.2} = 0, \quad w(y = 2.2, z) = 0, \quad P(y = 2.2, z) = 0.$$

Parois :

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = 0, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau} = 0.$$

Solution initiale :

$$\underline{v}(\underline{x}) = \underline{0}, \quad P(\underline{x}) = 0.$$

Nombres caractéristiques :

$$Re = \frac{\rho v_{moy} D}{\mu} = 20, \quad \rho = 1.0, \quad v_{moy} = 0.3, \quad D = 0.1, \quad \mu = 0.001.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.1.$$

Critère de convergence :

$$|v^{n+1} - v^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-5} \quad \text{et} \quad |w^{n+1} - w^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-5}.$$

Ce problème a été résolu sur trois maillages différents. On pourra donc vérifier si le maillage influence significativement la précision lors du calcul des coefficients de portance et de traînée. Puisqu'il s'agit d'une géométrie relativement complexe, on a pu exploiter la flexibilité du schéma et utiliser différents types de volumes de contrôle au sein du même maillage :

- semi-structuré à l'entrée et à la sortie ;
- semi-structuré autour du cylindre ;
- non structuré dans la zone de contournement.

La figure 7.17 de la page 138 montre des coupes du maillage à l'entrée de la conduite et autour du cylindre. On rappelle que les tétraèdres (les triangles) des parties semi-structurées du maillage sont combinés pour former des hexaèdres. Cette configuration est préférable aux triangles. En effet, ce maillage est mieux adapté à l'écoulement (le maillage ne nuit pas à l'écoulement).

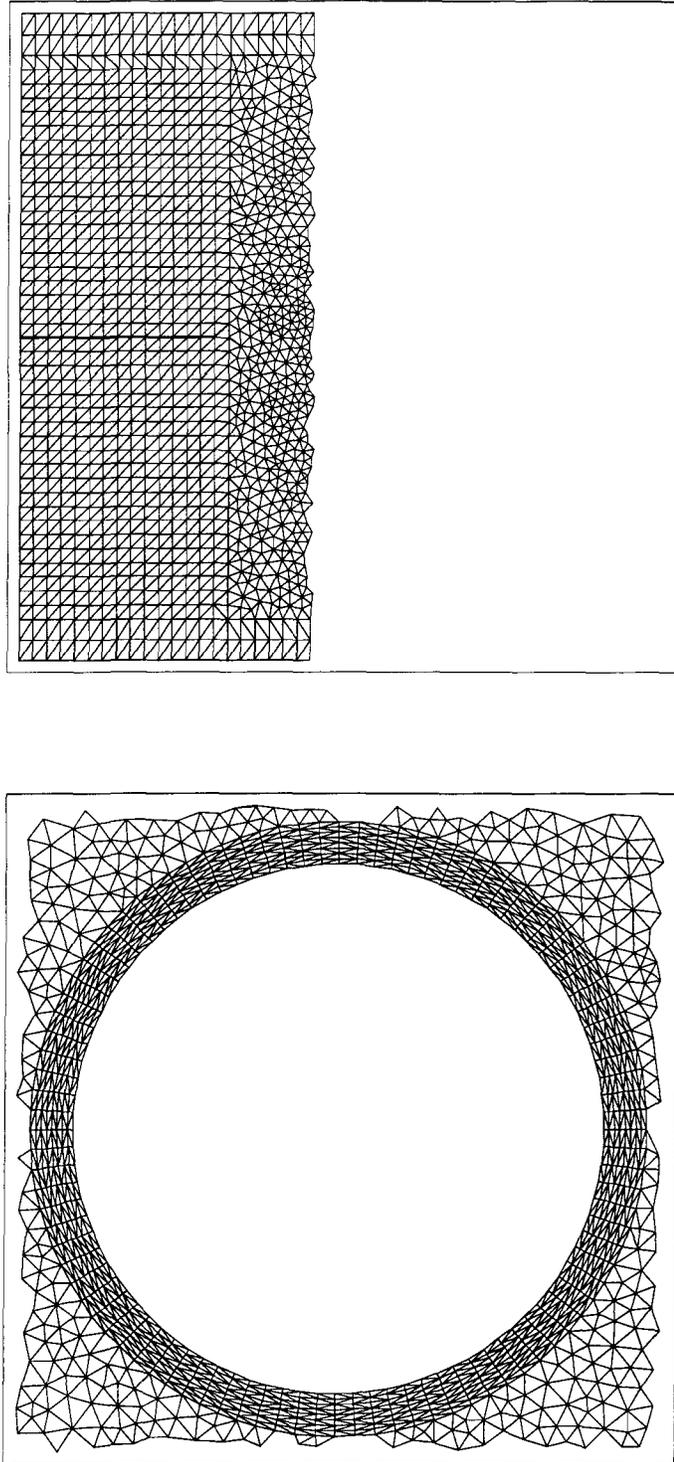


FIG. 7.17 – Coupes du maillage, écoulement 2D permanent autour d'un cylindre

Pour ce problème, on n'a pas de solution de référence. Toutefois, on pourra faire des comparaisons à l'aide des quantités suivantes :

1. le coefficient de traînée :

$$C_D = \frac{2 \cdot F_D}{\rho \cdot v_{moy}^2 \cdot D \cdot H \cdot L},$$

$$F_D = \int_{\partial S} \left(0, \mu \frac{\partial v_\tau}{\partial n}, P \right) \cdot \underline{\tau} dA;$$

2. le coefficient de portance :

$$C_L = \frac{2 \cdot F_L}{\rho \cdot v_{moy}^2 \cdot D \cdot H \cdot L},$$

$$F_L = - \int_{\partial S} \left(0, \mu \frac{\partial v_\tau}{\partial n}, P \right) \cdot \underline{n} dA;$$

3. la différence de pression aux extrémités du disque :

$$\Delta P = P(0, 0.15, 0.2) - P(0, 0.25, 0.2);$$

où :

- $L = 0.10$ est la profondeur, l'écoulement étant résolu en 3D ;
- $\underline{\tau}$ est un vecteur tangent à la surface du disque ;
- $v_\tau = \underline{v} \cdot \underline{\tau}$ est la vitesse tangente à la surface du disque ;
- \underline{n} est le vecteur normale unitaire pointant vers l'extérieur du disque ;
- ∂S est la surface du disque.

Les résultats obtenus pour les trois maillages sont présentés dans le tableau 7.3. Ces résultats sont en accord avec ceux de Turek[66]. On constate toutefois que les maillages les plus fins ne permettent pas d'améliorer significativement la précision des résultats. En effet, le meilleur coefficient de portance est obtenu avec le deuxième maillage et le meilleur coefficient de traînée avec le troisième maillage. On tient à préciser que les maillages les plus fins ont été obtenus manuellement en ajoutant des noeuds lors de la génération du maillage, et non pas en utilisant une méthode de raffinement automatique du maillage. Bien que cette façon de

Volumes de contrôle	C_L	C_D	ΔP
15352	0.00970	5.570	0.1165
23162	0.0110	5.567	0.1167
27085	0.0120	5.574	0.1169
Valeurs de référence	0.0104–0.0110	5.57–5.59	0.1172–0.1176

TAB. 7.3 – Coefficients, écoulement 2D permanent autour d'un cylindre

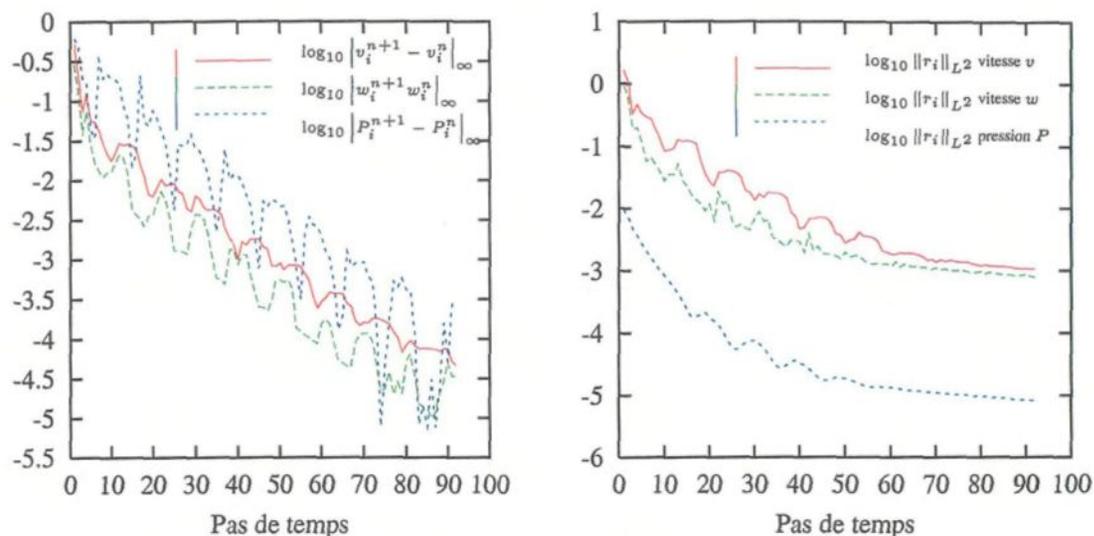


FIG. 7.18 – Convergence, écoulement permanent 2D autour d'un cylindre

procéder puisse donner de bons résultats lorsque la géométrie est simple (tel le problème de l'écoulement engendré par le déplacement d'une paroi), elle paraît ne pas être efficace lorsque la géométrie est plus complexe. Pour bien étudier la convergence du schéma lors du raffinement du maillage, il faudrait utiliser un remaillieur (déplacement et ajout de noeuds) ou bien un algorithme de raffinement automatique (ou isotrope) du maillage.

On montre les courbes de convergence sur la figure 7.18. On constate que les variations des trois variables (particulièrement la pression) ne diminuent pas de façon asymptotique, mais cyclique. Ce comportement est toutefois en accord avec les courbes résiduelles. Bien que les variations pour ces courbes soient beaucoup moins prononcées, elles aussi sont cycliques.

7.5.2 Écoulement 2D transitoire autour d'un cylindre

Ce problème est similaire à celui de la section précédente. Toutefois, la vitesse à l'entrée est plus élevée et l'écoulement est périodique. En plus des valeurs comparatives du problème précédent, le nombre de Strouhal $St = \frac{Df}{v_{moy}}$ (où f est la fréquence de séparation) est calculé. Les périodes débutent lorsque le coefficient de portance atteint sa valeur maximale. On présente également la différence de pression ΔP calculée au temps $t_0 + \frac{1}{2f}$, t_0 étant le début d'une période. Puisqu'il s'agit d'un écoulement périodique, on pourra vérifier si le schéma prédit adéquatement l'évolution d'un écoulement transitoire laminaire.

Les données pour la mise-en-oeuvre du problème sont les mêmes que pour le problème précédent. Toutefois, la vitesse d'entrée est supérieure et il n'y a pas de critère de convergence (l'écoulement étant périodique), mais plutôt un arrêt automatique après un nombre pré-établi de pas de temps.

Nombres caractéristiques :

$$Re = \frac{\rho v_{moy} D}{\mu} = 100, \quad \rho = 1.0, \quad v_{moy} = 1.0, \quad D = 0.1, \quad \mu = 0.001.$$

Pas de temps :

$$\delta t = \{0.002, 0.0015, 0.001, 0.00075\}$$

Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 7.4 à la page 142. Pour toutes les simulations, la valeur du paramètre β de l'équation de projection

$$\beta \frac{v^{n+1} - v^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla (\delta P^{n+1})$$

est $3/2$ pour une extrapolation du gradient de pression (voir figure 3.2, page 58). Le maillage est similaire à celui utilisé pour le problème précédent. Il est toutefois plus fin, ce dernier maillage étant composé de 38645 volumes de contrôle.

Nos résultats sont en accord avec ceux présentés par Turek[66]. Ce test montre que la méthode de projection qui est privilégiée pour notre schéma (section 4.7), permet bel et bien de simuler adéquatement des écoulements transitoires et non pas seulement de calculer la solution d'écoulements permanents.

δt	C_D $t = t_0$	C_L $t = t_0$	$St = \frac{Df}{v_{moy}}$	ΔP $t = t_0 + \frac{1}{2f}$
0.002	3.25	1.076	0.287	2.50
0.0015	3.24	1.043	0.287	2.50
0.001	3.23	1.001	0.288	2.50
0.00075	3.22	0.984	0.291	2.49
Valeurs de référence	3.22–3.24	0.99–1.01	0.295–0.305	2.46–2.50

TAB. 7.4 – Coefficients, écoulement 2D périodique autour d'un cylindre

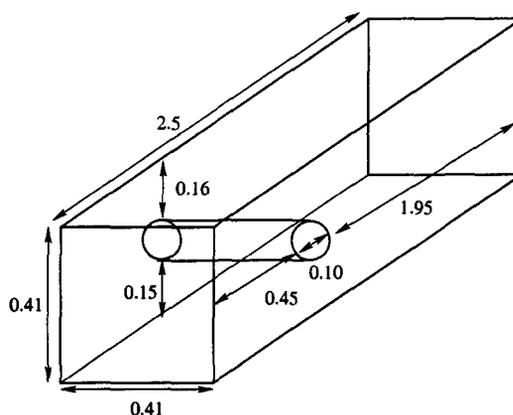


FIG. 7.19 – Géométrie, écoulement 3D autour d'un cylindre

7.5.3 Écoulement 3D permanent autour d'un cylindre

Il s'agit d'un écoulement 3D permanent autour d'un cylindre placé dans une conduite carrée. Le domaine est montré sur la figure 7.19. Les données pour la mise-en-oeuvre sont les suivantes :

Conditions de bord :

Entrée :

$$\begin{aligned}
 u(x, y = 0, z) &= 0, \\
 v(x, y = 0, z) &= \frac{16 \cdot v_{moy} \cdot x \cdot z \cdot (H - x)(H - z)}{H^4}, \\
 w(x, y = 0, z) &= 0.
 \end{aligned}$$

Sortie :

$$\begin{aligned} u(x, y = 2.5, z) &= 0, \\ \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_{y=2.5} &= 0, \\ w(x, y = 2.5, z) &= 0, \\ P(y = 2.5, z) &= 0. \end{aligned}$$

Parois :

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = 0, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau} = 0.$$

Solution initiale :

$$\underline{v}(\underline{x}) = \underline{0}, \quad P(\underline{x}) = 0.$$

Nombres caractéristiques :

$$Re = \frac{\rho v_{moy} D}{\mu} = 20, \quad \rho = 1.0, \quad v_{moy} = 1.0, \quad D = 0.1, \quad H = 0.41, \quad \mu = 0.005.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.1.$$

Critère de convergence :

$$|u^{n+1} - u^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-4}, \quad |v^{n+1} - v^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-4} \quad \text{et} \quad |w^{n+1} - w^n|_{\infty} < 2 \times 10^{-4}.$$

Il s'agit du premier problème résolu où les phénomènes sont réellement tridimensionnels. On peut donc vérifier si la méthode peut adéquatement prédire un écoulement 3D. Le problème a été résolu avec trois maillages. Ces maillages sont similaires à ceux utilisés pour résoudre l'écoulement 2D permanent autour d'un cylindre. Pour ces trois maillages, on a construit un maillage 2D dans le plan yoz . Le maillage 3D a ensuite été obtenu en effectuant 25 translations du maillage 2D. Tout comme pour les deux problèmes précédents, les solutions ont été validées à l'aide des quantités de références suivantes :

1. le coefficient de traînée :

$$C_D = \frac{2 \cdot F_D}{\rho \cdot v_{moy}^2 \cdot D \cdot H \cdot H},$$

$$F_D = \int_{\partial S} \left(0, \mu \frac{\partial v_\tau}{\partial n}, P \right) \cdot \underline{\tau} dA;$$

2. le coefficient de portance :

$$C_L = \frac{2 \cdot F_L}{\rho \cdot v_{moy}^2 \cdot D \cdot H \cdot H},$$

$$F_L = - \int_{\partial S} \left(0, \mu \frac{\partial v_\tau}{\partial n}, P \right) \cdot \underline{n} dA;$$

3. la différence de pression pour deux points du cylindre :

$$\Delta P = P(0.205, 0.45, 0.2) - P(0.205, 0.55, 0.2)$$

où :

- $\underline{\tau}$ est un vecteur tangent à la surface du cylindre ;
- v_τ est la vitesse tangente à la surface du cylindre ;
- \underline{n} est le vecteur normale unitaire pointant vers l'extérieur du cylindre ;
- ∂S est la surface du cylindre.

Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 7.5 (page 146). Les quantités calculées avec notre schéma sont en très bon accord avec celles présentées par Turek[66]. Tout comme pour les autres problèmes, on montre les courbes de convergence pour le troisième maillage sur la figure 7.20 de la page suivante.

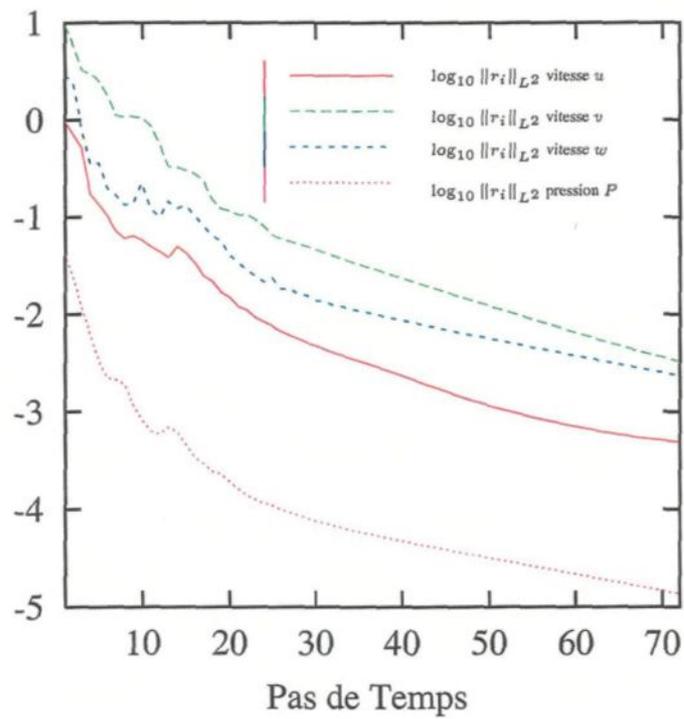
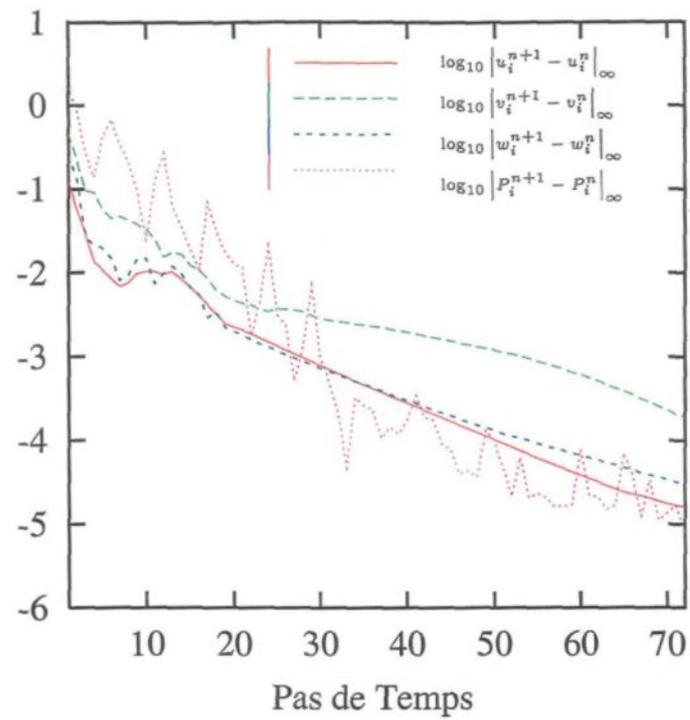


FIG. 7.20 – Convergence, écoulement 3D permanent autour d'un cylindre

Maillage	Inconnues	Temps de résolution (secondes)	Itérations	Espace mémoire (Mégaoctets)	C_L	C_D	ΔP
M1	646600	7994	72	394	0.0115	6.201	0.170
M2	794000	9400	73	482	0.0105	6.187	0.170
M3	1069000	13514	72	607	0.00824	6.180	0.170
Valeurs de référence	753664 à 12582912			88 à 3571	0.008 à 0.010	6.05 à 6.25	0.165 à 0.175

TAB. 7.5 – Coefficients et statistiques, écoulement 3D permanent autour d'un cylindre

7.6 Écoulement thermique 3D dans un cylindre

Il s'agit d'un écoulement thermique forcé dans un cylindre. À l'entrée du cylindre la vitesse et la température du fluide sont constantes. L'objectif est de vérifier si notre schéma peut adéquatement simuler un problème de transport d'un scalaire passif. Pour ce problème, la solution initiale, les conditions de bord et les valeurs de référence sont les suivantes :

Domaine :

$$\partial\Omega = \begin{pmatrix} x(\theta) \\ y(\theta) \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.05 \cdot \cos(\theta) \\ 0.05 \cdot \sin(\theta) \\ z \end{pmatrix}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2, \quad 0 \leq z \leq 1.5.$$

Conditions de bord :

Entrée :

$$u(x, y, z = 0) = 0, \quad v(x, y, z = 0) = 0, \quad w(x, y, z = 0) = 1, \\ T(x, y, z = 0) = 1.$$

Sortie :

$$u(x, y, z = 1.5) = 0, \quad v(x, y, z = 1.5) = 0, \quad \left. \frac{\partial w}{\partial n} \right|_{z=1.5} = 0, \\ P(x, y, z = 1.5) = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{z=1.5} = 0.$$

Parois :

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = 0, \quad \underline{v} \cdot \underline{\tau} = 0, \quad T = 0.$$

Solution initiale :

$$\underline{v}(\underline{x}) = \underline{0}, \quad P(\underline{x}) = 0, \quad T(\underline{x}) = 0.$$

Nombres caractéristiques :

$$Re_D = \frac{\rho w_{moy} D}{\mu} = 100, \quad w_{moy} = 1.0, \quad \rho = 1.0,$$

$$Pr = \frac{\mu c_p}{k} = 2.0, \quad D = 0.1, \quad c_p = 1.0.$$

Pas de temps :

$$\delta t = 0.1.$$

w_{moy} est la vitesse moyenne transversale pour une section de la conduite, D est le diamètre de la conduite. Pour profiter de la symétrie du problème, l'écoulement n'a été solutionné que pour un quartier du cylindre. Le maillage est constitué de prismes à base triangulaire. La base de ces prismes repose dans le plan $x \circ y$. Le maillage 3D a été obtenu en effectuant une translation d'un maillage 2D. En tout, le maillage est composé de 16000 volumes de contrôle.

Il s'agit d'un des rares problèmes 3D dont on connaît la solution analytique pour une partie du domaine. Pour un écoulement laminaire ($Re_D \leq 2300$), la longueur nécessaire pour que l'écoulement se développe (c'est-à-dire pour que le profil de vitesse soit parabolique) est donnée par l'expression

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{lam} \approx 0.05 Re_D.$$

Dans la région où l'écoulement est développé, la vitesse w et le gradient de pression peuvent être calculées à l'aide des expressions

$$w\left(r = \sqrt{x^2 + y^2}\right) = \frac{1}{4\mu} \frac{\partial P}{\partial z} \left(\frac{D}{2}\right)^2 \left(1 - \left(\frac{r}{D/2}\right)^2\right),$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{8 \cdot \mu \cdot w_{moy}}{(D/2)^2}.$$

En ce qui concerne la température, la longueur nécessaire pour que l'écoulement soit thermiquement développé est donnée par

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{lam,T} \approx 0.05 Re_D \cdot Pr.$$

Pour la température, on ne possède pas de solution algébrique. Toutefois, dans la région où l'écoulement est thermiquement développé, la température axiale doit satisfaire l'expression

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{T_s - T(\underline{x})}{T_s - T_m(z)} \right) = 0$$

où $T_m(z)$ est la température moyenne axiale.

Les figures 7.21 à 7.24 (pages 149 à 151) illustrent les résultats obtenus.

La vitesse le long du cylindre est présentée sur la figure 7.21 pour des coupes suivant 4 positions radiales différentes à l'angle $\theta = \pi/4$. Pour toutes ces coupes, la vitesse devient constante et respecte la solution prédite théoriquement. En effet lorsque l'écoulement est développé, le gradient $\frac{\partial w}{\partial z}$ doit être nul. De plus, la distance pour que l'écoulement se développe respecte la longueur prédite par la théorie :

$$(L)_{lam} \approx 0.05 \cdot 100 \cdot 0.1 = 0.5.$$

La figure 7.22 compare la vitesse transversale à la solution analytique près de la sortie. La vitesse transversale est fonction du rayon, l'angle $\theta = \pi/4$ est constant. On constate que la solution obtenue respecte bien la solution analytique.

La figure 7.23 montre le graphe de la température adimensionnée

$$\tilde{T} = \left(\frac{T_s - T(\underline{x})}{T_s - T_m(z)} \right)$$

pour des coupes en 4 positions radiales différentes à l'angle $\theta = \pi/4$. On constate que effectivement, l'écoulement devient thermiquement développé. En effet, cette température devient constante pour une position radiale donnée. De plus, la distance pour que l'écoulement soit thermiquement développé respecte la valeur

$$(L)_{lam,T} \approx 0.05 \cdot 100 \cdot 2 \cdot 0.1 = 1$$

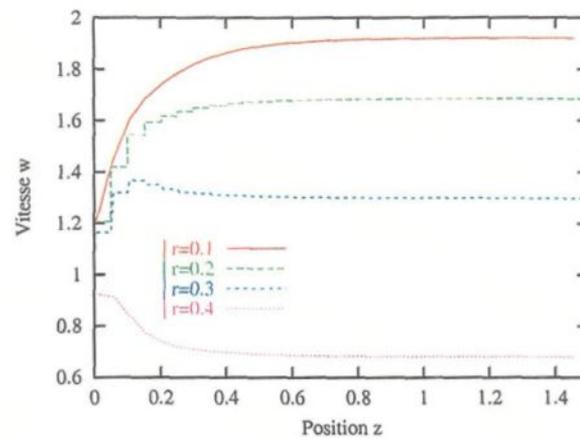


FIG. 7.21 – Vitesse transversale, écoulement thermique 3D dans un cylindre

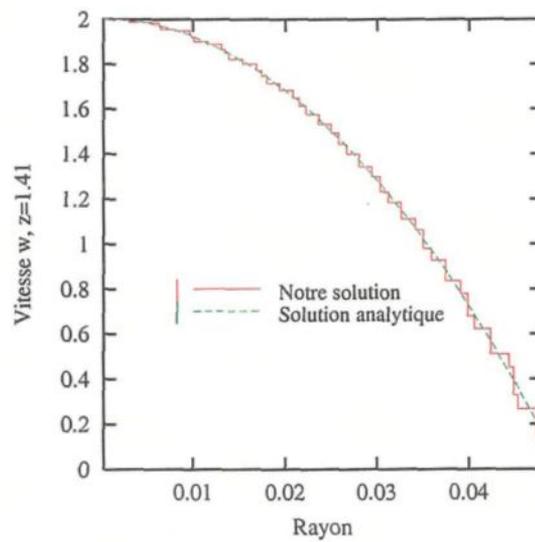


FIG. 7.22 – Profil de vitesse à la sortie, écoulement thermique 3D dans un cylindre

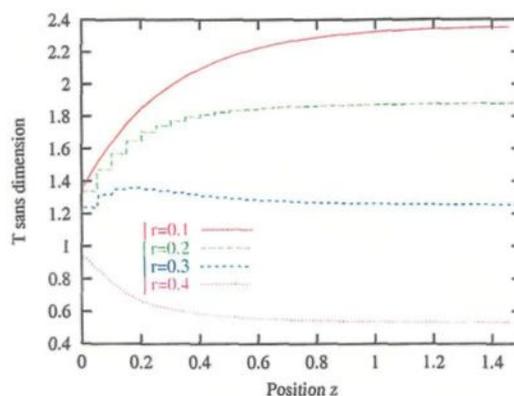


FIG. 7.23 – Profil de température, écoulement thermique 3D dans un cylindre

prédite par la théorie.

La figure 7.24 compare le gradient de pression calculé numériquement à la solution théorique

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{8 \cdot \mu \cdot w_{moy}}{(D/2)^2} = -3.2.$$

Ces coupes suivent les mêmes droites qui ont été utilisées sur les figures précédentes. Cette figure montre que notre solution est en accord avec la solution prédite théoriquement. Le gradient de pression dans la partie développée est constant et indépendant de la position. Finalement, comme pour les autres problèmes, on trouve les différentes courbes de convergence sur la figure 7.25 à la page 152. Encore une fois, la vitesse calculée lors de la projection est bien une solution des équations de Navier-Stokes. De plus, on peut constater que le système a convergé assez rapidement vers la solution, la résolution ne nécessitant que 49 itérations.

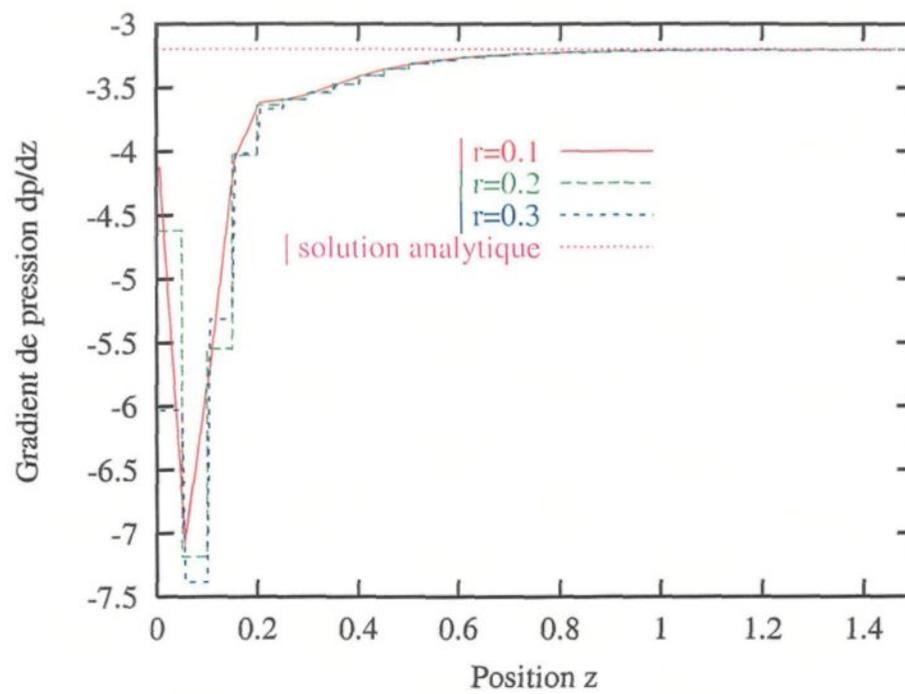


FIG. 7.24 – Gradient de pression, écoulement thermique 3D dans un cylindre

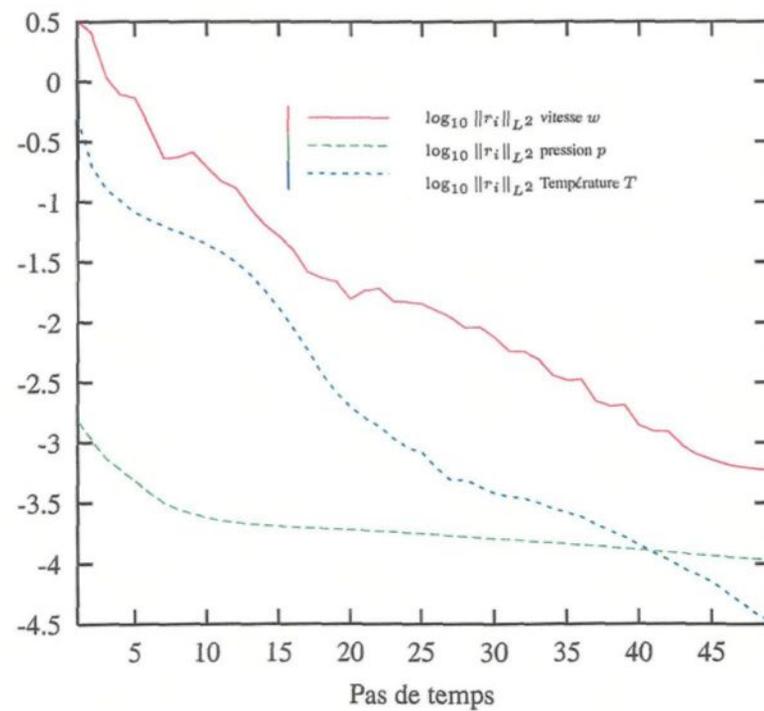
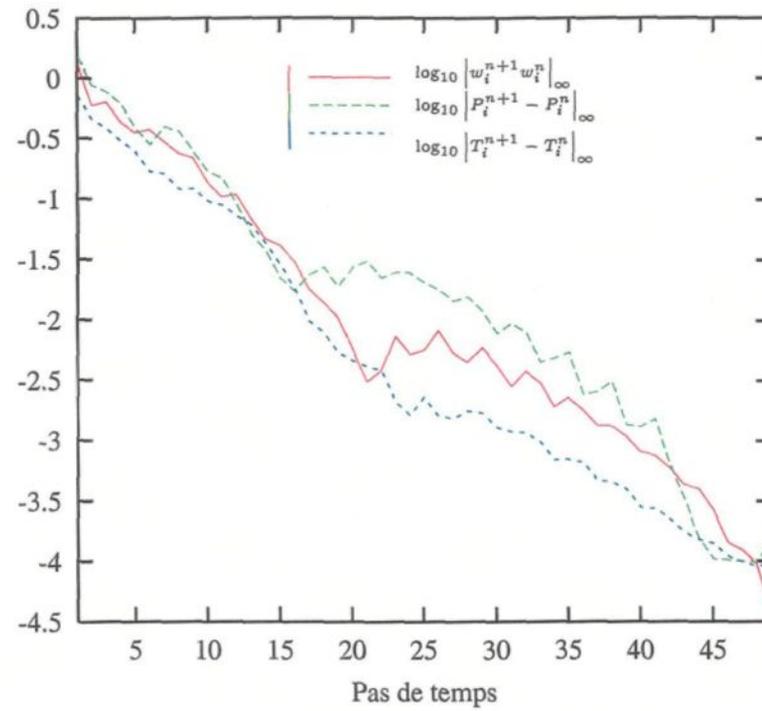


FIG. 7.25 – Convergence, écoulement thermique 3D dans un cylindre

Chapitre 8

Extension de la méthode aux écoulements avec densité variable

Introduction

Notre schéma peut aussi être utilisé pour la résolution d'écoulements incompressibles où la densité est variable. Pour ces écoulements, la densité est souvent une fonction des concentrations volumiques des constituants d'un mélange. Dans ce chapitre, on propose une version plus générale du schéma qui supporte la résolution de cette catégorie d'écoulements. Malheureusement, aucune validation de l'approche proposée n'a été effectuée.

Essentiellement, pour ces écoulements, la projection est effectuée après la résolution de toutes les équations de transport et l'algorithme de résolution est :

- Étant donné une solution initiale $\underline{v}^{-1}, p^{-1}, \rho^0, \phi^0$:
 - Appliquer l'opérateur de projection : $(\underline{v}^0, p^0, \nabla p^0) = P(\dots)$.
- Étant donné $\underline{v}^n, p^n, \rho^n, \phi^n$:
 - pour un écoulement turbulent, calculer les coefficients de diffusion turbulente et la vitesse de frottement sur la paroi ;
 - appliquer l'opérateur de convection-diffusion aux champs scalaires telle l'énergie cinétique turbulente, la température ou les concentrations volumiques :
$$\phi^{n+1} = CD(\dots);$$
- calculer la densité ρ^{n+1} ;

- appliquer l'opérateur de convection-diffusion à la vitesse : $\underline{v}^{n+1/2} = CD(\dots)$;
- appliquer l'opérateur de projection : $(\underline{v}^{n+1}, p^{n+1}, \nabla p^{n+1}) = P(\dots)$.

Seules la discrétisation temporelle et la projection ont à être modifiées.

8.1 Discrétisation temporelle

Pour les écoulements où la densité est variable, l'approximation de la dérivée temporelle est :

$$\left. \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} = \begin{cases} \frac{\rho^n \phi^{n+1} - \rho^n \phi^n}{\delta t}, & \text{cas stationnaire} \\ \frac{3\rho^n \phi^{n+1} - 4\rho^n \phi^n - \rho^{n-1} \phi^{n-1}}{2\delta t}, & \text{autrement} \end{cases}$$

La densité n'est mise à jour qu'après la résolution des équations de conservation des variables scalaires et la discrétisation temporelle de tout le système est :

1. Convection et diffusion des variables scalaires :

$$\left. \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right|_{t_{n+1}} + \nabla \cdot [\underline{v}(t_{n+1}) (\rho^n \phi^{n+1}) - \alpha \nabla \phi^{n+1}] = s^n.$$

2. Mise à jour de la densité pour le temps $t = t_{n+1}$: selon la physique du problème.
3. Extrapolation du champ de vitesse :

$$\left. \frac{\partial(\rho\underline{v})}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} + \nabla \cdot [\underline{v}(t = t_{n+1}) \otimes (\rho^n \underline{v}^{n+1/2}) - \mu \nabla \underline{v}^{n+1/2}] + \nabla p^n = \underline{f}^n.$$

4. Projection :

$$\beta \frac{\rho^{n+1} \underline{v}^{n+1} - \rho^n \underline{v}^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla(\delta p^{n+1})$$

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho^{n+1} \underline{v}^{n+1}) = 0.$$

8.2 Calcul de la densité d'interface

Tout comme pour les autres propriétés physiques, la densité à l'interface est approximée avec une moyenne géométrique. Soit l'interface $\sigma_{K,L}$ séparant les volumes K et L , la densité d'interface $\rho_{K,L}$ est :

$$\rho_{K,L} = \frac{m(K)\rho_K + m(L)\rho_L}{m(K) + m(L)}.$$

8.3 Projection

Après l'étape de convection-diffusion, l'équation de conservation de la masse n'est pas nécessairement satisfaite. Pour qu'elle soit satisfaite, on effectue une projection en deux étapes :

1. Une étape d'extension (de ré-interpolation) sur les interfaces qui permet d'éviter les faux modes de pression.
2. Une étape de projection pour corriger la pression et la vitesse.

8.3.1 Opérateur d'extension $E(\dots)$

Soit \underline{v}_σ la vitesse à l'interface σ , son évolution du temps $t = t_n$ au temps $t = t_{n+1/2}$ doit satisfaire l'équation

$$\left. \frac{\partial(\rho \underline{v})}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} = -\nabla \cdot [\underline{v}(t = t_{n+1}) \otimes (\rho^n \underline{v}^{n+1/2}) - \mu \nabla \underline{v}^{n+1/2}] + \nabla p^n + \underline{f}^n$$

En intégrant le membre de gauche de cette équation sur les volumes de contrôle associés à l'interface σ , on a :

$$\left. \frac{\partial(\rho \underline{v})}{\partial t} \right|_{\sigma, t=t_{n+1}} = \frac{m(K)}{m(K) + m(L)} \left. \frac{\partial(\rho \underline{v})}{\partial t} \right|_{K, t=t_{n+1}} + \frac{m(L)}{m(K) + m(L)} \left. \frac{\partial(\rho \underline{v})}{\partial t} \right|_{L, t=t_{n+1}}$$

La vélocité d'interface est calculée à partir des expressions :

1. écoulement permanent :

$$\underline{v}_\sigma^{n+1/2} = E(\underline{v}_K, \underline{v}_L) = \underline{v}_\sigma^n + \begin{cases} \frac{m(K)}{m(K) + m(L)} (\underline{v}_K^{n+1/2} - \underline{v}_K^n) \\ + \frac{m(L)}{m(K) + m(L)} (\underline{v}_L^{n+1/2} - \underline{v}_L^n), & \sigma \in \mathcal{E}_{int} \\ (\underline{v}_K^{n+1/2} - \underline{v}_K^n), & \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \end{cases}$$

2. écoulement transitoire :

$$\begin{aligned} \underline{v}_\sigma^{n+1/2} &= E(\underline{v}_K, \underline{v}_L) \\ &= \frac{4\rho^n \underline{v}_\sigma^n - \rho^{n-1} \underline{v}_\sigma^{n-1}}{3\rho^n} \\ &+ \frac{1}{3\rho^n} \begin{cases} \frac{m(K)}{m(K) + m(L)} (3\rho^n \underline{v}_K^{n+1/2} - 4\rho^n \underline{v}_K^n + \rho^{n-1} \underline{v}_K^{n-1}) \\ + \frac{m(L)}{m(K) + m(L)} (3\rho^n \underline{v}_L^{n+1/2} - 4\rho^n \underline{v}_L^n + \rho^{n-1} \underline{v}_L^{n-1}), & \sigma \in \mathcal{E}_{int} \\ (3\rho^n \underline{v}_K^{n+1/2} - 4\rho^n \underline{v}_K^n + \rho^{n-1} \underline{v}_K^{n-1}), & \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \end{cases} \end{aligned}$$

8.3.2 Opérateur de projection $P(\dots)$.

L'opérateur de projection est maintenant défini à partir des équations

$$\beta \frac{\rho^{n+1} \underline{v}^{n+1} - \rho^n \underline{v}^{n+1/2}}{\delta t} = -\nabla (\delta p^{n+1}) \quad (8.1)$$

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho^{n+1} \underline{v}^{n+1}) = 0. \quad (8.2)$$

Correction de la pression

Pour obtenir une équation dont la seule inconnue est la correction de pression, on considère l'équation (8.1) que l'on substitue dans l'équation (8.2) :

$$-\nabla \cdot \nabla (\delta p^{n+1}) = -\frac{\beta}{\delta t} \nabla \cdot (\rho^n \underline{v}^{n+1/2}) + \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\delta t}$$

Ensuite, cette équation est intégrée sur un volume générique K et le théorème de Gauss est appliqué pour obtenir l'intégrale de surface

$$-\int_{\partial K} \nabla (\delta p^{n+1}) \cdot \underline{n} dS = -\int_{\partial K} \frac{\beta}{\delta t} (\rho^n \underline{v}^{n+1/2}) \cdot \underline{n} dS + \int_K \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\delta t} dV$$

L'opérateur de diffusion permet d'obtenir l'équation discrète

$$-\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma (\delta p_L - \delta p_K) = -\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \frac{\beta}{\delta t} m(\sigma) v_\sigma^{n+1/2} + \frac{m(K)}{\delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n)$$

Deux types de conditions de bord peuvent être imposées :

1. flux de masse (débit massique) \dot{m} imposé :

$$\nabla (\delta p^{n+1}) \cdot \underline{n} = \frac{\beta}{\delta t} (\rho^n v^{n+1/2} - \dot{m}) ;$$

2. pression imposée :

$$\delta p = p^{n+1} - p^n .$$

Correction du champ convecteur

Après la résolution de l'équation de correction de pression, la vitesse d'interface est corrigée à l'aide de l'équation

$$v_\sigma^{n+1} = \frac{\rho_\sigma^n}{\rho_\sigma^{n+1}} v_\sigma^{n+1/2} - \frac{\delta t}{\beta \rho_\sigma^{n+1}} \frac{\tau_\sigma}{m(\sigma)} (\delta p_L - \delta p_K) .$$

Mise-à-jour de la vitesse sur les volumes de contrôle

La mise-à-jour de la vitesse est effectuée à l'aide de l'opérateur défini à la section 4.7.

8.4 Choix de l'algorithme de résolution des équations linéaires

Lorsque la densité varie avec le temps, la nature de la matrice des coefficients du système d'équations discrètes est modifiée et elle n'est pas nécessairement à diagonale dom-

inante. En effet, pour les écoulements où la densité est variable, l'inéquation

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K, v_\sigma \geq 0} \rho_\sigma m(\sigma) v_\sigma \geq \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K, \sigma \in \mathcal{E}_{int}, v_\sigma < 0} \rho_\sigma |m(\sigma) v_\sigma|$$

n'est pas nécessairement satisfaite. On rappelle que cette inéquation doit être satisfaite pour que la matrice des coefficients soit toujours à diagonale dominante.

Dans ces conditions, les algorithmes du gradient conjugué et Orthomin2 ne sont pas appropriés pour résoudre tous les systèmes d'équations linéaires. On recommande alors d'utiliser les algorithmes Orthomin2 ou gradient conjugué pour la correction de pression et GMRES pour les équations de transport.

8.5 Respect du principe du maximum

Dans la section précédente, on a mentionné que l'inéquation

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K, v_\sigma \geq 0} \rho_\sigma m(\sigma) v_\sigma \geq \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K, \sigma \in \mathcal{E}_{int}, v_\sigma < 0} \rho_\sigma |m(\sigma) v_\sigma| \quad (8.3)$$

n'est pas toujours satisfaite puisque

$$\nabla \cdot (\rho^{n+1} \underline{v}^{n+1}) = -\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\delta t}.$$

Malheureusement, pour que le principe du maximum soit respecté, l'inéquation (8.3) doit être satisfaite. En effet l'inéquation $\nabla \cdot \underline{v} \geq 0$ est une condition essentielle pour démontrer le respect du principe du maximum lorsque l'écoulement est permanent et la densité constante. En régime transitoire, lorsque la densité est variable, l'inéquation (8.3) n'est pas nécessairement satisfaite et on ne peut pas garantir le respect du principe du maximum. Toutefois, pour un écoulement permanent convergé, cette inéquation est toujours satisfaite puisque la variation temporelle de la densité est nulle. Ainsi, à convergence, le principe du maximum sera respecté lorsqu'il s'applique.

Conclusion

Dans cette thèse de doctorat, on a présenté un nouveau schéma numérique de résolution d'écoulements incompressibles dont la discrétisation spatiale est de type volumes finis classiques. Les éléments géométriques qui discrétisent le domaine sont des tétraèdres en 3D ou des triangles en 2D. Les équations de bilan sont intégrées sur des volumes de contrôle composés d'un ou plusieurs éléments géométriques. Les fonctions d'interpolation pour toutes les variables du système d'équations sont constantes par volume de contrôle. Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont découplées et résolues avec une méthode à pas fractionnaires. Toutes les équations sont linéarisées et la discrétisation temporelle est semi-implicite. Puisque ce schéma supporte l'utilisation de volumes de contrôle arbitraires, il se distingue des autres schémas de la famille des volumes finis classiques qui nécessitent des maillages de type Voronoï ou structuré pour assurer une discrétisation consistante des flux diffusifs.

À partir des résultats théoriques de Eymard et al. ([36] et [39]), on peut affirmer que ce schéma est convergent et que le principe du maximum est localement respecté lorsqu'il s'applique. De plus, puisqu'il s'agit d'une méthode de volumes finis, les flux sont localement conservés. Les principales qualités de ce schéma sont sa robustesse, sa flexibilité et sa simplicité.

Le schéma a été utilisé pour résoudre des problèmes de type académique où les difficultés sont bien identifiées. Les résultats obtenus sont en accord avec les solutions analytiques ou des résultats numériques obtenus par d'autres chercheurs lorsque les solutions analytiques ne sont pas connues.

Afin que le schéma puisse être développé par d'autres chercheurs, une librairie informatique a été mise en oeuvre et est disponible par internet à l'adresse web suivante :

<http://dimoiv.uqac.ca/~sboivin/sperron> .

Avec cette librairie, il est facile de construire un programme pour résoudre des écoulements laminaires ou turbulents, en 2D et 3D, où les propriétés physiques telles la viscosité ou la densité peuvent être variables. De plus, la librairie supporte la résolution d'un nombre illimité d'équations de transport. L'écoulement peut donc transporter plus d'une quantité scalaire.

Finalement, des programmes de pré et post-traitement sont incorporés à la librairie. Ces programmes facilitent l'importation de maillages et l'exportation des résultats pour d'autres programmes de post-traitement.

Bien que le schéma numérique développé dans le cadre de cette thèse comporte de grands avantages, il comporte aussi certains désavantages. Premièrement, la méthode à pas fractionnaires peut ne pas être efficace (lente) pour résoudre des écoulements permanents où le découplage des équations n'est pas nécessaire. Deuxièmement, le gain en stabilité est fait au détriment de la précision, le schéma étant d'ordre 1. Ce schéma étant d'un ordre peu élevé, on peut présumer que la précision de la solution pourrait être plus fortement influencée par la qualité du maillage que pour un schéma d'un ordre supérieur. Finalement, ce schéma est mal adapté aux maillages où de nombreux éléments sont très étirés. En effet pour ces maillages, il existe de nombreuses interfaces à transmittivité négative : pour de tels maillages on ne peut pas garantir la convergence du schéma vers la vraie solution du problème.

On croit qu'il serait possible d'utiliser une variante de ce schéma pour la résolution d'écoulements compressibles à haute vitesse. Pour ce faire, il faudrait revoir les conditions d'application des résultats théoriques publiés par Eymard et al.[36] et revoir les étapes de l'algorithme de résolution. En effet, pour les écoulements compressibles, l'étape de projection n'est pas nécessaire.

Pour cette thèse, seuls des problèmes de type académique ont été résolus. Mais, compte tenu des solides fondements sur lesquels est basé notre schéma, des problèmes plus complexes pourront fort possiblement être résolus avec celui-ci.

Bibliographie

- [1] D.A. Anderson, R.H. Pletcher, et J.C. Tannehill. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Taylor and Francis, 1997.
- [2] L.V. Atkinson, O.J. Harley, et J.D. Hudson. *Numerical Methods with Fortran 77 : a Practical Introduction*. Addison and Wesley, 1990.
- [3] B.R. Baliga et S.V. Patankar. A new finite element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 3 :393–409, 1980.
- [4] B.R. Baliga et S.V. Patankar. A control volume finite-element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 6 :245–261, 1983.
- [5] B.R. Baliga et S.V. Patankar. Solution of some two-dimensional incompressible fluid flow and heat transfer problems using a control volume finite-element method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 6 :263–282, 1983.
- [6] F. Benkhaldoun, J.P. Chabard, et G. Pot. *Projet N3S de mécanique des fluides. Résolution par volumes finis de l'étape de transport pour des problèmes d'écoulements turbulents incompressibles*. Rapport technique HE-41/89.25, Électricité de France, Direction des Études et Recherche, 1988.
- [7] F. G. Blottner. Numerical solution of convection-diffusion equations. *Computers and Fluids*, 6 :15–24, 1978.
- [8] S. Boivin. *MEFOO : Un framework C++ pour la mise-en-oeuvre de la méthode des éléments finis*. Rapport technique HE-41/96/003/A, EDF, 1996.
- [9] S. Boivin, F. Cayré, et J.M. Hérard. A finite volume method to solve the Navier-Stokes equations for incompressible flows on unstructured meshes. *International Journal of Thermal Science*, 39 :806–825, 2000.

- [10] S. Boivin, F. Cayré, et J.M. Hérard. A finite volume scheme to compute incompressible gas-solid two-phase flows. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, AIAA-2000-2665, 2000.
- [11] S. Boivin et M. Fortin. A new artificial viscosity method for compressible viscous flow simulations by FEM. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 1, 1993.
- [12] S. Boivin et M. Fortin. A nonisotropic artificial viscosity method : application to the simulation of compressible viscous flows. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 7, 1996.
- [13] S. Boivin et J.M. Hérard. Un schéma de volumes finis pour résoudre les équations de Navier-Stokes sur une triangulation. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 5 :461–490, 1996.
- [14] Yves Bourgault. *Méthodes d'Éléments Finis en Mécanique des Fluides, Conservation et Autres Propriétés*. Thèse de doctorat, Université Laval, 1996.
- [15] D. S. Burnett. *Finite Element Analysis*. Addison and Wesley, 1988.
- [16] S. Candel. *Mécanique des fluides*. Dunod, 1995.
- [17] B. Cardot. *Modélisation de la Turbulence par les Méthodes de Type k-epsilon et Homogénéisation*. Thèse de doctorat, Université de Paris 6, 1990.
- [18] F. Cayré. *Schémas volumes finis pour un problème elliptique sur un maillage triangulaire, étude numérique de convergence*. Rapport technique HE-41/97/057/A, Électricité de France, Direction des Études et Recherche, 1997.
- [19] F. Cayré. *Méthodes de Volumes finis pour Maillages Non Structurés pour la Simulation Numérique des Écoulements Incompressibles Monophasiques et Diphasiques*. Mémoire de maîtrise, Université Laval, 1999.
- [20] J.P. Chabard. *Projet N3S de mécanique des fluides, manuel théorique -version 2.0*. Rapport technique HE-41/88.09, Électricité de France, Direction des Études et Recherche, 1988.
- [21] S. Champier et T. Gallouet. Convergence d'un schéma décentré sur un maillage triangulaire pour un problème hyperbolique linéaire. *R.A.I.R.O. Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 26 :835–853, 1992.

- [22] K.C. Chang, C.S. Chen, et C.I. Uang. A hybrid k-e turbulence model of recirculating flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 12 :369–382, 1991.
- [23] K.H. Chen et R.H. Pletcher. Primitive variable, strongly implicit calculation procedure for viscous flows at all speed. *AIAA*, 29 :1241–1249, 1993.
- [24] A.J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2 :12–26, 1967.
- [25] A.J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22 :745–762, 1968.
- [26] W.L. Chow et C.M. Rhie. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21 :1525–1532, 1983.
- [27] P.G. Ciarlet. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*. DUNOD, 1998.
- [28] Travail collectif. *Special Course on Unstructured Grid Methods for Advection Dominated Flow*. AGARD, Neuilly Sur Seine, 1992.
- [29] M. Crouzeix et P.A. Raviart. Conforming and non-conforming finite elements methods for solving the stationary Stokes equations. *RAIRO, Série Rouge Analyse Numérique*, 3 :33–76, 1973.
- [30] G. De Vahl Davis. An evaluation of upwind and central difference approximations by a study of recirculation flow. *Computers and Fluids*, 4 :24–43, 1976.
- [31] G. De Vahl Davis. Natural convection of air in a square cavity : a benchmark solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3 :249–264, 1983.
- [32] G. De Vahl Davis. Natural convection of air in a square cavity : a comparaison exercise. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3 :227–248, 1983.
- [33] J. Doormal et G. Raithby. Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 7 :147–163, 1984.
- [34] C. Cuvelier et al. *Éléments d'équations aux dérivées partielles pour ingénieurs*. Presses polytechniques romandes, 1988.
- [35] A. Brooks et T.J.R. Hughes. A multi-dimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. *Proceedings of a Symposium on Finite Element Methods for Convection Dominated Flows, ASME Winter Annual Meeting*, pages 19–35, 1979.

- [36] R. Eymard, T. Gallouet, et R. Herbin. Finite Volume Methods. *Handbook of Numerical Analysis*, 7, 2001.
- [37] F. Harlow et J. Welsh. Numerical calculation of time dependant viscous incompressible flow with free surface. *Physics of Fluids*, 8 :2182–2189, 1965.
- [38] A. Fortin. *Analyse numérique pour ingénieurs*. Éditions de l'École Polytechnique de Montréal, 1996.
- [39] T. Gallouet, R. Herbin, et M.H. Vignal. Error estimates on the approximate finite volume solution of convection diffusion equations with Dirichlet, Neumann or Robin boundary conditions. *SIAM*, à être publié.
- [40] U. Ghia, K. N. Ghia, et C. T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48 :387–411, 1982.
- [41] A. Greenbaum. *Iterative Methods for Solving Linear Systems*. SIAM, 1997.
- [42] P. Hood et C. Taylor. A numerical solution of the Navier-Stokes equations using finite element technique. *Computers and Fluids*, 1 :73–100, 1973.
- [43] K.H. Huebner et E.A. Thornton. *The Finite Element Method for Engineers*. Wiley and Sons, 1982.
- [44] S. Hussain, C. Kettleborough, et C. Prakash. Solution of fluid flow problems with the vorticity-stream function formulation and control-volume-based finite-element method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 16 :31–58, 1989.
- [45] F.P. Incropera et D.P. DeWitt. *Introduction to Heat Transfer*. Wiley and Sons, 1990.
- [46] J. Kim et P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59 :308–323, 1985.
- [47] P. Joyal et A. Mercier. *Analyse vectorielle*. 1998.
- [48] R. Kessler, M. Perie, et G. Scheuer. Comparaison of finite-volume numerical methods with staggered and colocated grids. *Computers and Fluids*, 16 :389–403, 1988.
- [49] L. Landau et E. Lifchitz. *Mécanique des fluides*. Wiley and Sons, 1994.
- [50] B.E. Launder et B.I. Sharma. Application of the energy dissipation model of turbulence for the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 2 :131–138, 1974.

- [51] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme, ii : Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics*, 32 :101–136, 1979.
- [52] B.P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 19 :59–98, 1979.
- [53] B.P. Leonard. A survey of finite differences of opinion on numerical muddling of the incompressible defective convection equation. *Finite Element Methods for convective Dominated Flows, AMD-vol.34*, 1979.
- [54] R.J. LeVeque et J. Olinger. *Numerical Methods based on additive splittings for hyperbolic partial differential equations*. Rapport technique NA-81-16, Computer Science Department, Stanford University, Stanford, California 94305, 1981.
- [55] J.M. Lopez et J. Shen. Numerical simulation of incompressible flows in cylindrical geometries using a spectral projection method. *International Journal of Applied Science Computing*, 5 :25–40, 1998.
- [56] B. Makiola. *Experimentelle Untersuchungen Zur Strömung über Die Schräge Stufe*. Thèse de doctorat, Institut für Hydromechanik, Universität Karlsruhe Kaiserstr, 1992. <http://fluindigo.mech.surrey.ac.uk>.
- [57] B. Mohammadi et O. Pironneau. *Analysis of the K-Epsilon Turbulence Model*. Wiley and Sons, 1994.
- [58] S. Patankar et D. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15 :1787–1806, 1972.
- [59] S. V. Patankar. *Numerical Heat transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, 1980.
- [60] C. Pozrikidis. *Introduction to Theoretical and Computational Fluid Dynamics*. Oxford university Press, 1997.
- [61] L. Quartapelle. *Numerical Solution of the Incompressible Navier-Stokes Equations*. Birkhauser, 1993.

- [62] G. D. Raithby. A critical evaluation of upstream differencing applied to problems involving fluid flow. *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 9 :75–103, 1976.
- [63] G. D. Raithby. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 9 :153–164, 1976.
- [64] Y. Saad et M. H. Schultz. A generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems, research report yaleu/dcs/rr-254. *SIAM*, 7 :856–869, 1986.
- [65] Y. Saad et H. A. Van Der Vorst. *Iterative solution of linear systems in the 20th century*. Rapport technique umsi-99-152, Minnesota Supercomputer Institute, University of Minneapolis, 1999.
- [66] M. Schafer et S. Turek. Benchmark computations of laminar flow around cylinder. In *Proceedings DFG Priority Research Program, Flow Simulation on High Performance Computers*. Vieweg, 1992.
- [67] J. Shen. On error estimates on projection methods for Navier-Stokes equations : first order schemes. *SIAM Journal Numerical*, 29 :55–77, 1992.
- [68] J. Shen. A remark on the projection-3 method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 16 :249–253, 1993.
- [69] J. Shen. On error estimates on projection methods for the Navier-Stokes equations : second order schemes. *Mathematics of computation*, 65 :1039–1065, 1996.
- [70] D. B. Spalding. A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives,. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 4 :551–559, 1962.
- [71] C.G. Speziale. On nonlinear K-l and K-e models of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 178 :459–475, 1987.
- [72] P. Wesseling. *Principles of Computational Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 2000.
- [73] F. M. White. *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill, 1991.
- [74] D.C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, 1993.
- [75] H.C. Yee. *Upwind and symmetric shock capturing methods*. Rapport technique TM-89464, NASA, 1987.