



**HAL**  
open science

# Modélisation numérique d'interfaces dans les métaux liquides - Application à la solidification

Gilles Fontaine

► **To cite this version:**

Gilles Fontaine. Modélisation numérique d'interfaces dans les métaux liquides - Application à la solidification. Electromagnétisme. INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE, 2002. Français. NNT: . tel-01340636

**HAL Id: tel-01340636**

**<https://hal.science/tel-01340636v1>**

Submitted on 1 Jul 2016

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

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

**INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE**

**N° attribué par la  
bibliothèque**

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

**THESE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'INPG**

**Spécialité : « Mécanique des Fluides et Transferts »**

préparée au laboratoire « Elaboration par Procédés Magnétiques (EPM) »

dans le cadre de l'Ecole doctorale « Mécanique et Energétique »

présentée et soutenue publiquement

par

**GILLES FONTAINE**

le 27 Juin 2002

**Titre :**

**MODELISATION NUMERIQUE D'INTERFACES  
DANS LES METAUX LIQUIDES  
APPLICATION A LA SOLIDIFICATION**

---

**Directeur de thèse : Yves DELANNOY**

---

**JURY**

M. METAIS Olivier,

Président

M. PROULX Pierre,

Rapporteur

M. HALDENWANG Pierre,

Rapporteur

M. DELANNOY Yves

Directeur de thèse

M. ELGANAOUI Mohamed

Examineur

M. WITOMSKI Patrick,

Examineur



## TABLE DES MATIERES

<b>1</b>	<b>INTRODUCTION</b>	<b>9</b>
<b>1.1</b>	<b>THEMATIQUE ET BESOINS EN MODELISATION NUMERIQUE</b>	<b>10</b>
<b>1.2</b>	<b>MODELES PHYSIQUES</b>	<b>11</b>
<b>1.3</b>	<b>METHODES NUMERIQUES</b>	<b>13</b>
<b>1.4</b>	<b>CAHIER DES CHARGES SUCCINCT DU CODE</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>PHENOMENES DE TRANSPORT ET LEUR DISCRETISATION</b>	<b>17</b>
<b>2.1</b>	<b>LA PHYSIQUE DE L'EQUATION DE TRANSPORT</b>	<b>18</b>
2.1.1	DIFFUSION	18
2.1.2	ADVECTION	18
2.1.3	TERME SOURCE	19
<b>2.2</b>	<b>DISCRETISATION DE L'EQUATION DE TRANSPORT</b>	<b>20</b>
2.2.1	L'APPROCHE VOLUMES FINIS.	20
2.2.2	FLUX DE DIFFUSION	22
2.2.3	ADVECTION	25
2.2.4	TERME SOURCE	28
2.2.5	TERME TEMPOREL	28
<b>2.3</b>	<b>METHODES DE CALCUL DES GRADIENTS</b>	<b>29</b>
2.3.1	CALCUL DU GRADIENT EN MAILLAGE NON STRUCTURE	29
2.3.2	UNE APPROCHE MOINDRES CARRES	30

2.3.3	UN GRADIENT AVEC LIMITEUR : LA METHODE DDL2-ENO2	31
2.3.4	UNE METHODE INTEGRALE	32
<b>2.4</b>	<b>CONDITIONS AUX LIMITES</b>	<b>33</b>
2.4.1	CONDITION AUX LIMITES A VALEUR IMPOSEE : DE TYPE DIRICHLET.	33
2.4.2	FLUX IMPOSE : CONDITION DE TYPE NEUMANN	34
2.4.3	CONDITION MIXTE	35
<b>2.5</b>	<b>TESTS</b>	<b>36</b>
2.5.1	TEST 1. ADVECTION D'UNE MARCHE	36
2.5.2	DISCUSSION SUR L'ORIENTATION DES MAILLES DANS LA DIFFUSION NUMERIQUE	38
2.5.3	TEST 2 : ADVECTION EN ECOULEMENT NON UNIFORME	39
2.5.4	SYNTHESE	41
<b>3</b>	<b><u>LES ÉQUATIONS DU MOUVEMENT EN INCOMPRESSIBLE</u></b>	<b>43</b>
<b>3.1</b>	<b>INTRODUCTION</b>	<b>44</b>
<b>3.2</b>	<b>ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES</b>	<b>45</b>
3.2.1	TERME DE DIFFUSION	45
3.2.2	TERME ADVECTIF	45
3.2.3	TERME DE PRESSION ET FORCES DE VOLUME	46
3.2.4	TERME INSTATIONNAIRE	47
<b>3.3</b>	<b>COUPLAGE VITESSE PRESSION EN MAILLAGE COLOCATIF</b>	<b>48</b>
3.3.1	CHOIX D'UN MAILLAGE COLOCATIF	48
3.3.2	DISCRETISATION MONODIMENSIONNELLE EN MAILLAGE COLOCATIF	48
3.3.3	OSCILLATION EN DAMIER	50
3.3.4	MODIFICATION DE L'INTERPOLATION DES VITESSES	51
3.3.5	ILLUSTRATION MONODIMENSIONNELLE	53
3.3.6	GENERALISATION	54
<b>3.4</b>	<b>METHODES DE CORRECTION DE PRESSION</b>	<b>56</b>
3.4.1	DESCRIPTION DE LA METHODE SIMPLE	57
3.4.2	DESCRIPTION DE LA METHODE SIMPLEC	59
3.4.3	DESCRIPTION DE LA METHODE PISO	61
<b>3.5</b>	<b>CONDITIONS AUX LIMITES</b>	<b>63</b>
3.5.1	CONDITIONS AUX LIMITES POUR LA PRESSION	63
3.5.2	CONDITIONS AUX LIMITES POUR LES EQUATIONS DE QUANTITE DE MOUVEMENT	64
<b>3.6</b>	<b>CAS TEST : CAVITE ENTRAINEE A DIFFERENTS REYNOLDS</b>	<b>66</b>
3.6.1	PRESENTATION DU CAS TEST	66

3.6.2	VALIDATION	67
3.6.3	REMARQUE	68
<b>3.7</b>	<b>SYNTHESE</b>	<b>69</b>
<b>4</b>	<b><u>THERMIQUE ET CONVECTION NATURELLE</u></b>	<b>71</b>
<b>4.1</b>	<b>ÉQUATION DE TRANSPORT DE LA CHALEUR</b>	<b>72</b>
<b>4.2</b>	<b>THERMOCONVECTION - APPROXIMATION DE BOUSSINESQ</b>	<b>73</b>
4.2.1	ÉQUATIONS	73
4.2.2	TRAITEMENT NUMERIQUE	74
<b>4.3</b>	<b>CAS TEST</b>	<b>75</b>
4.3.1	LA PHYSIQUE DE LA SIMULATION	75
4.3.2	CONDITIONS DE LA SIMULATION	76
4.3.3	RESULTATS	77
4.3.4	VALIDATION	78
4.3.5	QUELQUES TESTS EN CAVITE ELANCEE : STRUCTURE DE L'ECOULEMENT	80
4.3.6	INFLUENCE DE L'ORDRE DE DISCRETISATION	81
<b>4.4</b>	<b>SYNTHESE</b>	<b>82</b>
<b>5</b>	<b><u>CHANGEMENT DE PHASE DU CORPS PUR</u></b>	<b>83</b>
<b>5.1</b>	<b>PHYSIQUE DU CHANGEMENT DE PHASE DU CORPS PUR</b>	<b>84</b>
<b>5.2</b>	<b>FORMALISME NUMERIQUE</b>	<b>85</b>
5.2.1	L'EQUATION DE L'ENERGIE	85
5.2.2	MODIFICATION DE L'ECRITURE DE L'EQUATION DE L'ENERGIE	86
<b>5.3</b>	<b>APPLICATION : PROBLEME DE STEFAN.</b>	<b>89</b>
5.3.1	CONDITIONS DE CALCUL ET SOLUTION ANALYTIQUE	89
5.3.2	PARAMETRES DE RESOLUTION	90
5.3.3	RESULTATS	90
<b>5.4</b>	<b>SOLIDIFICATION ET CONVECTION</b>	<b>92</b>
5.4.1	DISCRETISATION	92
5.4.2	COUPLAGE ENTRE EQUATIONS DE QUANTITE DE MOUVEMENT ET METHODE ENTHALPIQUE	92
<b>5.5</b>	<b>LE BENCHMARK AMETH</b>	<b>94</b>
5.5.1	PRESENTATION DU PROBLEME	94
5.5.2	RESULTATS : ÉTAIN A $RA = 25000$ (CAS ÉTAIN#1)	95
5.5.3	RESULTATS : ÉTAIN A $RA = 250000$ (CAS ÉTAIN#2)	96

<b>5.6</b>	<b>SYNTHESE</b>	<b>99</b>
<b>6</b>	<b><u>RAFFINEMENT AUTOMATIQUE DE MAILLAGES</u></b>	<b><u>101</u></b>
<b>6.1</b>	<b>DETERMINATION DE LA DISTANCE A L'INTERFACE</b>	<b>102</b>
6.1.1	LA FONCTION NIVEAU - 'LEVEL-SET FUNCTION'	102
6.1.2	PROBLEMATIQUE	102
6.1.3	MISE EN PLACE DE LA LEVEL SET FUNCTION	102
6.1.4	RESULTATS	104
6.1.5	APPROCHE BANDE ÉTROITE	107
6.1.6	SYNTHESE	108
<b>6.2</b>	<b>RAFFINEMENT DES ELEMENTS</b>	<b>109</b>
6.2.1	DETERMINATION DES NŒUDS ADDITIONNELS	109
6.2.2	DETERMINATION DES ELEMENTS ADDITIONNELS	109
<b>6.3</b>	<b>PRISE EN COMPTE DES NOUVEAUX ELEMENTS : CONSEQUENCES</b>	<b>112</b>
6.3.1	STRUCTURE ARBORESCENTE	112
6.3.2	NUMEROTATION DES ELEMENTS	113
6.3.3	CREATION DE LA NOUVELLE CONNECTIVITE ET MISE A JOUR DU SYSTEME ALGEBRIQUE	114
6.3.4	EXEMPLE	115
<b>6.4</b>	<b>SYNTHESE</b>	<b>119</b>
<b>7</b>	<b><u>CONCLUSION</u></b>	<b><u>121</u></b>
<b>8</b>	<b><u>ANNEXE PRESSION : MODIFICATION DU TERME DE COUPLAGE</u></b>	<b><u>123</u></b>
	<b><u>BIBLIOGRAPHIE</u></b>	<b><u>127</u></b>

Merci à tous ceux qui m'ont accompagné durant cette thèse.





# 1 Introduction

## Problématique

Un nombre certain de procédés industriels sont gouvernés par des lois physiques en interaction, où les matériaux impliqués peuvent être solides et / ou liquides. Un des nombreux exemples est la fonderie, où le métal, initialement à température supérieure à sa température de fusion, est coulé dans un moule, puis refroidi en dessous de son point de fusion pour atteindre la solidification.

Un des défis de la recherche en génie des procédés est d'appréhender les phénomènes physiques qui se manifestent dans ce type d'application. Des efforts récents, en simulation numérique, ont été conjointement menés en ce sens par le laboratoire EPM-Madylam et ses partenaires, en particulier pour la modélisation d'interfaces de solidification présentes dans les procédés d'élaboration de matériaux. Le travail que nous présentons ici fait partie d'un projet Franco-Allemand pour l'amélioration des procédés de fonderie, dans le cadre d'une collaboration CNRS-DFG<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup> [Neises et al. 1998], [Fontaine et Delannoy 2001].

# **1.1 Thématique et besoins en modélisation**

## ***numérique***

Le laboratoire EPM MADYLAM est spécialisé dans l'étude et le développement de procédés d'élaboration de matériaux structurels ou fonctionnels, avec pour originalité la mise en œuvre de champs magnétiques pour chauffer, brasser, freiner, former ou structurer les matériaux en cours d'élaboration.

A titre d'exemple, on peut citer la purification de silicium sous plasma, permettant d'élaborer du silicium suffisamment pur pour fabriquer des cellules solaires à partir de matériau brut contenant de nombreuses espèces indésirables. La charge de silicium, alimentée en continu, est placée dans un creuset froid inductif, et subit un brassage électromagnétique. Les rouleaux de convection qui se mettent alors en place transportent les impuretés à une surface libre, où elles sont éliminées par le biais d'un jet de gaz porté à l'état plasma par un autre système inductif [Fig. 1]



*Fig. 1 : Jet de plasma à la surface d'un dôme de Silicium*

Dans ce procédé, les phénomènes physiques relevant de la mécanique des fluides sont très nombreux, et interagissent, pour aboutir à un problème fortement couplé : schématiquement, la thermique est gouvernée en partie par l'électromagnétisme, qui induit un brassage de la partie fluide du silicium et du gaz plasma. Ces écoulements transportent les impuretés et conditionnent en partie la forme de la surface libre. On peut aussi supposer que la convection naturelle interviendra de manière sensible dans le problème, en raison de la variation notable de la température au sein de la charge de silicium.

S'il est parfois envisageable de dimensionner une installation de ce type avec des considérations globales, la phase d'optimisation comme l'étude plus fine des mécanismes qui prennent place exigent des outils plus performants. La simulation numérique est un de ces outils, mais pour être adaptée à l'étude des procédés d'élaboration de matériaux, elle doit être pluridisciplinaire et savoir décrire les interfaces mobiles. En effet, ces procédés peuvent faire intervenir diverses sciences (mécanique des fluides,

électromagnétisme, thermique et rayonnement, transport d'espèces et chimie...), et sont souvent conditionnés par des surfaces libres, ou des fronts de solidification.

Ainsi, nous avons axé ce travail sur la modélisation des fronts de solidification au sein d'un procédé d'élaboration de corps pur. Le modèle est ici confronté à des solutions théoriques dans des situations académiques, et à un benchmark de la littérature [Bertrand et al. 1999], et il devra s'adapter par la suite à la modélisation de procédés réels avec transfert de masse aux interfaces (procédés de purification) ou avec des effets électromagnétiques (procédés avec brassage inductif).

## **1.2 Modèles physiques**

Les modèles numériques sont basés sur des équations correspondant à des projections mathématiques de la réalité physique, ou modèles physiques, ayant chacun leur particularité qui conditionne le traitement numérique. Les modèles physiques de mécanique des fluides ont ainsi plusieurs particularités que nous retrouvons dans nos problèmes de modélisation de procédés :

- Aspect multi-échelle : les problèmes de couche limite, classiques en mécanique des fluides, conduisent à adopter des maillages raffinés dans une seule direction (la normale à la paroi). Pour nos procédés, ce raffinement est également nécessaire pour décrire des transferts de masse à travers une fine couche de diffusion, ou des systèmes inductifs à fine peau électromagnétique.
- Non linéarité : c'est le cas des équations de conservation de la quantité de mouvement, mais aussi de l'équation de l'énergie dans le cas d'un corps se solidifiant, ainsi que des problèmes dont une frontière est une interface de forme inconnue a priori (front de solidification dans nos applications). La forte non linéarité des équations peut induire une grande sensibilité aux conditions initiales ou aux limites, comme en témoigne l'effet papillon [Lorentz 1963].
- Propriétés variables : en mécanique des fluides, le fluide parfaitement Newtonien est rarement rencontré, mais cette modélisation est souvent acceptable (en aérodynamique par exemple). Dans d'autres cas (industrie des polymères notamment), cette approximation n'est pas suffisante, et les modèles doivent prendre en compte des comportements plus complexes. C'est le cas également pour nos procédés d'élaboration, où nous devons en particulier prendre en compte l'effet de la solidification sur l'écoulement.

Nos modèles physiques ont donc pour noyau dur les équations de Navier-Stokes, classiques pour des écoulements laminaires et incompressibles de fluide Newtonien. Nous y avons ajouté une méthode de capture d'interface, qui permet d'obtenir la position du front de solidification dans un maillage fixe. La

description de la solidification est confiée à une méthode enthalpique, qui permet de déterminer la position de l'interface a posteriori (Crank [1984]).

Plusieurs auteurs ont utilisé cette approche pour prendre en compte les phénomènes de convection dans la zone pâteuse relative au changement de phase des alliages (Voller [1980] Bennon [1987] Voller [1987], Rappaz [1989], Morvan [1999]). En conservant comme variable principale l'enthalpie, nous avons au contraire décrit le changement de phase d'un corps pur (pour lequel il n'existe en général pas de dendrites, donc pas de zone pâteuse), l'instar de El Ganaoui [1996], El Ganaoui [2000] El Ganaoui et al. [1999] Le chapitre 5 présente en détail ce modèle de solidification, qui s'appuie sur le modèle thermique présenté au chapitre 4.

. Ce dernier modèle permet en particulier de traiter des problèmes de convection naturelle qui peuvent fortement influencer la solidification.

## **1.3 Méthodes numériques**

La thématique ci-dessus conduit à des méthodes numériques locales de description d'un milieu continu : il s'agit en effet d'obtenir les valeurs de différentes variables (enthalpie, vitesse, pression ...) en des points discrets du domaine de simulation. Ces valeurs sont gouvernées par des équations algébriques issues de la discrétisation des équations aux dérivées partielles qui modélisent le problème physique.

Les différents ingrédients d'une méthode numérique sont respectivement la construction d'équations algébriques et un algorithme pour leur solution. La qualité d'une solution ne dépend que du premier élément. L'efficacité du code, cependant, est tributaire des deux éléments, dans la mesure où la nature des équations discrétisées indique la manière par laquelle elles doivent être résolues. Le présent travail met l'accent sur le traitement numérique (discrétisation et algorithmique) et utilise des méthodes de résolution de systèmes connues et éprouvées.

Ainsi, notre travail est basé sur une méthode numérique adaptée aux modèles physiques de la mécanique des fluides. Nous y avons ajouté un algorithme de raffinement non isotrope de maillage qui permet de décrire finement le voisinage des interfaces mobiles (dans certains procédés, ces interfaces créent de fines peaux électromagnétiques ou de fines couches de diffusion).

Les méthodes numériques en mécanique des fluides se divisent en deux familles presque disjointes, celles des méthodes optimisées pour les écoulements compressibles et celle des méthodes optimisées pour les écoulements incompressibles. Dans nos applications, la compressibilité peut clairement être négligée, et nous citerons ici des méthodes classiques en écoulement incompressible.

Ces méthodes diffèrent principalement par la manière dont elles traitent de la pression :

- certaines méthodes, dites «Psi- Omega », éliminent cette variable en utilisant la fonction de courant en bidimensionnel (Dix [1963], Fromm et Harlow [1963], Pearson [1965], Barakat et Clark [1966]), ou de manière beaucoup plus complexes en tridimensionnel [Aziz et Hellums, 1967].
- les méthodes de compressibilité artificielle permettent d'exprimer la pression à l'aide de la masse volumique, qui devient alors légèrement variable. De manière similaire, les méthodes de pénalité ne respectent pas tout à fait la conservation de la masse pour un fluide incompressible, mais se servent de la divergence de vitesse pour éliminer la pression (Batchelor [1967]).
- la méthode de projection de la pression, (Niceno, Hanjalic & Nobile [1998]) ou de correction de pression (Patankar [1980]) sont basées sur une approche séquentielle de type prédicteur-correcteur. Il en existe de nombreuses version dont on trouvera une revue dans Ferziger et Peric [1999].

Parmi ces méthodes, nous avons choisi la méthode de correction de pression, et plus précisément trois de ses variantes détaillées au chapitre 3, après une analyse plus détaillée des différentes méthodes.

La discrétisation des différentes équations aux dérivées partielles à résoudre dans la méthode de correction de pression est confiée dans notre travail à la méthode des volumes finis, la plus employée en mécanique des fluides. D'autres auteurs utilisent les éléments finis ou les différences finies, ces dernières s'adaptant mal à des maillages tels que ceux que donne notre méthode de raffinement.

Nous avons choisi a priori d'utiliser un maillage non structuré pour ne pas contraindre la méthode de raffinement près des interfaces. A posteriori, la méthode de raffinement utilise effectivement l'aspect non structuré du maillage pour générer près des interfaces des maillages de type « couche limite », c'est-à-dire constitués de mailles quadrilatérales (pour nos calculs bidimensionnels) très fines selon la normale à l'interface et non raffinées dans le sens tangent (même taille que le maillage initial). L'adaptation en maillage non structuré de la discrétisation volumes finis est détaillée au chapitre 2, et suit les principes présentés dans Ferziger et Peric [1999], plus quelques points particuliers comme le schéma de second ordre essentiellement non oscillant présenté par Gooch [1997].

## **1.4 Cahier des charges succinct du code**

Si la mécanique des fluides peut être traitée en volumes finis non structurés par plusieurs logiciels commerciaux, ces codes n'ont pas toujours la flexibilité nécessaire pour prendre en compte tous les modèles physiques que nous voulons développer (en particulier le modèle enthalpique de solidification), et surtout ils ne peuvent pas être modifiés suffisamment en profondeur pour introduire le raffinement de maillage non isotrope : la partie immergée des codes commerciaux (spécificités techniques non documentées) peut s'avérer pénalisante dans de tels développements. Nous avons donc choisi de développer notre propre code, dont le cahier des charges (ci-dessous) résume les besoins de notre étude.

- Le code devra fonctionner en maillage non structuré pour permettre de développer la méthode de raffinement automatique envisagée.
- En ce qui concerne la méthode de discrétisation, nous avons opté pour les volumes finis. Nous l'avons choisie dans la mesure où, à nos yeux, elle semblait physiquement la plus parlante. La notion de débit, par exemple, est similaire tant au niveau discret qu'au niveau macroscopique.
- Dans un premier temps, le code sera bidimensionnel (axisymétrique ou pas), mais les choix effectués lors de la programmation doivent permettre une extension en trois dimensions à moindre coût.
- Nous supposerons les écoulements laminaires. Cette hypothèse est souvent vérifiée, notamment à proximité des fronts de solidification. Cependant l'extension vers un modèle de turbulence demeure envisageable, bien que nous supposerons ne pas en avoir besoin ici.

- Les matériaux que nous souhaiterons prendre en compte seront des corps purs, ou des alliages dont le comportement sera assimilable à celui du corps pur, soit un changement de phase à température constante et avec saut d'enthalpie.
- Les procédés de purification des métaux liquides nous conduisent à prendre en compte plusieurs espèces (ici les polluants), soit plusieurs équations de transport, et en nombre variable.
- Ensuite, considérant que les grandeurs rencontrées dans le type des procédés que nous souhaitons traiter peuvent être très variables (la température en particulier), il est pertinent de souhaiter tenir compte de la dépendance des propriétés physiques en fonction d'autres grandeurs : nous insisterons sur les possibilités de couplage entre phénomènes, ainsi que leur mise en place.
- Outre le changement de phase des matériaux, nous souhaitons prendre en compte d'autres procédés et phénomènes comme le brassage électromagnétique (dans l'hypothèse du couplage faible - les forces électromagnétiques étant indépendantes de l'écoulement) et la convection naturelle dans l'hypothèse de Boussinesq.
- Enfin, et cela ne sera pas développé ici, nous souhaitons offrir à un utilisateur potentiel l'opportunité d'étendre le champ des possibles du code vers d'autres besoins du laboratoire, comme la magnétohydrodynamique en champ continu, l'électromagnétisme ou bien encore le rayonnement : ce code devra donc être un code ouvert.

Il ne faut pas non plus perdre de vue que le code que nous devons développer est un 'code laboratoire', c'est-à-dire un outil d'usage certes confidentiel, mais qui doit être ouvert. Il doit en effet permettre à tout utilisateur d'introduire de nouveaux modèles, de nouvelles espèces, voire de nouveaux couplages, et doit également permettre un travail d'équipe.

L'approche objet ayant déjà fait ses preuves en termes de travail collaboratif et d'évolutivité des codes, nous avons opté pour la programmation objet, et en particulier pour le C++. Ce langage a vu naître assez récemment une normalisation, gage d'une certaine pérennité et d'une portabilité accrue sur divers environnements. De plus, le déficit d'efficacité - notoire il y a quelques années - par rapport à des langages plus largement utilisés dans la communauté scientifique comme le Fortran, tend à se réduire, et nous sommes persuadés du gain de souplesse que peut apporter une approche objet dans un outil qui peut être partagé par un plus grand nombre de personnes.

Dans notre contexte, il est crucial de pouvoir aisément transmettre les informations à un autre interlocuteur : les utilisateurs de ce code peuvent être éloignés dans le temps, ou de spécialité éloignée de celle du développeur (caractère pluridisciplinaire du laboratoire). La lisibilité et l'évolutivité du code sont donc des caractéristiques à privilégier. Une construction modulaire du code permet à chacun d'identifier commodément les objets sur lesquels il souhaite intervenir, de sorte d'identifier aisément la partie qui lui



est spécifique. La protection des données (fonctionnement de chaque composant en boîte noire pour les autres composants du code), dans le langage objet qu'est le C++, assure à chacun que la partie qu'il a modifiée n'interférera pas avec les autres [Coplien 1992] [Murray 1994], [Stroustrup 1999].

L'ensemble du code sera présenté à l'aide d'un cas d'application : il s'agit du Benchmark Ameth, traitant de la fusion de corps purs dans une enceinte où la convection naturelle est le moteur de l'écoulement [Bertrand et al. 1999].

## 2 Phénomènes de Transport et leur Discrétisation

Le premier objectif de ce chapitre est de présenter la méthode des volumes finis. Cette présentation est basée sur le traitement de l'équation de transport de scalaire passif, équation-type de la mécanique des fluides, qui sert de base pour la plupart des autres équations rencontrées ensuite.

Enfin, nous insisterons sur quelques spécificités du traitement des différents termes de l'équation de transport dans le contexte des volumes finis non structurés. Nos méthodes sont basées sur celles de Ferziger et Peric, [1999], avec quelques particularités mentionnées dans ce chapitre et le suivant.

## 2.1 La physique de l'équation de transport

Intéressons-nous à la physique d'une équation de transport. L'objectif de cette partie est d'obtenir la solution pour la *concentration* d'une espèce A (ou toute autre quantité intensive) en présence d'un champ de vitesses donné. La méthode de calcul du champ de vitesses est l'objet d'un chapitre ultérieur.

Si on considère le transport d'une espèce dans un milieu continu, on peut distinguer trois phénomènes qui vont influencer sur les variations de sa concentration : diffusion, advection et source volumique. Nous allons détailler ces trois phénomènes pour assembler l'équation de transport

### 2.1.1 Diffusion

La diffusion moléculaire traduit la tendance à l'étalement spontané de la répartition spatiale de concentration pour cette espèce. Le flux d'atomes d'une espèce dans un mélange au repos (c'est-à-dire pour lequel la vitesse macroscopique<sup>2</sup> est partout nulle) est proportionnel au gradient  $\nabla C_A$  de sa concentration et a pour densité :

$$J_{A,d} = -C.D.\nabla C_A$$

[Eq 1]

L'équation précédente est une forme de la première loi de Fick.

Où

*J<sub>A,d</sub>* est la contribution diffusive du flux d'atomes à travers une surface donnée  
(mol.m<sup>-2</sup>.s<sup>-1</sup>),

*D* est le coefficient de diffusion de A dans le mélange considéré (m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>)

*C<sub>A</sub>* est la concentration de l'espèce A et *C* est la concentration du mélange (mol.m<sup>-3</sup>).

On a de même des lois de diffusion de la chaleur (loi de Fourier) ou de la quantité de mouvement (loi rhéologique d'un fluide).

### 2.1.2 Advection

L'advection traduit les variations de concentration d'une espèce dans un milieu, dues exclusivement au champ de vitesses macroscopiques dans le milieu. Le flux d'atomes de l'espèce A a pour densité :

---

<sup>2</sup> La vitesse macroscopique d'un mélange est, en toute rigueur, la vitesse du centre de masse d'un volume élémentaire de ce mélange. Elle se réduit à la vitesse de l'espèce majoritaire pour les mélanges faiblement concentrés.

$$\mathbf{J}_{A,c} = \mathbf{u} \cdot C_A$$

[Eq 2]

Où

$\mathbf{J}_{A,c}$  est la contribution convective du flux d'atomes à travers une surface donnée ( $\text{mol} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ),

$\mathbf{u}$  est la vitesse macroscopique locale ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ),

$C_A$  est la concentration de l'espèce A. ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ).

Le phénomène d'advection intervient aussi dans le transport de chaleur, de quantité de mouvement et de manière générale de toute quantité intensive associée à de la matière en mouvement.

### 2.1.3 Terme source

On appelle source tout phénomène faisant varier la grandeur transportée indépendamment de son gradient et du champ de vitesse. Le terme source de concentration est la variation temporelle de concentration qu'on aurait à vitesse nulle et sans gradient de concentration, due par exemple aux réactions chimiques produisant l'espèce A :

$$S_A = (\partial C_A / \partial t) \text{ à } \mathbf{u} = 0 \text{ et } \nabla C_A = 0$$

[Eq 3]

De tels termes source existent dans la plupart des équations de conservation. Ils sont dus par exemple au rayonnement, au chauffage par induction ou à la dissipation visqueuse pour la thermique, ou encore à des forces électromagnétiques ou gravitationnelles pour la quantité de mouvement.

## 2.2 Discrétisation de l'équation de transport

### 2.2.1 L'approche volumes finis.

Considérons un sous-volume fixe  $V$  du domaine de calcul, limité par la surface  $S$ , dont les éléments de surface  $d\mathbf{S}$  sont orientés vers l'extérieur de  $V$  (*normale extérieure  $\mathbf{n}$* ). La conservation de l'espèce  $A$  se traduit par l'équation de transport sous forme intégrale, qui exprime que la variation de la quantité de  $A$  dans  $V$  est due aux flux nets de convection et de diffusion entrant dans  $V$ , et au terme source :

$$\frac{d}{dt} \iiint_V C.dV = \iint_S -C.\mathbf{u}.d\mathbf{S} - \iint_S -\Gamma.\nabla C.d\mathbf{S} + \iiint_V S_C.dV$$

[Eq 4]

où  $C$  est le scalaire considéré ('concentration de l'espèce  $A$ ' pour l'équation modèle de transport de masse), et  $\Gamma$  sa diffusivité ( $=C_A.D$  pour cette équation modèle). À l'aide du théorème de Green Ostrogradsky<sup>3</sup>, et de l'équation de continuité, on peut aussi écrire l'équation de transport locale sous forme conservative :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}.C) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla C) + S_C$$

[Eq 5]

ou sous forme non conservative, en faisant intervenir l'équation de continuité<sup>4</sup> :

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla C = \nabla \cdot (\Gamma \nabla C) + S_C$$

[Eq 6]

La discrétisation revient à considérer que les variables de calcul dans un volume de contrôle  $V$  varient de manière polynomiale. Cette approche est nécessaire pour que la quantité de données à traiter soit finie, et par conséquent, que soit fini le temps de traitement du problème. Si le polynôme choisi est d'ordre  $n$ , on dira que le calcul est  $n$ -exact (c'est-à-dire que le calcul reproduit exactement des variations polynomiales d'ordre  $n$ ). Ainsi un schéma d'ordre 1 est 0-exact, un schéma d'ordre 2, 1-exact, et un schéma d'ordre  $n$  est  $n-1$  exact.

Cette hypothèse posée, intéressons-nous à la forme intégrale, puis discrète de chacun de ces termes : diffusion, convection et terme source. Le processus de discrétisation, ici l'approche volumes finis, nous conduira à considérer les valeurs des inconnues en différents lieux du maillage, et à employer des notations dont nous faisons ici le détail : on se donne une face courante  $e$ , de part et d'autre de laquelle se situent les volumes  $P$  et  $E$  ([Fig.2]).

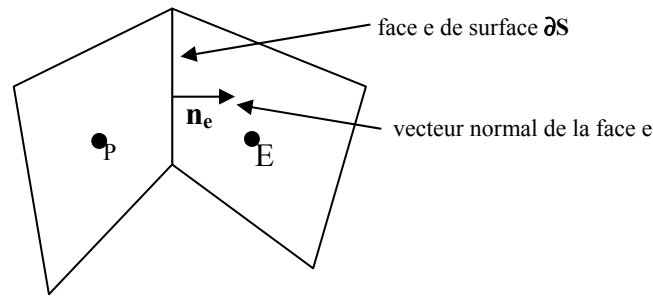
Par ailleurs, pour une inconnue courante  $C$ , nous noterons

- $C_P$  et  $C_E$  les valeurs discrètes de  $C$  aux barycentres des éléments  $P$  et  $E$ ,
- $\nabla C_P$  le gradient de  $C$  au barycentre de  $P$ ,
- $\nabla C_E$  le gradient de  $C$  au barycentre de  $E$ ,
- $C_e$  la valeur interpolée de  $C$  sur la face  $e$ ,
- $\nabla C_e$  le gradient de  $C$  sur la face  $e$
- $\delta\Omega_P$  le volume de l'élément  $P$ ,
- $\partial S_e$  la surface de la face  $e$ ,  $\mathbf{n}_e$  vecteur unitaire normal à la face  $e$  (orienté de  $P$  vers  $E$ )

---

<sup>3</sup>  $\iiint_V \text{div}(\mathbf{X}).dV = \iint_S \mathbf{X}.d\mathbf{S}$

<sup>4</sup>  $\text{div}(\mathbf{u}) = 0$  en incompressible. La forme intégrale, que nous utiliserons pour la discrétisation, est indépendante de l'aspect incompressible ou non de l'écoulement.



*Fig. 2 : Notations employées*

L'objectif de la discrétisation est de construire un système algébrique qu'il faudra ensuite résoudre. La construction de ce système, en particulier de la matrice, doit se faire selon plusieurs règles, afin d'éviter des situations qui conduisent à des impasses lors de la résolution.

Si, d'un point de vue mathématique, deux formulations discrètes sont valables, nous privilégierons celles plus favorables à une inversion aisée du système par les méthodes itératives de résolution de systèmes algébriques.

En notant :

*A la matrice assemblée (et  $A_{ij}$  ses éléments),*

*X le vecteur des inconnues (et  $X_j$  ses éléments),*

*B le vecteur second membre du système matriciel (et  $B_i$  ses éléments),*

chaque ligne du système matriciel  $A.X=B$  correspond à la discrétisation de l'équation de transport sur un volume de contrôle  $V_i$ . L'élément  $A_{ij}$  correspond donc à l'influence de l'inconnue  $X_j$  sur le bilan dans le volume  $V_i$ , et sera noté  $A_{PE}$  ou  $A_{EP}$  lorsque l'on travaille sur la face<sup>5</sup> séparant  $V_i$  de  $V_j$ .

<sup>5</sup> Avec les schémas détaillés aux parties suivantes (schémas compacts)  $A_{ij}$  est nul si  $V_i$  et  $V_j$  ne se touchent pas. Dans ces conditions, tous les coefficients non nuls de la matrice peuvent être désignés par  $A_{PP}$ ,  $A_{PE}$  ou  $A_{EP}$

## 2.2.2 Flux de diffusion

Lorsqu'on écrit la forme intégrale de l'équation de transport sur un volume de contrôle limité par des faces supposées planes en 3D ou rectilignes en 2D, l'intégrale de surface exprimant le flux de diffusion sortant du volume de contrôle considéré se réduit à une somme sur toutes ses faces :

$$\iint_S -\Gamma \nabla C \cdot \mathbf{dS} \approx \sum_e -(\Gamma \vec{\nabla} C)_e \cdot \mathbf{n}_e \partial S_e$$

L'expression ci-dessus est exacte si  $(\Gamma \nabla C)_e$  est la moyenne de  $\Gamma \nabla C$  sur la face. L'approximation discrète (solution connue grâce à un nombre fini de valeurs) consiste à relier cette moyenne aux inconnues du problème (ici les valeurs de  $C$  dans les volumes de contrôle).

Pour une face 'e' du volume de contrôle courant, on propose l'approximation suivante pour le flux de diffusion  $F_e^d$  sortant du volume P : (notations de la [Fig. 2])

$$F_e^d = -(\Gamma \nabla C)_e \cdot \mathbf{n}_e \partial S_e \approx \Gamma_e \frac{C_P - C_E}{L_{P,E}} \partial S_e$$

où

$\Gamma_e$  est la valeur (interpolée) du coefficient de diffusion sur la face,  
 $L_{P,E}$  la distance entre les barycentres des volumes de contrôle P et E.

Cette écriture suppose que le bipoint liant les deux barycentres des éléments P et E coupe la face en son centre et de manière orthogonale. Dans ce cas, elle est 1-exacte<sup>6</sup>, c'est-à-dire exacte lorsque la solution se confond localement (sur les éléments P et E) avec un polynôme d'ordre 1 (variation linéaire en fonction des coordonnées).

Sur un maillage non orthogonal, elle peut être plus ou moins fautive :

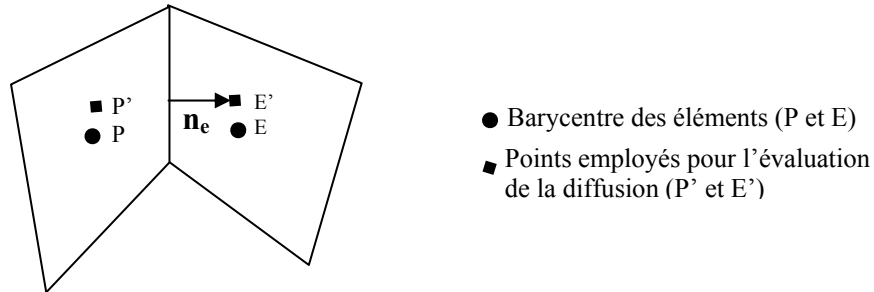


Fig. 3 : Ecart entre les points d'estimation de la dérivée et les barycentres des cellules

La qualité de l'approximation dépend fortement de l'orthogonalité locale du maillage : en effet, on calcule :

$$F_e^d = -(\Gamma \vec{\nabla} C)_e \cdot \vec{n}_e \partial S_e \approx \Gamma_e \frac{C_P - C_E}{L_{P,E}} \partial S_e$$

alors qu'il faudrait employer les points E' et P' :

$$F_e^d = -(\Gamma \vec{\nabla} C)_e \cdot \vec{n}_e \partial S_e \approx \Gamma_e \frac{C_{P'} - C_{E'}}{L_{P',E'}} \partial S_e$$

Or P' et E' ne sont pas des points de la discrétisation.

<sup>6</sup> L'approximation serait même 2-exacte si les points P et E étaient équidistants du centre de la face

E' et P' sont des projections des points E et P sur la droite de vecteur unitaire  $\mathbf{n}_e$  et qui passe par le centre de la face e.

L'interpolation suivante est donc nécessaire :

$$C_{P'} = C_P + (\vec{\nabla}C)_P \cdot (\overrightarrow{PP'})$$

$$\text{et } C_{E'} = C_E + (\vec{\nabla}C)_E \cdot (\overrightarrow{EE'})$$

Cette approximation suppose que la solution varie linéairement sur chaque volume de contrôle et est donc 1-exacte, c'est-à-dire exacte quand la solution se confond localement avec une fonction linéaire des coordonnées. Les points P' et E' sont obtenus en projetant les points P et E sur la normale  $\mathbf{n}$ .

Pour corriger les termes de non-orthogonalité, Muzaferija [1995] propose une correction explicite qui s'écrit comme suit :

$$F_e^d = - \left[ \Gamma_e \left( \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \xi} \right)_e \mathcal{S}_e \right]^{implicite} - \Gamma_e \mathcal{S}_e \left[ \left( \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial n} \right)_e - \left( \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \xi} \right)_e \right]^{explicite}$$

[Eq 7]

avec les deux vecteurs unitaires

$$\vec{\xi} = \frac{\overrightarrow{PE}}{\|\overrightarrow{PE}\|} \text{ et } \vec{n} \text{ vecteur normal extérieur à la face } e.$$

Le terme de droite apparaît dans [Eq 7] comme un terme correctif, écrit au second membre du système algébrique.

Ce terme est évalué de manière explicite, c'est-à-dire à partir de la solution supposée connue, alors que la partie implicite est évaluée comme produit d'un terme ne dépendant que de paramètres géométriques, et de la solution prise comme inconnue du système matriciel.

Pour obtenir la convergence numérique au sein d'un même pas de temps, il nous faudra donc itérer la résolution.

Cela n'est pas dommageable à la vitesse de convergence : dans un problème typique de mécanique des fluides dans lequel nous devons résoudre une équation de transport, nous devons, quoi qu'il adienne, procéder de manière itérative pour la résolution des équations de quantité de mouvement en raison de leur nature non linéaire.

$$\text{À convergence, la seule contribution efficace est } - \Gamma_e \mathcal{S}_e \left( \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial n} \right)_e.$$

Cette procédure permet à la fois de tenir compte des termes de non-orthogonalité, via la partie explicite, et d'assurer une nature diffusive à la matrice grâce à la partie implicite : dans la matrice, chaque inconnue est une moyenne pondérée par les inconnues voisines, les coefficients de pondération (positifs) ne dépendant que de la géométrie et du coefficient relatif à la diffusion.

Cette approche est stabilisante, et a, de plus, le mérite d'être simple à mettre en œuvre.

Exprimons maintenant les valeurs des deux dérivées en fonction des données dont nous disposons, c'est-à-dire des inconnues à l'itération courante et des gradients calculés à partir de la solution de l'itération précédente :

$$\left( \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \xi} \right)_e \approx \frac{C_E - C_P}{L_{P,E}}$$



$$\text{et } \left( \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \mathbf{n}} \right)_e \approx (\overline{\nabla C})_e \cdot \mathbf{n},$$

où  $(\overline{\nabla C})_e$  est le gradient sur la face, calculé par interpolation linéaire à partir des gradients des cellules voisines. On obtient donc:

$$F_e^d = \Gamma_e (C_P - C_E) \frac{\partial \mathcal{S}_e}{L_{P,E}} + \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{L_{P,E}} \left[ -L_{P,E} (\overline{\nabla C})_e \cdot \mathbf{n} - (C_P - C_E) \right]^n$$

Au niveau matriciel (du système  $Ax = B$ ), la contribution d'une face intervient sur les équations relatives aux deux volumes voisins comme suit :

$$\begin{aligned} A_{PP+} &= \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{\|\overrightarrow{PE}\|} ; A_{PE-} = \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{\|\overrightarrow{PE}\|} , \\ \text{et } B_{P-} &= -\Gamma_e \partial \mathcal{S}_e \left[ \overline{\nabla C}_e \right]^n \cdot \mathbf{n} - \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{\|\overrightarrow{PE}\|} [C_P - C_E]^n \\ A_{EE+} &= \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{\|\overrightarrow{PE}\|} ; A_{EP-} = \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{\|\overrightarrow{PE}\|} , \\ \text{et } B_{E+} &= -\Gamma_e \partial \mathcal{S}_e \left[ \overline{\nabla C}_e \right]^n \cdot \mathbf{n} - \Gamma_e \frac{\partial \mathcal{S}_e}{\|\overrightarrow{PE}\|} [C_P - C_E]^n \end{aligned}$$

la notation  $[\ ]^n$  dénotant le fait qu'il faut employer les valeurs de l'itération précédente, (pour  $[C]^n$ ) et les gradients calculés à partir des valeurs de l'itération précédente ( $[\nabla C]^n$ ).

On peut interpréter cette écriture comme une formulation qui tient compte en implicite, de la contribution orthogonale des termes de diffusion (dans la matrice), et, en explicite (second membre) de l'écart à l'orthogonalité.

### 2.2.3 Advection

Le terme de convection de l'équation de bilan sous forme intégrale peut s'écrire, dans le cas de volumes de contrôle limités par des faces planes, comme somme des flux à travers ces faces. La méthode par laquelle nous allons discrétiser cette forme constitue le schéma de convection.

Nous employons trois types de schémas de convection, le schéma amont premier ordre (UDS1), un schéma amont second ordre (UDS2), et un schéma amont deuxième ordre avec limiteur (ENO2).

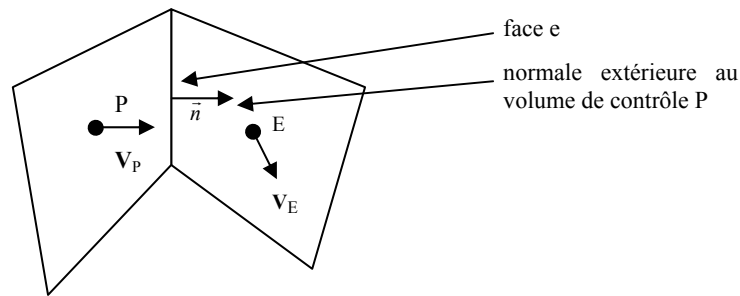
#### Schéma amont premier ordre (UDS1)

Le schéma amont premier ordre (UDS1 pour *Upwind Differencing Scheme 1<sup>st</sup> Order*) a été développé par [Courant, Isaacson & Rees (1952)]. Le principe du schéma UDS1 est de considérer que la valeur de l'inconnue sur la face est égale à la valeur de l'inconnue au centre de la cellule située à l'amont dans le sens de la vitesse. Il s'agit donc d'un schéma 0-exact.

La discrétisation du terme de convection prend alors la forme suivante :

$$\int_S C \cdot \mathbf{u} \cdot \partial \mathbf{S} \approx \sum_e C_{\text{amont}} \mathbf{u}_e \cdot \partial \mathbf{S}_e$$

avec les notations du schéma qui suit :



*Fig. 4 : Ecart entre les points d'estimation de la dérivée et les barycentres des cellules*

Avec  $\mathbf{v}_e$  la vitesse interpolée sur la face à partir des valeurs  $\mathbf{v}_P$  et  $\mathbf{v}_E$ , notons  $\dot{m}_e = \rho \cdot \bar{\mathbf{u}}_e \cdot \bar{\mathbf{n}} \partial \mathcal{S}_e$

si  $\dot{m}_e > 0$   $C_{\text{amont}} = C_P$

si  $\dot{m}_e < 0$   $C_{\text{amont}} = C_E$

si  $\dot{m}_e = 0$ , il n'y a pas d'assemblage puisque le débit à travers la face est nul.

Au plan matriciel, l'assemblage se fait face par face selon :

$$\begin{aligned} & \text{si } \dot{m}_e > 0 \\ & A_{PP} + = \dot{m}_e ; A_{PE} - = 0 \\ & A_{EE} + = 0 ; A_{EP} - = \dot{m}_e \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{si } \dot{m}_e < 0 \\ & A_{PP} + = 0 ; A_{PE} - = \dot{m}_e \\ & A_{EE} + = \dot{m}_e ; A_{EP} - = 0 \end{aligned}$$

Le second membre étant inchangé.

## Schéma amont deuxième ordre (UDS2)

Le schéma amont deuxième ordre (UDS2 – Upwind Differencing Scheme 2<sup>nd</sup> Order) se présente comme une extension de la méthode précédente, dans la mesure où il tient compte, dans sa partie explicite, de la variation linéaire de la grandeur  $C$  à l'intérieur des volumes de contrôle, ce qui permet de l'obtenir sur la face  $e$  la valeur extrapolée depuis le volume amont.

Afin de pouvoir conserver des procédures communes au schéma amont premier ordre, la valeur  $C_{\text{amont}}$  est approchée comme suit (notations de la Fig 2, et notation  $()^n$  désignant les dernières valeurs connues) :

$$\begin{aligned} \text{si } \dot{m}_e > 0 \quad C_{\text{amont}} &= C_P + \nabla C_P^n \cdot \vec{P}e \\ \text{si } \dot{m}_e < 0 \quad C_{\text{amont}} &= C_E + \nabla C_E^n \cdot \vec{E}e \end{aligned}$$

De cette manière, le gain d'un ordre (le schéma UDS2 est 1-exact) se fait via une correction explicite. Cette approche a pour avantage la simplicité, dans la mesure où une évaluation implicite du gradient est délicate en maillage non structuré, en raison du nombre potentiellement très variable des voisins d'un élément impliqués.

La partie implicite de l'assemblage est commune à ces deux méthodes (premier et deuxième ordre), ce qui permet de s'assurer que la matrice est définie, (une matrice strictement convective est à diagonale dominante), et, par l'application des conditions aux limites, qu'elle sera inversible.

Le gradient est obtenu soit par une méthode de reconstruction de type moindres carrés, soit par une méthode intégrale utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky et des valeurs interpolées sur les faces. Le détail de son évaluation fait l'objet d'une partie dédiée (voir *Calcul du Gradient* page 29).

Au plan algébrique, cela se traduit de comme suit :

si  $\dot{m}_e > 0$

$$A_{PP} + = \dot{m}_e ; A_{PE} - = 0$$

$$\text{et } B_P - = (\vec{\nabla} C_P \cdot \vec{P}e) \dot{m}_e$$

$$A_{EE} + = 0 ; A_{EP} - = \dot{m}_e$$

$$\text{et } B_E + = (\vec{\nabla} C_P \cdot \vec{P}e) \dot{m}_e$$

si  $\dot{m}_e < 0$

$$A_{PP} + = 0 ; A_{PE} - = \dot{m}_e$$

$$\text{et } B_E - = (\vec{\nabla} C_E \cdot \vec{E}e) \dot{m}_e$$

$$A_{EE} + = \dot{m}_e ; A_{EP} - = 0$$

$$\text{et } B_P + = (\vec{\nabla} C_E \cdot \vec{E}e) \dot{m}_e$$

## Schéma amont deuxième ordre avec limiteur (DDL2-ENO2)

Le schéma amont deuxième ordre avec limiteur [Gooch 1997] ne diffère du schéma UDS2 que dans l'évaluation du gradient. Le calcul du gradient DDL2-ENO2, (pour Data-Dependent Least Squares Essentially Non Oscillatory 2<sup>nd</sup> Order) tient compte des variations des données dans le voisinage de la cellule de calcul de sorte qu'il réduit considérablement les phénomènes oscillatoires, notamment près des discontinuités. Le détail de ce calcul fait l'objet d'une partie dédiée (voir *Calcul du Gradient* page 29).

### **Remarque : structure commune de la matrice pour les trois schémas d'advection**

Bien que d'autres options soient possibles, nous avons choisi d'étendre le schéma amont premier ordre sous plusieurs formes de sorte que la partie implicite de la matrice soit commune aux trois méthodes, tout en gagnant un ordre de discrétisation.

Notamment, nous pourrions citer le schéma centré (CDS pour Central Differencing Scheme), dans lequel on considère linéaire la variation de l'inconnue entre les volumes P et E. (La valeur 'C<sub>f</sub>' de l'inconnue sur la face est obtenue par interpolation linéaire des valeurs des éléments voisins).

Ce schéma est plus précis que le schéma du premier ordre, mais à l'instar du schéma UDS2, il induit lui aussi des oscillations, et de plus, il possède une limite intrinsèque de stabilité en calcul stationnaire, basée sur le nombre de Péclet de maille  $Pe$ . Ce nombre peut être interprété comme le rapport du temps caractéristique de convection sur le temps caractéristique de diffusion : en absence de diffusion, ce temps devient nul, et la contrainte temporelle rend alors inexploitable ce schéma.

Ces limitations ont donné lieu à des hybridations du schéma CDS par le schéma UDS1. On pourra se référer notamment à *Patankar [1980]*, *Raithby, & Torrance [1974]* pour le schéma UWDS (Upwind Weighted Differencing Scheme).

## 2.2.4 Terme source

On utilise la valeur calculée au barycentre du volume de contrôle :

$$Q_P^C = \int_P q_C dV \approx q_C)_P \Delta\Omega_P$$

Où  $q_C)_P$  est la valeur de  $q_C$  au centre de la maille P, et  $\Delta\Omega_P$  le volume de la maille P.

Au plan algébrique, le second membre se voit augmenté du terme additionnel suivant :

$$B_P += Q_P^C$$

## 2.2.5 Terme temporel

Nous avons présenté dans les paragraphes précédents les méthodes de discrétisation spatiales que nous avons employées. Les termes d'advection, de convection et source font varier de manière temporelle la variable intensive considérée. Nous avons employé une méthode du deuxième ordre pour la dérivée temporelle de  $C$  :

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} \approx \rho \frac{3C^{n+1} - 4C^n + C^{n-1}}{2\Delta t}$$

Au plan matriciel, cela se traduit pour le volume P considéré de la manière suivante :

$$A_{PP} += \frac{3\rho}{2\Delta t} \Delta\Omega_P$$

$$B_P += \rho \frac{4C^n - C^{n-1}}{2\Delta t} \Delta\Omega_P$$

**Remarque** : avec l'emploi de cette méthode de discrétisation temporelle, nous constatons que la matrice voit sa diagonale renforcée, ce qui facilite sa résolution, en particulier lors de l'emploi d'un solveur matriciel itératif. Les écritures choisies pour les schémas de convection de diffusion assurent que la matrice est à diagonale dominante. Cette diagonale dominante de la matrice de résolution devient diagonale dominante stricte quand le terme temporel est mis à contribution. Cela nous assure que la matrice de résolution sera toujours inversible, et que la résolution par un solveur itératif sera facilitée.

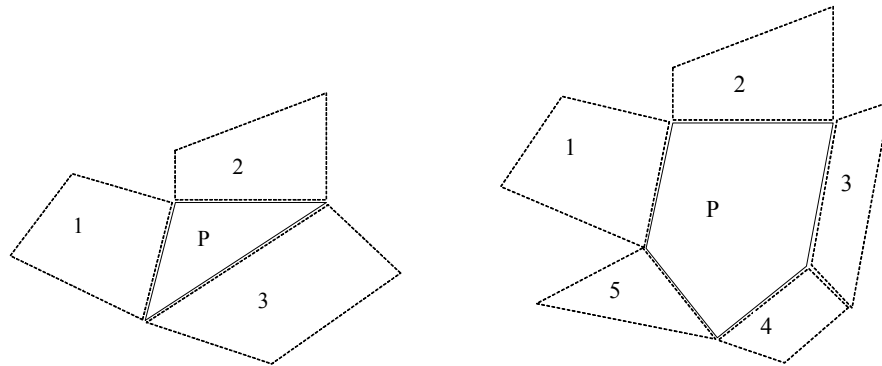
## 2.3 Méthodes de calcul des gradients

Par définition, un maillage non structuré a pour caractéristique de présenter une connectivité variable selon l'élément considéré. La plupart du temps, de surcroît, les distances entre éléments sont variables elles aussi. Ainsi, le calcul du gradient n'est plus aussi simple que dans le cas du maillage structuré. A fortiori, il serait très délicat d'exprimer le gradient de manière implicite en fonction des inconnues stockées au centre des éléments.

Deux grands types de méthodes employées dans notre code sont ici présentées : l'approche de type moindres carrés, avec ou sans limiteur [Gooch 1997], et une approche type reconstruction de Gauss.

### 2.3.1 Calcul du gradient en maillage non structuré

On souhaite, dans le contexte d'un maillage non structuré, évaluer le gradient d'une variable intensive  $C$  en fonction de sa valeur sur une maille et de sa valeur dans les mailles voisines :



*Fig. 5 et Fig. 6 Connectivité variable du nombre d'éléments, notations*

L'évaluation d'un gradient en maillage non structuré diffère du calcul en maillage structuré dans la mesure où la connectivité d'un élément est, par définition, variable. Aussi, le nombre de paramètres qui interviennent dans cette évaluation est variable [Fig. 5], [Fig. 6]. Dans un premier temps, nous allons présenter les conditions pour qu'un gradient de cette variable puisse être défini de manière discrète.

Écrivons un développement limité de la valeur de la variable  $C$  au voisinage de  $P$  :

$$C_M = C_P + \mathbf{PM} \cdot \nabla C_P + o(\mathbf{PM})$$

[Eq 8]

Où  $M$  est un point dans le voisinage de  $P$ . (Cette écriture suppose que la fonction associée à  $C$  est dérivable dans ce voisinage).

On peut reformuler [Eq 8] sous forme du système algébrique  $\mathbf{PM} \cdot \nabla C_P = C_M - C_P$  permettant de calculer le gradient en fonction des variations de  $C$  au voisinage de  $P$  :

$$A.X=B$$

[Eq 9]

$$\text{où } A = \begin{bmatrix} x_1 - x_P & y_1 - y_P \\ x_2 - x_P & y_2 - y_P \\ \vdots & \vdots \\ x_n - x_P & y_n - y_P \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad \text{et } B = \begin{bmatrix} C_1 - C_P \\ C_2 - C_P \\ \vdots \\ C_n - C_P \end{bmatrix}$$

$\left[ \frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial y} \right]$  est une estimation de  $\nabla C$  en P, [1 .. n] les indices des éléments du voisinage de P.

Considérons le gradient  $\left[ \frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial y} \right]^{1,2}$  évalué avec les deux points '1' et '2' du voisinage de C :

$$\begin{bmatrix} x_1 - x_P & y_1 - y_P \\ x_2 - x_P & y_2 - y_P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial y} \end{bmatrix}^{1,2} = \begin{bmatrix} C_1 - C_P \\ C_2 - C_P \end{bmatrix}$$

La matrice  $\begin{bmatrix} x_1 - x_P & y_1 - y_P \\ x_2 - x_P & y_2 - y_P \end{bmatrix}$  est inversible (son déterminant n'est pas nul) lorsque les points 1,2 et P ne sont pas alignés.

Étant donné deux cellules voisines, il est donc possible d'évaluer un gradient de C sur la cellule P si les barycentres des trois cellules ne sont pas alignés. En deux dimensions, deux voisins de ce type sont donc nécessaires et suffisants pour calculer un gradient sur P. Aussi, un nombre plus grand de voisins conduit à un système algébrique [Eq 9] surdéterminé. Par exemple, [Fig. 6], l'élément P (central) a cinq voisins pris en compte pour le calcul du gradient<sup>7</sup>.

Nous allons maintenant présenter les méthodes que nous avons employées pour évaluer le gradient de C en P.

### 2.3.2 Une approche moindres carrés

Une approche moindres carrés est typique des systèmes surdéterminés. Nous cherchons ici à déterminer un vecteur gradient X tel que le résidu  $r(X) = \sqrt{\sum (AX-B)^2}$  soit minimal. r est minimal quand  $r^2$  est minimal :

$$r(X)^2 = (AX-B)^2 = {}^t(AX-B)(AX-B) = ({}^tX^tA-{}^tB)(AX-B)$$

$$\text{soit } r(X)^2 = {}^tX^tAAX - 2{}^tBAX + {}^tBB$$

Notons  $W = {}^tAA$  et  $V = {}^tAB$

$$r(X)^2 = {}^tXWX - 2VX + {}^tBB$$

$$r(X)^2 = \sum_{i,j=1}^n W_{i,j} X_i X_j - 2 \sum_{j=1}^n V_j X_j + B^2$$

Le vecteur X minimise  $r^2$  quand la dérivée par de r par rapport à chaque composante  $X_i$  est nulle :  $\frac{\partial r^2}{\partial X_i} = 0$  équivaut à  $\sum_{j=1}^n W_{i,j} X_j = V_i$  soit,

$$({}^tAA)X = {}^tAB$$

[Eq 10]

La matrice  ${}^tAA$  est maintenant une matrice carrée, symétrique, positive, et inversible s'il existe deux éléments dans le voisinage considéré de P dont les barycentres et le barycentre de P ne sont pas alignés.

<sup>7</sup> Notre choix de connectivité consiste à considérer comme voisins deux éléments qui partagent une face.

Le système précédent est un système [2\*2] (en dimension 2), qui minimise la norme du résidu.

Il existe plusieurs évaluations possibles du gradient de C en P, notamment en raison du caractère surdéterminé du système. On peut pondérer les différentes contributions des éléments du voisinage de P, pour obtenir autant d'évaluations du gradient.

Par l'intermédiaire de ce type de pondérations, il existe notamment des gradients avec limiteurs, dont une version est présentée dans ce qui suit.

### 2.3.3 Un gradient avec limiteur : la méthode DDL2-ENO2

La méthode qui suit est largement inspirée de la méthode DDL2-ENO2 (pour Data-Dependent Least Squares, Second Order) [Gooch 1996] [Abgrall et al 1993] Elle est basée dans un premier temps sur une évaluation de type moindres carrés pour laquelle on introduit ensuite des coefficients de pondération variables en fonction du voisin i.

Soit  $\mathbf{X}_0$  l'évaluation du gradient obtenu après résolution de [Eq 10]:

$$\mathbf{X}_0 = [\sum A_i A_i^T]^{-1} \sum A_i^T B_i \quad [\text{Eq 11}]$$

Le vecteur  $\mathbf{X}_0$  peut être considéré comme une moyenne des gradients calculés avec chaque voisin de l'élément considéré C.

Soit maintenant le vecteur résidu  $\mathbf{R}_0$ , qui est un indicateur de la qualité de la résolution du système surdéterminé] :

$$\mathbf{R}_0 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X}_0 - \mathbf{B} \quad [\text{Eq 12}]$$

La i-ème ligne du vecteur  $\mathbf{R}_0$  est un indicateur de la cohérence du gradient  $\mathbf{X}_0$  et du gradient évalué avec le voisin 'i'. Nous allons maintenant normaliser le vecteur  $\mathbf{R}_0$ , pour obtenir le vecteur sans dimension  $\mathbf{R}$  :

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 / \|\mathbf{R}_0\|_2$$

**Remarque :** si la norme du vecteur  $\mathbf{R}_0$  est nulle, cela signifie que le système n'est pas surdéterminé : il n'est alors pas nécessaire de chercher des pondérations variables pour les différents éléments du voisinage de C. Dans ce cas,  $\mathbf{X}_0$  est retenu comme valeur du gradient de C en P.

On définit maintenant des coefficients de pondération  $W_i$  (sans dimension), pour chacun des éléments i du voisinage de P. Ceux-ci dépendent du résidu  $\mathbf{R}$  de manière à privilégier les directions pour lesquelles les variations de C présentent le plus de cohérence entre elles.

$$W_i = 1 / (\epsilon + |\mathbf{R}_i|) \quad [\text{Eq 13}]$$

où  $\epsilon$  est un nombre sans dimension, qui a pour seul rôle d'éviter la division par zéro. Nous l'avons pris égal à  $10^{-10}$ .

**Remarque :** notre méthode diffère dans l'expression de cette pondération de la méthode proposée par [Gooch 1996], en cela que l'auteur emploie des poids  $W$  qui possèdent une dimension. Dans un souci de cohérence, nous avons estimé judicieux de le remplacer par un coefficient sans dimension. Avec la méthode proposée par l'auteur, un changement d'échelle conduit à des gradients (et donc d'une solution) qui ne sont pas forcément les mêmes.

Il faut maintenant employer ces coefficients de pondération dans un système algébrique analogue à [Eq 9] :

$$A' \cdot X \approx B' \quad [\text{Eq 14}]$$



avec

$$A' = \begin{bmatrix} W_1(x_1 - x_P) & W_1(y_1 - y_P) \\ W_2(x_2 - x_P) & W_2(y_2 - y_P) \\ \vdots & \vdots \\ W_n(x_n - x_P) & W_n(y_n - y_P) \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad B' = \begin{bmatrix} W_1(C_1 - C_P) \\ W_2(C_2 - C_P) \\ \vdots \\ W_n(C_n - C_P) \end{bmatrix}$$

Reste enfin à inverser le système matriciel associé pour obtenir le gradient  $\tilde{X}$  :

$$X' = \begin{pmatrix} \tilde{X} \\ A' \end{pmatrix}^{-1} A' B'$$

$X'$  est alors un gradient qui privilégie les éléments pour lesquels les variations de la grandeur  $C$  sont les plus régulières

Par construction, ce gradient est anisotrope, dans la mesure où il emploie une pondération variable selon différentes directions de l'espace. Selon les directions de l'espace, le gradient reconstruit une fonction qui est k-exacte, k variant continûment depuis une borne minimum jusqu'à 1 (en raison de la variation continue du coefficient  $W_i$  [Eq 13]). À l'extrême, cette borne minimale peut tendre vers 0, s'il y a beaucoup de voisins, et que toutes les valeurs du voisinage ( $y$  compris  $P$ ) varient linéairement en fonction des coordonnées, sauf une (qui sera ignorée). Ainsi, le schéma amont ENO2 [§ 2.2.3] peut être vu comme un schéma hybridant les schémas de convection UDS1 et UDS2, mais avec une hybridation qui n'est pas isotrope et dépend de la distribution locale des valeurs considérées. Il a été construit pour limiter les oscillations liées à l'utilisation d'un schéma de second ordre dans le cas de fortes variations de la quantité considérée [Gooch 1996]. Nous l'utilisons dans les termes d'advection pour gagner un ordre de discrétisation par rapport au schéma de base (amont 1<sup>er</sup> ordre).

Il s'avère, à l'utilisation que ce schéma est relativement peu coûteux en temps de calcul. Pour conclure, nous avons aussi employé ce gradient pour la discrétisation des termes de diffusion, dans le souci d'employer le même gradient que pour la convection.

### 2.3.4 Une méthode intégrale

Cette méthode est inspirée par le théorème de la divergence. Grâce à celui-ci, nous pouvons écrire :

$$\iiint_V \vec{\nabla} C dV = \iint_e C_e \cdot \vec{n}_e dS_e$$

On suppose le gradient constant sur tout le volume de contrôle,  $V \cdot \nabla C \approx \iint_e C_e \cdot \mathbf{n}_e \cdot dS_e$  et, sous forme discrète, la relation précédente peut être approchée comme suit :

$$\nabla C \approx \frac{1}{V} \sum_e C_e \cdot \mathbf{n}_e \cdot dS \quad \text{avec} \quad C_e = \frac{C_E + C_P}{2}$$

où  $\mathbf{n}_e$  est la normale extérieure (du volume courant  $P$  vers le volume  $E$ ).

Et, puisque  $\sum_f \frac{C_P}{2} \mathbf{n}_e \cdot dS = \frac{C_P}{2} \sum_f \mathbf{n}_e \cdot dS = \vec{0}$ , l'évaluation du gradient se simplifie de la manière suivante :

$$\nabla C_P \approx \frac{1}{2 * V} \sum_e C_E \mathbf{n}_e \cdot dS_e$$

Cette méthode a été employée pour le calcul du gradient de pression dans les équations de quantité de mouvement. A noter que les méthodes intégrales peuvent elles aussi être modifiées pour mettre en place un limiteur.

## 2.4 Conditions aux limites

Nous employons des éléments plats pour l'application des conditions aux limites. Cela implique qu'il existe une inconnue du système matriciel associée à l'équation courante pour chaque morceau de la frontière du domaine sur laquelle on souhaite appliquer une condition aux limites donnée. Cela permet notamment de mettre en place des conditions aux limites de manière implicite, et par conséquent d'améliorer la convergence.

De plus, il est aisé, grâce à ce choix, de mettre en place des conditions aux limites variables fonctions de divers paramètres, notamment de la position de l'élément. Un exemple de condition aux limites de ce type (Dirichlet fonction de la position de l'élément) a été employé dans un des tests de convection qui suivent (*Test 2* §2.5.2).

De surcroît, l'emploi d'éléments plats en frontière ouvre la porte à des résolutions d'équations en frontière, qui peuvent trouver des applications en électromagnétisme, ou encore en turbulence, pour la prise en compte de lois de parois.

Enfin, ce choix a un coût imperceptible (pour un maillage de taille homogène sur un domaine dont toutes les dimensions sont du même ordre, le pourcentage d'inconnues supplémentaires est de l'ordre de  $n^{-1/2}$  en deux dimensions et  $n^{-2/3}$  en trois dimensions,  $n$  étant le nombre total d'éléments).

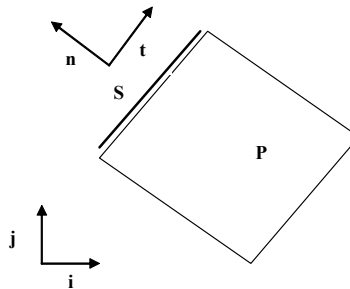
Nous détaillerons ci-dessous l'écriture des conditions aux limites pour l'équation de transport de scalaire passif suivante, dont le scalaire transporté est une variable intensive  $C$  :

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla(\Gamma \nabla C) + S_C$$

Nous allons présenter les deux grands types de conditions aux limites : à valeur imposée, ou en flux imposé. On présentera aussi des conditions mixtes de type coefficient d'échange.

### 2.4.1 Condition aux limites à valeur imposée : de type Dirichlet.

On souhaite imposer sur une frontière du domaine la valeur  $C_0$ .



*Fig. 7 : Notations employées pour la frontière*

Sur l'élément  $S$ , on souhaite imposer la valeur  $C_0$ .

$$C_S = C_0$$

L'équation de transport discrétisée pour l'élément frontière prend la forme algébrique générale qui suit :

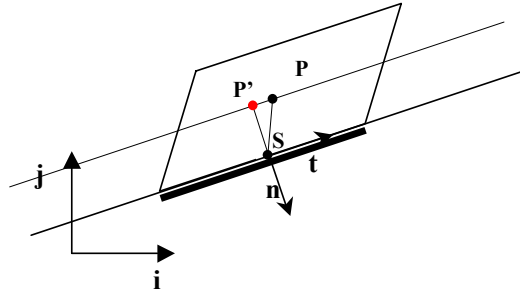
$$A_S \cdot C_S = B_S$$

Aussi, on peut imposer la condition de Dirichlet de la manière suivante :

$$\begin{aligned} A_S &= \lambda \\ B_S &= \lambda C_0 \end{aligned}$$

Où  $\lambda$  est un nombre non nul. De manière habituelle, nous avons choisi  $\lambda = 1$  pour les équations de transport scalaire.

## 2.4.2 Flux imposé : condition de type Neumann



*Fig. 8 : Notations employées pour l'application de la condition aux limites de type Neumann*

Sur l'élément S, on souhaite imposer un flux  $\varphi_0$  défini par

$$\varphi_0 = \left( -\Gamma \frac{\partial C}{\partial n} \right)_S$$

$\mathbf{n}$  étant dirigé vers l'extérieur du domaine, un flux imposé positif correspond à un flux extrait hors du domaine. Avec les notations de la [Fig. 2] nous pouvons écrire cette relation sous la forme discrète suivante :

$$\varphi_0 \partial S = \Gamma_S \left( \frac{C_{P'} - C_S}{\| \overrightarrow{SP'} \|} \right)_S \partial S$$

Or,  $P'$  n'est pas ici un nœud de calcul, en raison de l'écart à l'orthogonalité entre la surface de l'élément frontière, et le bipoint liant les nœuds de calcul P et S.

Afin d'exprimer ce gradient avec les nœuds de calcul existant, nous pouvons l'écrire implicitement avec les valeurs des éléments P et S, et corriger cet écart explicitement, exactement comme pour les flux de diffusion sur les faces internes :

$$\varphi_0 \partial S = \Gamma_S \left( \frac{C_P - C_S}{\| \overrightarrow{SP} \|} \right)_S \partial S + \Gamma_S \left[ -\nabla C_S \cdot \partial \mathbf{S} - \left( \frac{C_P - C_S}{\| \overrightarrow{SP} \|} \right)_S \partial S \right]^n$$

En employant cette méthode, il est nécessaire d'itérer la résolution au sein d'un même pas de temps.

Cette formulation assure que la matrice possède une nature diffusive, grâce à la partie implicite, tout en tenant compte explicitement de l'écart à l'orthogonalité. La partie entre crochets est calculée avec les valeurs de l'itération précédente. Pour l'évaluer, nous avons besoin du gradient au nœud S, (pris égal au gradient dans l'élément voisin).

Le flux diffusif extrait de l'élément P par la face S s'exprime donc comme pour une face interne, et sera égal au flux  $\varphi_0$  voulu si la valeur de l'inconnue  $C_S$  sur la frontière vérifie l'équation ci-dessus. Ceci constitue l'équation relative à l'élément frontière S, et se traduit au niveau matriciel de la manière suivante :

$$A_{PP+} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} ; A_{PS-} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} \text{ et } B_{P-} = -\Gamma_S \partial \mathbf{S} \cdot [\nabla C_S]^n - \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} [C_P - C_S]^n$$

$$A_{SS+} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} ; A_{SP-} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} \text{ et } B_{S+} = -\Gamma_S \partial \mathbf{S} \cdot [\nabla C_S]^n - \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} [C_P - C_S]^n - \varphi_0 \partial S$$

### 2.4.3 Condition mixte

Une condition aux limites mixte relie le flux à travers la frontière à la valeur du scalaire considéré. Un cas typique de condition mixte est celui du coefficient d'échange, pour l'équation du transport de la chaleur. La valeur intensive transportée est ici la température T. Notons  $\varphi_T$  le flux de chaleur à travers la frontière considérée, h le coefficient d'échange et  $T_{Ext}$  la température extérieure.

$$\varphi_T)_S = h(T - T_{Ext}) \text{ soit } \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_S = \frac{h}{k}(T_{Ext} - T)$$

La condition est donc pleinement définie si l'on impose la température extérieure  $T_{Ext}$  sur l'élément S, et le coefficient de proportionnalité h/k entre la dérivée normale et la différence  $T_{Ext}-T$ .

Par généralisation, on peut définir une condition mixte pour le transport d'un scalaire C à l'aide d'une relation entre la dérivée normale et la valeur de l'inconnue, paramétrée par une valeur  $C_{ext}$  et un coefficient de proportionnalité h :

$$\left( \frac{\partial C}{\partial n} \right)_S = \frac{h}{\Gamma} (C_{Ext} - C)$$

Une discrétisation identique à celle de la condition de Neumann (ou du flux de diffusion sur les faces internes) montre que la valeur  $C_s$  de l'inconnue en frontière doit vérifier :

$$\Gamma_S \left( \frac{C_P - C_S}{\|\overrightarrow{SP}\|} \right)_S \partial S + \Gamma_S \left[ -\nabla C_S \cdot \partial \mathbf{S} - \left( \frac{C_P - C_S}{\|\overrightarrow{SP}\|} \right)_S \partial S \right]^n = h.(C_S - C_{ext}).\partial S$$

Ce qui se traduit au niveau matriciel par :

$$A_{PP+} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} ; A_{PS-} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|}$$

$$\text{et } B_{P-} = -\Gamma_S \partial \mathbf{S} \cdot [\nabla C_S]^n - \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} [C_P - C_S]^n$$

$$A_{SS+} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} + h.\partial S ; A_{SP-} = \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} \text{ et}$$

$$B_{S+} = -\Gamma_S \partial \mathbf{S} \cdot [\nabla C_S]^n - \Gamma_S \frac{\partial S}{\|\overrightarrow{PS}\|} [C_P - C_S]^n + h.\partial S.C_{ext}$$

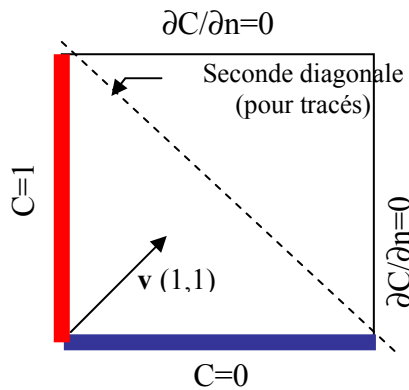
Ici encore, il faut itérer la résolution pour obtenir la convergence au sein d'un pas de temps.

## 2.5 Tests

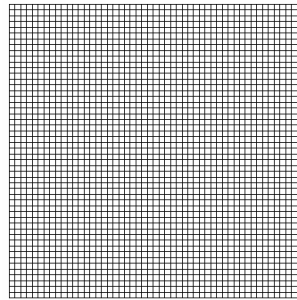
Nous illustrons ici les différents schémas d'advection, à travers deux tests simples, en écoulement uniforme pour le premier, et non uniforme pour le second. Ces tests ont pour vocation d'illustrer les limitations des schémas et de motiver les choix qui seront faits ultérieurement dans le contexte du raffinement automatique de mailles près d'une interface.

### 2.5.1 Test 1. Advection d'une marche

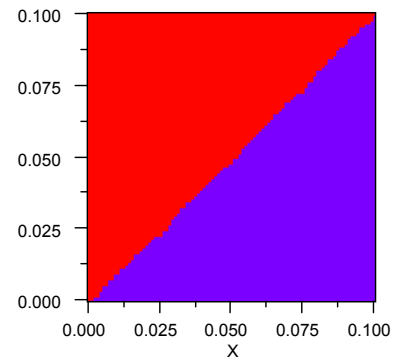
On résout l'advection pure d'un scalaire passif  $\phi$  (c'est-à-dire, sans effet sur l'écoulement) avec un champ de vitesse imposé uniforme, en employant un maillage régulier de 50x50 mailles carrées :



*Fig. 9 : test d'advection*



*Fig. 10 : maillage 50\*50*

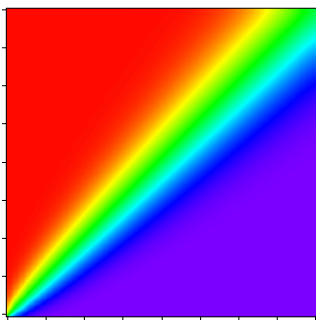


*Fig. 11 : solution analytique*

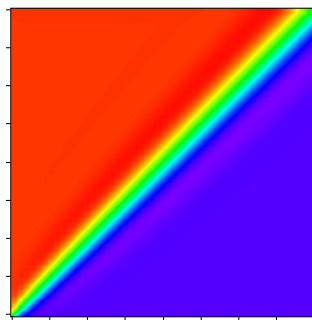
Dans ce cas de convection sans diffusion, la solution analytique évidente est le transport de la marche :  $C$  ne peut prendre que les deux valeurs des conditions aux limites, soit 0 ou 1.

Avec le champ de vitesses choisi  $\mathbf{v}(1,1)$ ,  $C=0$  pour  $y < x$ ,  $C=1$  pour  $y > x$ .

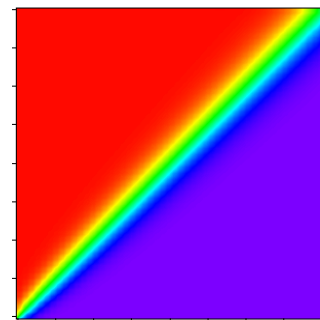
### Résultats



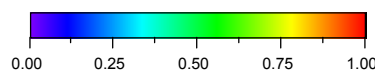
*Fig. 12 : Schéma UDS1*



*Fig. 13 : Schéma UDS2*

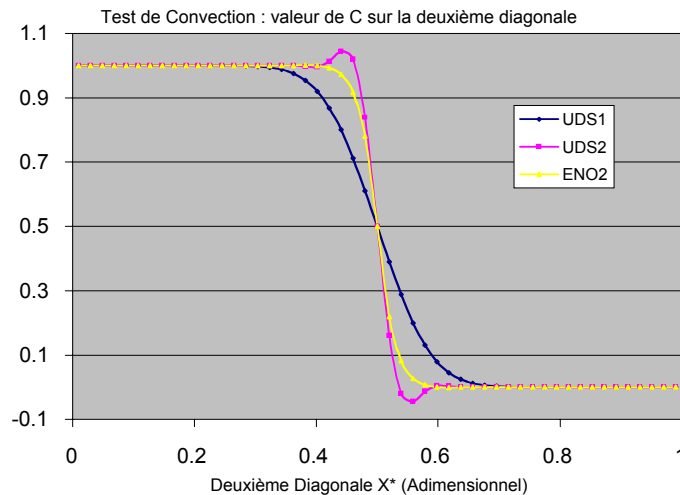


*Fig. 14 : Schéma ENO2*



*Valeur du scalaire passif C*

Les trois schémas d'advection donnent des distributions différentes du scalaire passif (Fig. 12 à Fig. 14). Les distributions sur la seconde diagonale sont comparées entre elles et à la solution analytique en [Fig. 15] :



*Fig. 15 : Valeur du scalaire passif C sur la deuxième diagonale du domaine*

Dans le cas du **schéma UDS1**, en dépit de l'absence de diffusion dans l'équation de départ, on constate la présence d'une diffusion numérique. Ce lissage de la solution est typique d'un schéma de convection d'ordre 1. À maillage identique, il est nécessaire de faire appel à schéma d'ordre plus élevé pour avoir une solution plus cohérente avec la solution analytique. Sinon, il est nécessaire d'employer un maillage plus fin.

Pour le **schéma UDS2**, la couche de diffusion numérique est considérablement réduite en comparaison au schéma d'ordre 1. Par contre, les valeurs ne sont plus bornées par les valeurs initiales du scalaire passif. On observe ici un phénomène de rebond numérique, typique d'un schéma d'ordre 2.

On peut effectivement constater sur la Fig 15 des iso valeurs hors bornes, et la dégradation du résultat à mesure que l'on s'éloigne de (0.0). Avec ce schéma, les valeurs minimales et maximales du scalaire passif sont de -0.049 et 1.049.

En dépit de cet inconvénient, qui peut être rédhibitoire, l'intérêt d'un schéma d'ordre élevé est évident, puisqu'il permet d'obtenir une précision supérieure à un schéma UDS1.

Pour le **schéma ENO2**, On constate une couche de diffusion nettement plus réduite que pour le schéma UDS1, et une absence de rebond numérique. Ce schéma présente donc une bonne précision, même sur un maillage relativement lâche, et n'induit pas de valeurs potentiellement inacceptables d'un point de vue physique.

Ce tracé illustre la diffusion numérique et les défauts des différents schémas : on peut souligner le nombre de mailles important sur lequel diffuse le schéma d'ordre 1 (courbe jaune). De même, les oscillations du schéma d'ordre 2 sans limiteur (courbe rose) ont une amplitude non négligeable, et ce schéma UDS2 présente la même pente que le schéma ENO2 près de la discontinuité.

Nous insistons sur l'absence d'oscillations du schéma ENO2, ainsi que sa plus grande précision.

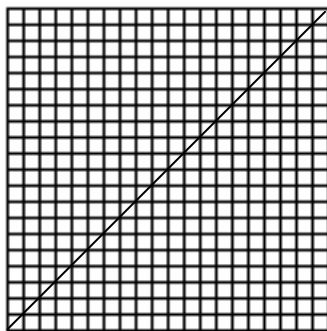
## 2.5.2 Discussion sur l'orientation des mailles dans la diffusion numérique

Étant donné le maillage employé, on constate que la diffusion numérique est maximale (schéma UDS1) lorsque le champ de vitesse est orienté à 45° des faces. Cette diffusion numérique a été quantifiée par Patankar [1980] selon :

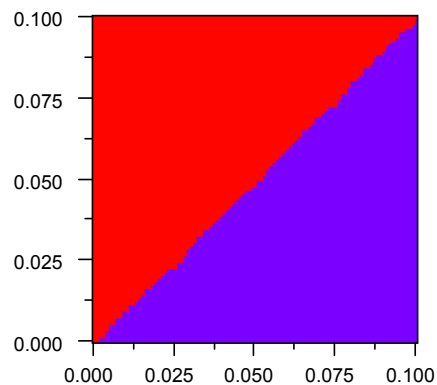
$$\Gamma_{artif} = \frac{U\Delta x\Delta y.\sin\theta}{4(\Delta y.\sin\theta + \Delta x.\cos\theta)}$$

où  $\Gamma_{artif}$  est la valeur locale de la diffusion numérique (ou artificielle) ( $m^2.s^{-1}$ )  
 $U$  la norme de la vitesse locale ( $m.s^{-1}$ )  
 $\Delta x, \Delta y$  les distances caractéristiques de l'élément selon les axes  $x$  et  $y$  (m)  
 $\theta$ , l'angle (compris entre 0 et 90°) entre la vitesse du fluide et la ligne de maillage.

Nous pouvons proposer un cas qui illustre bien ce phénomène. Modifions le maillage du test 1 comme suit : ajoutons une série de mailles triangulaires sur l'interface de séparation des domaines 1 et 2 de la solution analytique, et constatons que la diffusion numérique est nulle, dans la mesure où les deux domaines sont séparés par une interface parallèle au champ de vitesses :



*Fig. 16 : Maillage modifié avec une diagonale alignée avec l'écoulement*



*Fig. 17 : Advection d'un scalaire passif sur un maillage avec une diagonale ajoutée*

Le résultat précédent a été obtenu en employant le schéma amont UDS1, dont la nature diffusive s'exprime en général de manière assez forte, mais qui est ici totalement gommée. Dans le contexte du raffinement automatique de mailles, cette observation peut être mise à contribution. Il est en effet possible de minimiser l'influence de la diffusion numérique près d'une interface tout en employant un ordre de discrétisation faible : il nous faudra pour cela raffiner localement dans le sens des vitesses, i.e. parallèlement aux discontinuités.

### 2.5.3 Test 2 : advection en écoulement non uniforme

Ce test a pour but de tester l'influence sur la diffusion numérique d'une orientation variable des mailles par rapport au champ de vitesse.

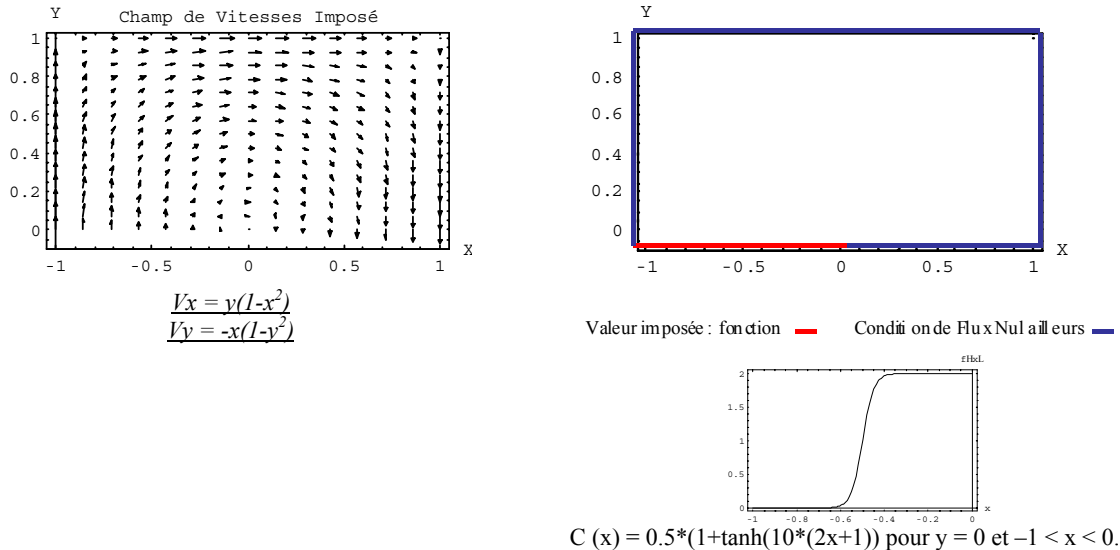


Fig. 18 : Description du test de la cavité recirculante

On étudie le transport d'une rampe (en tangente hyperbolique) à l'entrée d'un domaine rectangulaire. La convection est faite par un champ de vitesses donné, à divergence nulle.

#### Maillage employé

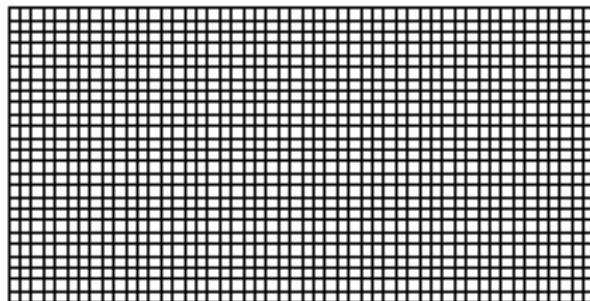


Fig. 19 : Maillage 50\*25 régulier

#### Solution analytique

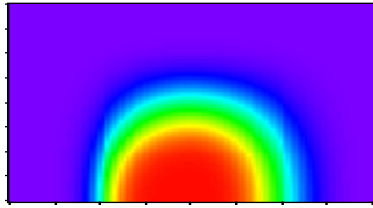
En absence de diffusion, la solution analytique en sortie est la fonction symétrique de celle imposée en entrée :  $C(x) = 0.5 * (1 + \tanh(10 * (-2x+1)))$  pour  $y = 0$  et  $x > 0$ .

Aussi, on caractérisera la qualité des schémas de convection par la comparaison du profil du scalaire en sortie au profil du scalaire en entrée. La qualité de la symétrie avec le profil d'entrée est un indicateur de la précision du schéma.

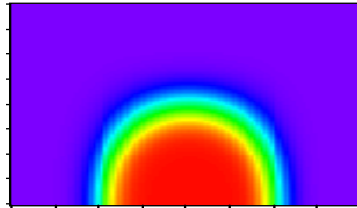


## Résultats

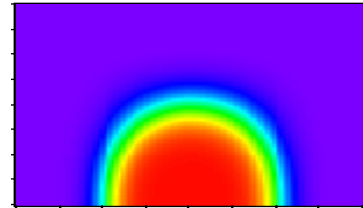
Les trois figures qui suivent sont les cartes du scalaire passif sur tout le domaine :



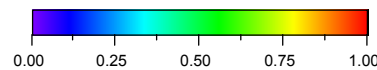
*Fig. 20 : Schéma UDS1*



*Fig. 21 : Schéma UDS2*

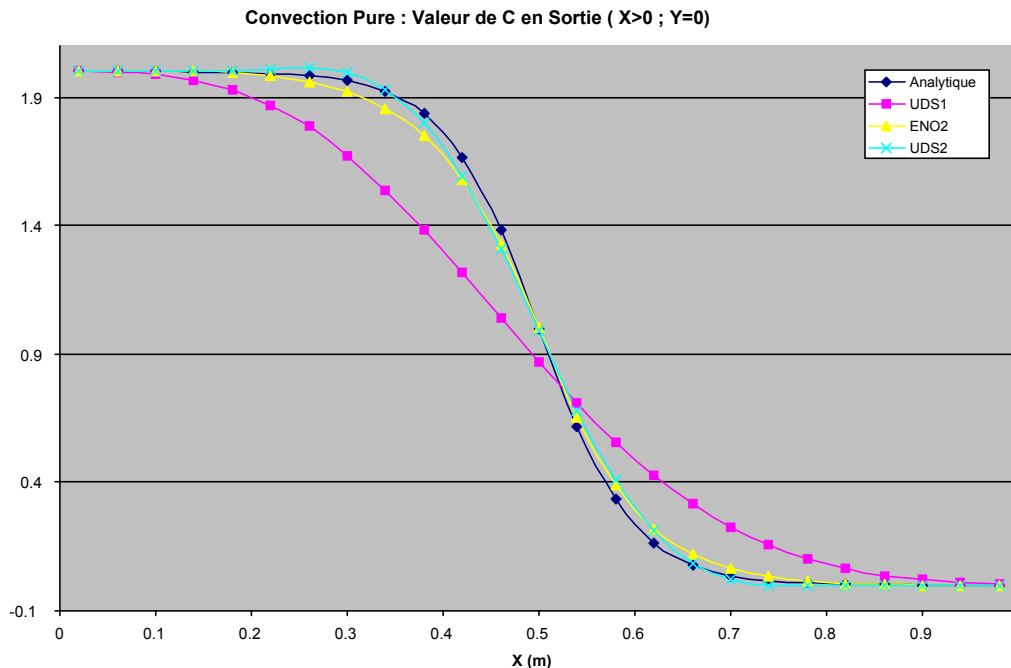


*Fig. 22 : Schéma ENO2*



*Valeur du scalaire passif C*

Ce test est effectué en l'absence de toute diffusion physique pour le scalaire passif. Aussi le profil en sortie doit être symétrique de celui en entrée. (Solution analytique, courbe bleue) :



*Fig. 23 : Valeur du scalaire passif C en sortie de domaine : comparaison des trois schémas*

**Le schéma UDS1** du premier ordre manifeste une fois encore sa nature dissipative, et cela est particulièrement sensible lorsque les faces des mailles et l'écoulement local présentent un angle suffisant. Cela s'explique à la lumière de la remarque faite sur la forme que prend la diffusion numérique (cf. "Discussion sur l'orientation des mailles dans la diffusion numérique", page 38). On observe un étalement important du profil sur quasiment toute la sortie analysée. L'écart maximum est de 0,45.

**Le schéma UDS2** (d'ordre 2 sans limiteur) montre une grande précision : l'écart à la solution analytique n'excède jamais 0.07. Cependant, il présente une fois encore des valeurs hors bornes, alors que le profil analytique n'est plus une rampe de type Heaviside.

**Le schéma ENO2**, d'ordre 2 avec limiteur est quasiment aussi précis que le précédent, mais ne présente pas de valeur hors bornes. L'écart maximum est de 0,086.

## 2.5.4 Synthèse

Le choix de l'ordre de discrétisation est capital pour la précision du calcul. Nous éviterons l'emploi du schéma premier ordre, qui se caractérise par une diffusion numérique très importante.

Le schéma second ordre, lui, présente des caractéristiques intrinsèques pénalisantes, en raison de sa propension à générer des valeurs qui n'ont pas de sens physique. Ces valeurs hors bornes qu'il peut faire apparaître peuvent être dramatiques dans une simulation : elles pourraient en effet faire diverger un calcul par apparition de températures incorrectes (négatives, inférieures à une température de solidification...), de viscosités négatives (dans le cas de modèles de turbulence utilisant des équations de transport de quantités turbulentes), ou en règle générale dans tous les cas où l'apparition de valeurs hors bornes d'une inconnue transportée peut créer des instabilités dans d'autres équations (c'est le cas d'une viscosité négative qui provoque l'amplification de tout gradient de vitesse).

Aussi, le schéma de second ordre non oscillant (avec l'emploi du gradient ENO2) sera donc privilégié pour le terme de convection.

Le maillage, lui aussi, est crucial pour la précision, notamment à proximité des discontinuités, d'où l'intérêt du raffinement.

Enfin, le problème du choix du schéma ne se pose pas pour les autres termes (comme la diffusion ou le terme source).



### 3 Les Équations du Mouvement en Incompressible

Par équations du mouvement, on désigne l'ensemble des équations qui régissent la vitesse et la pression.

Chaque composante de la vitesse est régie par une équation de type transport de scalaire, semblable en de nombreux points au transport de scalaire passif. On présentera ici le traitement de ces composantes comme une extension du scalaire passif. La principale différence est que le champ convectant est intimement lié au champ convecté : il s'agit des composantes scalaires de la vitesse, convectées par le champ de vitesses lui-même.

En raison du couplage pression-vitesse et des exigences de l'équation de continuité, cet ensemble d'équations réclame une attention toute particulière.

En particulier, l'absence d'équation d'état pour la pression, une des hypothèses de travail étant 'l'écoulement incompressible' induit un traitement particulier pour la pression. Dans ce chapitre, nous verrons comment nous avons traité cette contrainte.

### 3.1 Introduction

La plupart des équations aux dérivées partielles rencontrées en mécanique des fluides sont des équations de transport, y compris l'équation de continuité dans un écoulement compressible. En effet celle-ci peut être considérée comme une équation de transport de la masse volumique  $\rho$ , et la pression peut être calculée à partir de  $\rho$  (et d'autres variables comme la température). Ceci n'est plus possible en écoulement incompressible puisque  $p$  n'est plus fonction de  $\rho$ . Dans le cas où  $\rho$  est constante l'équation de continuité est une contrainte sur le champ de vitesse uniquement, qui s'ajoute aux équations de quantité de mouvement (transport de vitesse), l'ensemble permettant de déterminer aussi bien les vitesses que la pression.

Ce problème de calcul de la pression a donné naissance à un ensemble de méthodes, dites «Psi-Omega», qui éliminent cette variable des équations gouvernant la quantité de mouvement. Nous pourrions citer - en deux dimensions - les méthodes de résolution basées sur la vorticit  développ es notamment par Dix [1963], Fromm et Harlow [1963], Pearson [1965], Barakat et Clark [1966].

Cette famille de m thodes pr sente l'avantage de conduire   la r solution de deux  quations de transport pour obtenir la vorticit   $\omega$  et la fonction de courant  $\psi$ . En revanche, elle est d licate    tendre en trois dimensions, dans la mesure o  il n'existe pas alors de fonction de courant mais un potentiel vecteur du champ de vitesses : la complexit  devient alors nettement sup rieure au b n fice que l'on peut tirer de cette approche [Aziz et Hellums, 1967].

D'autres m thodes consid rent l' coulement incompressible comme un cas asymptotique de l' coulement compressible. Nous pourrions citer les m thodes de pseudo compressibilit  (ou de compressibilit  artificielle). Elles offrent en th orie une plus grande flexibilit  d'utilisation que les codes incompressibles, mais cela se fait au d triment de la pr cision des calculs, et souvent au prix d'une condition contraignante sur le pas de temps de la r solution.

Ces m thodes de compressibilit  artificielle sont en effet souvent sujettes   une limite de stabilit  (condition de Courant), bas e sur la vitesse du son dans le fluide. Dans le cas asymptotique incompressible de ces m thodes, la c l rit  tend vers l'infini, et le pas de temps asymptotiquement vers z ro. La rigueur de l'hypoth se d'incompressibilit  se fait au prix d'un temps de calcul d'autant plus  lev . Les m thodes de p nalit  pr sentent une approche comparable, et des contraintes semblables Batchelor [1967].

Une autre approche est une m thode de projection de la pression, pr sent e dans Niceno, Hanjalic & Nobile [1998] notamment. Celle-ci semble particuli rement adapt e aux cas transitoires et   hauts Reynolds laminaires.

L'approche que nous avons choisie est celle de la correction de pression. Historiquement, les m thodes de corrections de pression d rivent de celles pr sent es par Patankar [1980]. Cette approche est par essence s quentielle, c'est- -dire qu'  partir d'un champ de pression approximatif, on r sout une apr s l'autre les  quations de quantit  de mouvement, lesquelles fournissent un champ de vitesses   divergence non nulle. Puisque la pression est un terme source dans les  quations de quantit  de mouvement, on emploie ensuite des variations de la pression (les corrections), pour obtenir un champ de vitesses qui v rifie l' quation de continuit . La m thode est ainsi fortement it rative, puisque l'obtention d'une solution impose d'avoir   la fois un champ de vitesses et un champ de pression corrects, alors que les deux sont fortement li s.

Ces m thodes de correction de pression sont tr s diverses par leurs approches, leurs m thodes de couplage, et leurs algorithmes, car elles ont fait l'objet de beaucoup de travaux ces vingt derni res ann es. Nous travaillons ici en maillages non structur s, ce qui demande de fortes adaptations (§ 3.3) des m thodes d'origine telles que celles de Patankar [1980]. Une fois ces adaptations introduites, les m thodes utilis es dans Clipoo seront pr sent es au § 3.4.

## 3.2 Équations de Navier-Stokes

Rappelons dans un premier temps les hypothèses de travail pour nos modélisations. Nous supposons l'écoulement laminaire, et incompressible, dans le sens où la densité du fluide ne dépend pas de la pression. Nous supposerons le fluide Newtonien.

Sous ces hypothèses, le mouvement du fluide est décrit par l'équation de continuité, exprimant la conservation de la masse et traitée dans les parties suivantes, et les équations de Navier Stokes qui expriment la conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{d(\rho \mathbf{u})}{dt} = \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho \nu \nabla \mathbf{u}) - \nabla p + \mathbf{f}$$

[Eq 15]

où  $\mathbf{u}$  est la vitesse locale du fluide ( $m.s^{-1}$ )  
 $\rho$  est la masse volumique du fluide ( $kg.m^{-3}$ )  
 $\nu$  est la viscosité cinématique ( $m^2.s^{-1}$ )  
 $p$  la pression locale du fluide (Pa)  
 $\mathbf{f}$ , la somme des forces volumiques. ( $N.m^{-3}$ )

Les équations de Navier-Stokes peuvent être obtenues sous forme intégrale par un bilan de quantité de mouvement, et comme nous l'avons vu pour les équations de transport, c'est cette forme intégrale qui sert de base à la discrétisation. De même, l'équation de continuité s'exprime sous forme intégrale comme un bilan de masse sur chaque maille.

Nous pouvons réécrire [Eq 15] sous une forme qui fait apparaître les différentes composantes vectorielles (avec par convention, une sommation sur les indices répétés) :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j}) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + f_i$$

[Eq 16]

La suite de cette partie présente la forme intégrale, puis discrète des différents termes constitutifs des équations de Navier-Stokes, en réutilisant la discrétisation développée au chapitre 2 pour les équations de transport.

### 3.2.1 Terme de diffusion

Les termes visqueux  $\nabla \cdot (\rho \nu \nabla \mathbf{u})$  des équations de quantité de mouvement ont leur équivalent dans l'équation de transport de scalaire passif. Le coefficient de diffusion est ici la viscosité, et ce terme peut s'écrire sous forme intégrale comme une somme de flux sur les faces :

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) dV = \sum_{l \in \mathcal{V}(P)} \rho_l \nu_l (\nabla u_i)_l \cdot \mathbf{n}_l \cdot \partial S_l$$

Ce terme est alors discrétisé de manière identique au terme de diffusion de l'équation de transport, en utilisant pour la dérivée normale à la face un schéma centré implicite (dans la direction reliant les barycentres des cellules voisines), plus une correction explicite.

### 3.2.2 Terme advectif

Les termes advectifs  $\nabla(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u})$  sont de même nature pour les équations de quantité de mouvement ( $qdm$ ) que ceux l'équation de transport générique. Sous forme intégrale, nous pouvons écrire pour la composante  $i$  de la vitesse la contribution du terme advectif sous forme d'une somme de flux sur les faces :

$$\int_{V_p} \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} dV = \sum_{l \in v(P)} \rho_l(u_i)_l \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{n}_l \cdot \partial S_l$$

[Eq 17]

Connaissant le débit  $\dot{m}_e = \rho_e \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{n} \cdot \partial S_e$  sur la face  $e$  du volume de contrôle<sup>8</sup>, le terme advectif est discrétisé de manière identique à celui de l'équation de transport de scalaire passif, la quantité transportée étant la composante  $u_i$  de la vitesse.

De manière analogue au traitement de l'équation de transport de scalaire passif, nous pouvons employer les trois schémas amont (schéma amont premier ordre, second ordre, et second ordre sans limiteur). Pour les mêmes raisons que celle du transport de scalaire passif, nous avons privilégié l'emploi du schéma ENO2.

### 3.2.3 Terme de pression et forces de volume

Comme nous l'avons mentionné lors du traitement des équations de transport, les termes source  $-\nabla p + \mathbf{f}$  sont intégrés à l'aide du théorème de la divergence lorsqu'ils peuvent se mettre sous forme d'une divergence, ce qui est le cas pour chaque composante de la force de pression :

$$Q_p^{C^i} = - \int_{V_p} \frac{\partial p}{\partial x_i} dV = - \int_{V_p} \nabla \cdot (p \mathbf{e}_i) dV = - \int_{S_p} p \mathbf{e}_i \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{l \in v(P)} -p_l \mathbf{e}_i \cdot \partial S_l$$

[Eq 18]

au niveau du système algébrique, ce terme est ajouté au second membre des équations de quantité de mouvement relatives à chaque cellule voisine d'une face "e" :

$$B_p^{Ui} = -p_e \mathbf{e}_i \cdot \partial S_e \text{ et } B_E^{Ui} = p_e \mathbf{e}_i \cdot \partial S_e$$

[Eq 19]

Cette discrétisation est conservative, c'est-à-dire que la force de pression exercée par la cellule P sur sa voisine E est opposée à la force exercée par E sur P. Ceci ne serait pas forcément le cas si on discrétisait la force de pression en multipliant le volume de la cellule par une estimation du gradient au centre de la cellule.

De la même façon, les forces volumiques qui contiennent une partie irrotationnelle dérivant d'un potentiel facile à expliciter devront préférentiellement être intégrées de la même façon. Un champ de forces irrotationnel n'est d'ailleurs moteur d'aucun mouvement, puisqu'il peut être exactement compensé par une augmentation de pression qui s'oppose au potentiel de ces forces (tout champ irrotationnel dérivant d'un potentiel). On intégrera donc le potentiel de ces forces dans le terme de pression en écrivant :

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_{\text{rot}} - \nabla \Phi_f \Rightarrow -\nabla p + \mathbf{f} = -\nabla p^* + \mathbf{f}_{\text{rot}} \quad \text{où} \quad p^* = p + \Phi_f$$

[Eq 20]

où  $p^*$  est la pression motrice, qui sera notée  $p$  dans toute la suite du mémoire, alors que les forces volumiques notées  $\mathbf{f}$  désigneront la partie irrotationnelle des forces, étant entendu que le potentiel des forces rotationnelles est inclus dans la pression.

En particulier, la force de pesanteur  $\rho \mathbf{g}$ , dans un fluide isochore ( $\rho = C^{\text{ste}}$ ), dérive du potentiel  $\rho g z$  (où  $z$  est l'altitude par rapport à une référence qui définit le zéro du potentiel). On utilisera donc dans la suite du mémoire la pression motrice  $p^* = p + \rho g z$  que l'on notera  $p$ , alors que les forces volumiques ne comprendront pas le poids du fluide.

<sup>8</sup> La méthode pour interpoler la vitesse  $\mathbf{u}_e$  interpolée sur la face sera détaillée ultérieurement, puisque nous verrons qu'elle conditionne le traitement de la pression.

Pour d'éventuelles conditions aux limites de pression, il faudra se souvenir que la pression à imposer est la pression motrice, on imposera donc une valeur constante sur une frontière placée dans un fluide au repos, et non une pression augmentant avec la profondeur. En effet, une répartition de pression hydrostatique correspond à une pression motrice constante.

Les forces volumiques non incluses dans la pression sont par contre intégrées cellule par cellule, en multipliant simplement leur valeur calculée au centre de la cellule (assimilée à la moyenne sur toute la cellule) par le volume de cette cellule :

$$Q_i^F = \int_V \mathbf{f} \cdot \mathbf{e}_i \cdot dV \approx \mathbf{f} \cdot \mathbf{e}_i \cdot \Delta\Omega_p$$

[Eq 21]

où  $\Delta\Omega_p$  est le volume de l'élément P. Au plan matriciel, on ajoute ce terme au second membre relatif à l'équation de quantité de mouvement considérée (l'équation pour  $u_i$ ), pour chaque volume de contrôle P :

$$B_P^{U_i} += Q_i^F$$

[Eq 22]

### 3.2.4 Terme instationnaire

Le traitement du terme temporel  $\frac{\partial(\rho\bar{u})}{\partial t}$  est identique à celui de l'équation de transport générique, pour chacune des composantes scalaires des équations de quantité de mouvement. (§ 2.2.5)



## **3.3 Couplage vitesse pression en maillage colocalif**

### **3.3.1 Choix d'un maillage colocalif**

La première version de l'équation de correction de pression présentée par Patankar [1980] optait pour un stockage décalé des composantes de vitesse (stockées sur les faces) par rapport aux pressions et autres inconnues scalaires. Ceci suppose de construire des volumes de contrôle décalés (centrés sur les barycentres des faces principales) pour chaque équation de quantité de mouvement. Cette approche est très efficace quand la composante de vitesse stockée sur chaque face est normale à la face, ou du moins participe fortement au débit dans cette face. Ceci est le cas en maillage structuré, si les composantes de vitesse utilisées sont les composantes contravariantes (ou mieux, les composantes covariantes) dans les coordonnées curvilignes liées au maillage.

Un choix colocalif (stockage des vitesses et pression aux mêmes nœuds) est pourtant plus commode lors de sa mise en œuvre dans le contexte des maillages non structurés. En effet, cela évite la construction de volumes de contrôle annexes, et évite les problèmes de désalignement entre les vitesses et les normales aux faces, qui ont des chances d'apparaître avec un maillage quelconque et des composantes de vitesses liées à des axes fixes (seul choix possible en non structuré).

De surcroît, nous avons opté pour un stockage en matrice creuse, conséquence de la connexité variable par définition de nos maillages non structurés. Un stockage différencié pour la pression et les autres inconnues implique une matrice de résolution différente, ainsi qu'un tableau pression de taille différente des autres inconnues. Cela constitue une difficulté supplémentaire, surtout dans le cadre de l'adaptation de maillages : on augmente d'autant le temps de traitement de l'adaptation.

Aussi, le choix du maillage colocalif, au prix d'une modification de l'ensemble d'algorithmes SIMPLE, semble alors plus approprié. Toutefois, il faut noter que la démarche 'stockage décalé de la pression' existe en non structuré, et qu'une présentation complète en a été faite dans Thomadakis et Leschziner [1996]

La méthode employée dans CliPoo est basée sur les travaux de Muzaferija [1995], largement documentés dans l'ouvrage de Ferziger et Peric [1999]. Bien qu'elle propose un travail en maillage colocalif, elle est conforme au principe de Patankar d'éviter les oscillations en damier de la pression, grâce à un opérateur proposé par Rhie et Chow [1983].

Le choix d'un tel maillage colocalif pose cependant des problèmes spécifiques de couplage vitesse-pression, liés au fait que la pression n'est pas obtenue par résolution d'une équation de transport, mais par le système de correction de pression. Cette problématique est discutée ci-dessous dans un cas simplifié.

### **3.3.2 Discrétisation monodimensionnelle en maillage colocalif**

La discrétisation des équations de continuité et de quantité de mouvement est présentée ci-dessous dans le cas d'un écoulement stationnaire mono dimensionnel d'un fluide de masse volumique  $\rho$  ( $\text{kg.m}^{-3}$ ), sans viscosité, et sur un maillage régulier, et de section  $A$  ( $\text{m}^2$ ). Ce cas très simple fait apparaître les problèmes de couplage vitesse-pression (en particulier une possibilité d'oscillation de la pression), qui se retrouvent en bidimensionnel ou tridimensionnel (on parle alors d'oscillation en damier), et ne sont que peu affectées par la viscosité, les forces volumiques ou les termes instationnaires.

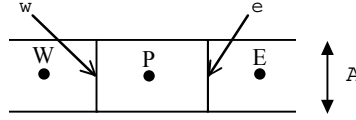


Fig. 24 : Notations pour l'écoulement monodimensionnel

Plaçons-nous dans le cas où toutes les inconnues sont toutes stockées au centre des volumes de contrôle. C'est le choix 'maillage colocalif' qui a été effectué pour les variables vitesse-pression dans *CliPoo*.

Dans l'hypothèse où la densité est constante dans ce domaine (hypothèse de l'écoulement incompressible), l'équation locale de conservation de la masse ( $div(\vec{u}) = 0$ ) s'écrit après discrétisation à l'aide des vitesses sur les faces du volume de contrôle P :

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w = 0 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \dot{m}_e = \rho A u_e \\ \dot{m}_w = \rho A u_w \end{cases} \quad [\text{Eq 23}]$$

Les faces n'étant pas, dans un choix colocalif, des nœuds de calcul, les vitesses  $u_w$  et  $u_e$  sur les faces  $w$  et  $e$  qui délimitent le volume P doivent être interpolées. On emploie ici l'interpolation linéaire suivante :

$$u_w = \frac{1}{2}(u_W + u_P) \quad \text{et} \quad u_e = \frac{1}{2}(u_P + u_E) \quad [\text{Eq 24}]$$

Écrivons maintenant sous forme discrète la conservation de quantité de mouvement (sans viscosité ni force volumique). Pour le volume de contrôle P, en notant  $\dot{m}$  la valeur du débit sur les faces (ces débits sont égaux d'après [Eq 23]) :

$$\dot{m}(u_e - u_w) + \frac{A}{2}(p_e - p_w) = 0 \quad [\text{Eq 25}]$$

Les vitesses sur les faces utilisées dans cette équation ne sont en général pas interpolées de la même manière que les vitesses utilisées pour calculer les débits. En effet, les vitesses  $u_e$  et  $u_w$  apparaissant dans [Eq 25] sont les variables advectées de cette équation, et sont exprimées à l'aide d'un des schémas d'advection défini au chapitre précédent, contrairement aux vitesses utilisées pour la continuité, exprimées à l'aide de l'interpolation linéaire de [Eq 24]. Les pressions sont quant à elles exprimées par interpolation centrée :

$$p_w = \frac{1}{2}(p_W + p_P) \quad \text{et} \quad p_e = \frac{1}{2}(p_P + p_E) \quad [\text{Eq 26}]$$

Si nous adoptons le schéma UDS1 pour les vitesses advectées, en supposant  $\dot{m} > 0$ , l'équation de quantité de mouvement relative au volume P s'écrit sous forme discrète :

$$\dot{m}(u_P - u_W) + \frac{A}{4}(p_E - p_W) = 0 \quad [\text{Eq 27}]$$

Ainsi, pour le volume de contrôle P, l'écriture de la quantité de mouvement ne fait intervenir que les pressions sur deux mailles adjacentes au volume P considéré, et pas la pression au volume P. En fait la pression en P pourrait prendre toute valeur, sans affecter le bilan de quantité de mouvement.

Nous allons illustrer dans ce qui suit, que ce mode d'action de la pression, discrétisée telle quelle, n'est pas acceptable en stockage colocalif.

### 3.3.3 Oscillation en damier

Intéressons-nous à deux volumes de contrôle P et E sur lesquelles nous allons écrire la conservation de la masse :

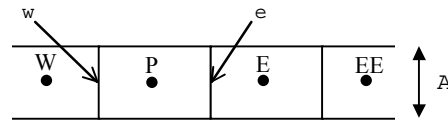


Fig. 25 : notations et volumes de contrôle employés

En écrivant la quantité de mouvement pour les volumes P et E, nous obtenons deux équations du type de [Eq 27], soit

$$\dot{m}(u_P - u_W) + \frac{A}{4}(p_E - p_W) = 0 \quad \text{et} \quad \dot{m}(u_E - u_P) + \frac{A}{4}(p_{EE} - p_P) = 0$$

[Eq 28]

La solution de ces équations, lorsque la force de pression est nulle, est bien sûr un champ de vitesse uniforme  $u_W = u_P = u_E = u_{EE}$ . Par contre, le champ de pression apparaît comme découplé d'une maille sur l'autre, et produira une force de pression nulle même s'il n'est pas uniforme. Ainsi, le champ oscillant de pression de la [Fig. 26] est transparent vu de la conservation de quantité de mouvement :

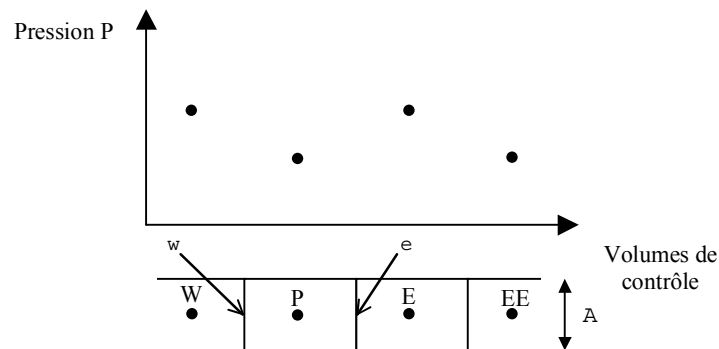


Fig. 26 : champ de pression oscillant

Ce phénomène est à l'origine de l'instabilité de pression "en damier" nommée ainsi d'après son analogue bidimensionnel. La différence de pression entre mailles paires et impaires (ou "blanches" et "noires" d'un damier 2D) peut numériquement s'amplifier ou s'amortir en fonction de plusieurs paramètres comme, par exemple, les conditions aux limites ou le solveur matriciel.

La correction de pression n'a aucun effet d'amortissement sur cette instabilité, puisqu'elle ne réagit qu'aux écarts de débits  $\dot{m}^*$  entre les faces (les débits  $\dot{m}^*$  sont évalués à l'aide des vitesses solution de la quantité de mouvement) ; or ces écarts sont ici nuls puisque le champ de vitesse calculé par la quantité de mouvement est uniforme.

Les premières méthodes à correction de pression [Patankar, 1980] évitaient cet écueil en utilisant un maillage décalé. Les équations de quantité de mouvement étaient écrites sur les faces et réagissaient à un champ de pression tel celui de la [Fig. 26], pour donner des vitesses non uniformes (vitesse plus élevée là où le gradient de pression est favorable, plus faible là où il est adverse). Les débits étant calculés directement avec les vitesses sur les faces, ils étaient eux aussi déséquilibrés, et le système de correction de pression réagit en réduisant l'écart de pression entre nœuds pairs et impairs.

Ainsi, pour éviter cette instabilité en maillage colocalif, il faut que les débits obtenus sur les faces, même avec un champ de vitesse uniforme, soient déséquilibrés.

C'est donc l'interpolation centrée des vitesses [Eq 24] qu'il faut revoir. Il s'agit d'ailleurs de la seule étape qui n'existait pas en maillage décalé. Rhie et Chow [1983] ont les premiers proposé une

interpolation sensible à l'écart de pression entre deux mailles voisines (de sorte que le débit  $\dot{m}_e^*$  dépende de l'écart de pression  $p_E - p_P$ ).

### 3.3.4 Modification de l'interpolation des vitesses

L'idée de base de Rhie et Chow [1983] est de soustraire à la vitesse interpolée de manière centrée [Eq 24], l'influence des gradients de pression utilisés dans la quantité de mouvement ( $p_{EE} - p_P$  et  $p_E - p_W$  dans notre modèle 1D, voir [Eq 28]), pour y ajouter à la place un gradient de pression centré sur la face, de type  $p_E - p_P$ . L'influence du gradient de pression sur la vitesse est tirée de l'équation de quantité de mouvement sous forme discrète, qui s'écrit pour le volume de contrôle P :

$$A_{PP}^{U_i} u_{i,P}^* + \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{U_i} u_{i,L}^* = -(\nabla p_i)_P \partial \Omega_P + Q_{i,P}^*$$

[Eq 29]

où

*l'indice L dénote successivement tous les volumes voisins du volume de contrôle P,  $u_i^*$  désigne la  $i^{\text{ème}}$  composante de la vitesse ( $i=x,y$ , ou  $z$  en 3D)*

*$\partial \Omega_P$  est le volume de l'élément de contrôle P,*

*$(\nabla p_i)_P$  la valeur discrète du gradient évalué pour le volume P dans la direction i,*

*$Q_{i,P}^*$  est le terme source de quantité de mouvement sans le gradient de pression,*

*$A_{PP}^{U_i}$  est le coefficient diagonal du système, situé à la ligne relative à P*

*$A_{PL}^{U_i}$  sont les coefficients hors diagonale de cette même ligne.*

En divisant [Eq 29] par le coefficient diagonal, on peut faire apparaître explicitement l'influence du gradient de pression sur la vitesse :

$$u_{i,P}^* = d_{i,P} (\nabla p)_i + \hat{u}_{i,P} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} d_{i,P} = -\frac{\partial \Omega_P}{A_{PP}^{U_i}} \\ \hat{u}_{i,P} = \frac{1}{A_{PP}^{U_i}} \left[ -\sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{U_i} u_{i,L}^* + Q_{i,P}^* \right] \end{cases}$$

[Eq 30]

où  $\hat{u}_{i,P}$  est homogène à une vitesse et représente la solution de la quantité de mouvement, à laquelle on a soustrait l'influence du gradient de pression.  $d_{i,P}$  est l'influence du gradient de pression sur la vitesse, en  $\text{m.s}^{-1}/\text{Pa.m}^{-1}$ , et peut être considéré comme la dérivée discrète de la vitesse  $u_i$  par rapport au gradient de pression suivant  $u_i$  (dérivée à coefficients constants et valeurs voisines constantes de l'équation discrète linéarisée).

Lorsque le maillage est cartésien (faces de normales parallèles aux axes  $x,y$  ou  $z$ ), l'interpolation de ces "pseudo-vitesses" et de ces coefficients sur les faces :

$$\hat{u}_e = \frac{1}{2} (\hat{u}_P + \hat{u}_E)$$

[Eq 31]

$$d_{i,e} = \frac{1}{2}(d_{i,P} + d_{i,E}) \quad [\text{Eq 32}]$$

permet de faire intervenir le gradient normal de la pression sur la face :

$$\nabla p)_{e,x} = \left( \frac{p_E - p_P}{L_{P,E}} \right) \quad [\text{Eq 33}]$$

$L_{P,E}$  étant la distance entre les barycentres des volumes de contrôle  $P$  et  $E$ .

L'interpolation voulue, faisant intervenir l'influence du gradient de pression local à la place de l'influence des gradients centrés sur les mailles (héritée de la quantité de mouvement par la demi-somme présente dans [Eq 24]), s'écrit alors :

$$u_e^* = \frac{1}{2}(\hat{u}_P + \hat{u}_E) + \frac{1}{2}(d_{x,P} + d_{x,E}) \left( \frac{p_E - p_P}{L_{P,E}} \right) \quad [\text{Eq 34}]$$

Cette forme d'interpolation pour la vitesse  $\mathbf{u}^*$  sur la face  $e$  est lourde, dans la mesure où elle fait intervenir à la fois les vitesses de voisins de  $E$  et celles des voisins de  $P$ , dans la contribution  $\hat{\mathbf{u}}$  (voir [Eq 30]) On peut remplacer la contribution  $\hat{\mathbf{u}}$  par la forme suivante, cohérente avec [Eq 30] :

$$\hat{u}_E = u_E^* - d_{i,E} \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_E \quad \text{et} \quad \hat{u}_P = u_P^* - d_{i,P} \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_P$$

De sorte que l'on propose maintenant une interpolation plus simple pour la vitesse sur la face  $e$  :

$$u_e^* = \frac{1}{2}(u_P^* + u_E^*) + \frac{1}{2}(d_{i,P} + d_{i,E}) \left( \frac{p_E - p_P}{L_{P,E}} \right) - \frac{1}{2} [d_{i,P} \nabla p_i)_P + d_{i,E} \nabla p_i)_E] \quad [\text{Eq 35}]$$

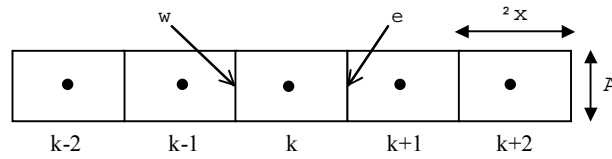
En remplaçant la demi-somme du produit  $d_i \nabla p_i$  par le produit des demi-sommes, on obtient la forme simplifiée suivante :

$$u_e^* \approx \frac{1}{2}(u_P^* + u_E^*) + \frac{1}{2}(d_{i,P} + d_{i,E}) \left\{ \left( \frac{p_E - p_P}{L_{P,E}} \right) - \frac{1}{2} [\nabla p_i)_P + \nabla p_i)_E] \right\} \quad [\text{Eq 36}]$$

Bien que la dernière étape constitue une approximation, l'interpolation [Eq 36] sera celle que nous emploierons pour les équations de quantité de mouvement.

Nous illustrons au paragraphe suivant l'effet de cette interpolation dans le cas monodimensionnel en maillage régulier, déjà utilisé pour présenter l'oscillation en damier du champ de pression.

### 3.3.5 Illustration monodimensionnelle



*Fig. 27 : notations pour le cas monodimensionnel en maillage régulier*

L'équation de conservation de la masse pour le volume de contrôle d'indice  $k$  ([Eq 23]), s'écrit avec l'interpolation proposée [Eq 36] :

$$u_{k+1} - u_{k-1} + \frac{A}{2\dot{m}}(-p_{k-2} + 4p_{k+1} - 6p_k + 4p_{k+1} - p_{k+2}) = 0 \quad [\text{Eq 37}]$$

En divisant [Eq 37] par le pas d'espace  $2\Delta x$  (distance entre  $k-1$  et  $k+1$ ), on obtient

$$\frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^3 A}{4\dot{m}} \left( \frac{p_{k-2} - 4p_{k+1} + 6p_k - 4p_{k+1} + p_{k+2}}{\Delta x} \right) = 0 \quad [\text{Eq 38}]$$

On peut alors reconnaître les deux termes suivants :

$$\begin{aligned} & \frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2\Delta x}, \text{ une dérivée première de la vitesse au volume de contrôle } k, \\ & \left( \frac{-p_{k-2} + 4p_{k+1} - 6p_k + 4p_{k+1} - p_{k+2}}{\Delta x} \right), \text{ une dérivée quatrième de la pression en } k. \\ & \dot{m} / A, \text{ la vitesse débitante.} \end{aligned}$$

Ainsi, [Eq 38] peut se mettre sous la forme équivalente suivante :

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_k + \frac{\Delta x^3}{4u_k} \left( \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \right)_k = 0 \quad [\text{Eq 39}]$$

Avec l'interpolation de vitesses que nous avons proposée, nous pouvons interpréter [Eq 39] comme une forme discrète de l'équation de continuité ([Eq 29]) qui restitue un couplage de la pression d'une maille sur l'autre. Le terme correctif introduit par l'interpolation de Rhie et Chow [1983] s'écrit

$\frac{\Delta x^3}{4u} \frac{\partial^4 p}{\partial x^4}$  sur un maillage monodimensionnel régulier : c'est une dérivée du quatrième ordre de la pression<sup>9</sup>. Ce terme tend vers zéro comme  $\Delta x^3$  lorsque le maillage est raffiné. De plus, dans la mesure où ce terme est d'un ordre supérieur à notre discrétisation de la pression proprement dite, il est envisageable de le multiplier par une constante non nulle sans changer la nature des résultats. Cette propriété a été mise à contribution (cf. « *Annexe pression : Modification du Terme de Couplage* ») pour assurer l'efficacité de l'interpolation.

Nous allons maintenant généraliser cette interpolation pour l'adapter à notre contexte de volumes finis non structurés.

<sup>9</sup> Dans le cas plus général de maillages irréguliers, le terme supplémentaire introduit par l'interpolation de Rhie et Chow pour le débit sur une face devient assimilable à une dérivée d'ordre deux de la pression (différence de dérivées premières), et donne dans l'équation de continuité une dérivée d'ordre trois (différences de débits), multipliée par la taille de maille au carré (pour retrouver une dimension homogène).

### 3.3.6 Généralisation

La généralisation à plusieurs dimensions de l'interpolation de Rhie et Chow [1983] ([Eq 36]) peut être simplifiée à nouveau en séparant la moyenne des  $d_i$  en un produit de la moyenne des volumes par une moyenne des  $1/A_{PP}$ . Cette approximation est cohérente avec une approximation déjà effectuée, et sans grande conséquence puisqu'il s'agit d'un terme correctif en  $\Delta x^3$  et dérivée quatrième de pression.

Nous employons donc, pour calculer les débits sur la face  $e$ , les vitesses suivantes à la place des interpolations centrées de [Eq 23] :

$$u_{i,e}^* = \bar{u}_{i,e}^* - \partial\Omega_e \left( \frac{1}{A_{PP}^{ui}} \right)_e \left[ \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_e - \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_e^{prec} \right] \quad [\text{Eq 40}]$$

où le coefficient  $\left( \frac{1}{A_{PP}^{ui}} \right)_e$  est la moyenne des inverses des termes diagonaux des matrices de quantité de mouvement de l'itération précédente.

Le terme  $\partial\Omega_e$  est un terme de volume, demi-somme des volumes de part et d'autre de la face  $e$ .

Le terme entre crochets correspond aux valeurs obtenues à l'itération précédente, dans la mesure où notre algorithme de résolution étant séquentiel (approche ségrégative), seules sont disponibles les valeurs des pressions de l'itération précédente.

Les deux gradients interpolés sur la face sont calculés de deux manières différentes.

Le premier est calculé sur la face selon [Eq 33]<sup>10</sup>, le second est la composante normale à la face  $e$  de l'interpolation linéaire du gradient des volumes  $P$  et  $E$ .

Il est aisé de montrer que les coefficients diagonaux des équations de quantité de mouvement sont les mêmes pour toutes les composantes  $u_i$ . En notant  $A_{PP}^u$  cette valeur commune, les débits employés dans les différentes équations de transport (et les équations de quantité de mouvement) prennent la forme suivante :

$$\dot{m}_e^* = \rho_e \mathbf{u}_e^* \cdot \mathbf{n} \partial\mathcal{S}_e - \rho_e \partial\mathcal{S}_e \partial\Omega_e \left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)_e \left[ \left( \frac{\partial p}{\partial n} \right)_e - \left( \frac{\partial p}{\partial n} \right)_e^{prec} \right] \quad [\text{Eq 41}]$$

où  $\mathbf{u}_e^*$  est une interpolation linéaire des vitesses sur la face  $e$ , à partir des vitesses obtenues par résolution de la quantité de mouvement aux points  $P$  et  $E$  de part et d'autre de la face,

$\partial\Omega_e$  est la demi-somme des volumes de part et d'autre de la face  $e$ ,

$\partial\mathcal{S}_e$  est la surface de la face  $e$ .

$\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)_e$  est la moyenne des termes  $\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)$  et  $\left( \frac{1}{A_{EE}^u} \right)$

<sup>10</sup> On ne peut assimiler la dérivée de pression calculée selon [Eq 33] à la dérivée de pression normale à la face que si la normale à la face se confond avec la droite [PE]. Dans le cas contraire, on introduit dans le débit un terme supplémentaire de l'ordre de la dérivée de pression le long de la face, ce qui donne dans l'équation de continuité un terme supplémentaire assimilable à une dérivée seconde croisée de la pression, multipliée par la taille de maille.

$\left[ \left( \frac{\partial p}{\partial n} \right)_e - \overline{\left( \frac{\partial p}{\partial n} \right)_e} \right]^{prec}$  est la différence entre la dérivée normale calculée sur la face et interpolée

Les débits modifiés proposés dans [Eq 41] et corrigés par l'étape de correction (§ 3.4) vérifient l'équation de continuité. Les débits bruts obtenus après interpolation des vitesses sur les faces, eux, ne la vérifient pas strictement. Par conséquent, les vitesses (en tant qu'inconnues) non plus ne vérifient strictement pas cette équation. Il faut donc être prudent, lors de la visualisation des champs de vitesses à employer des vitesses corrigées elles aussi, pour obtenir un champ de vitesses à divergence nulle.



### 3.4 Méthodes de correction de pression

Le principe fondamental des méthodes à correction de pression consiste à résoudre itérativement les équations de quantité de mouvement et une (ou plusieurs) équation(s) de correction de pression, qui permet(tent) à la fois de ramener le champ de vitesse à un champ conservatif (à divergence nulle), et de calculer la pression.

Pour éviter de trop s'éloigner d'une solution des équations de quantité de mouvement, et sachant que le degré de liberté du problème couplé est le champ de pression, nous allons dans un premier temps déduire les corrections du champ de vitesses de corrections du champ de pression par une relation dérivée des équations de quantité de mouvement. Ceci permet de ramener le problème de correction de vitesses (pour vérifier la continuité) à un problème de calcul des corrections de pression, cette fois de même nombre que les équations de continuité, pour, ainsi, établir l'équation de correction de pression.

Les équations de quantité de mouvement sous forme discrète prennent la forme suivante :

$$A_{PP}^{u_i} u'_{i,P} + \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{u_i} u'_{i,L} = -(\nabla p)_i \partial \Omega_P + Q_{i,P}^* \quad [\text{Eq 42}]$$

où l'indice  $L$  désigne successivement les éléments voisins de l'élément d'indice  $P$ .

Notons  $p'$  la correction de pression et  $u'_i$  les composantes de la correction de vitesse. En écrivant [Eq 42] avant et après correction, on obtient par différence que les champs corrigés vérifient l'équation de quantité de mouvement si :

$$A_{PP}^{u_i} u'_{i,P} + \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{u_i} u'_{i,L} = -(\nabla p')_i \partial \Omega_P \quad [\text{Eq 43}]$$

*Cette écriture suppose que les variations de pressions n'influent pas sur les coefficients des matrices de quantité de mouvement  $A_{PK}^{u_i}$ , la relation obtenue n'est donc pas strictement une différentielle des équations de quantité de mouvement. Cependant, tenir compte des variations des termes  $A_{PK}^{u_i}$  en fonction des variations de pression introduirait une forte complexité supplémentaire et ne serait cohérent qu'avec un traitement couplé et une linéarisation de type Newton-Raphson des équations de quantité de mouvement.*

ainsi

$$u'_{i,P} = -\frac{1}{A_{PP}^{u_i}} \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{u_i} u'_{i,L} - \frac{1}{A_{PP}^{u_i}} (\nabla p')_i \partial \Omega_P \quad [\text{Eq 44}]$$

Nous constatons ici que les corrections de vitesses sont liées entre elles. Or, pour pouvoir assembler une équation de correction de pression compacte (c'est-à-dire, une équation discrétisée ne faisant intervenir que les voisins directs de l'élément  $P$ ), nous avons besoin de relier algébriquement la correction de vitesse à une correction de pression locale. Les méthodes SIMPLE et SIMPLEC utilisent pour cela deux approximations distinctes de la "correction de voisinage" contenue dans [Eq 44] (1<sup>er</sup> terme du membre de droite). La méthode PISO est sous-itérative (plusieurs corrections de pression et vitesse), chaque étape employant une correction de voisinage évaluée à l'étape précédente.

### 3.4.1 Description de la méthode SIMPLE

La méthode SIMPLE, introduite par Patankar [1980] consiste à négliger les corrections de vitesses des éléments voisins pour estimer la dépendance correction de vitesses – correction de pression. on fait donc l'approximation grossière suivante :

$$\frac{1}{A_{PP}^{u_i}} \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{u_i} u'_{i,L} = 0 \quad [\text{Eq 45}]$$

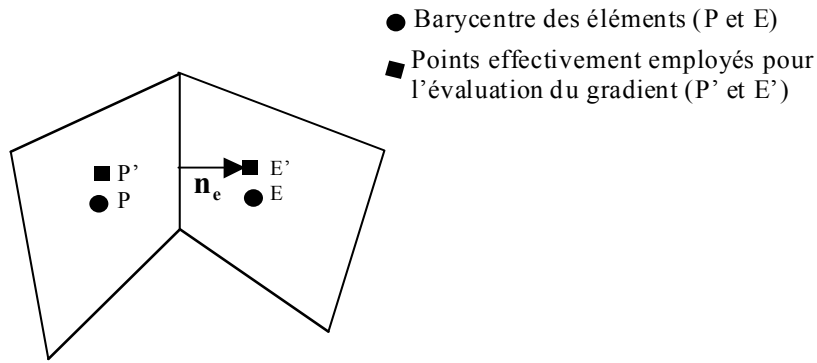
$$u'_{i,P} \approx -\frac{1}{A_P^{u_i}} (\nabla p')_{i,P} \partial \Omega_P \quad [\text{Eq 46}]$$

Cette approximation est brutale d'un point de vue numérique, mais n'est pas dommageable à la qualité des résultats convergés, puisqu'à convergence, les corrections de vitesses sont toutes nulles.

Les coefficients  $A_{PP}^{u_i}$  étant les mêmes pour toutes les directions, on peut par interpolation de l'expression [Eq 46] sur une face, relier la correction de débit sur la face et les corrections de pression de part et d'autre de la face :

$$\dot{m}'_e \approx -\rho_e \partial \mathcal{S}_e \partial \Omega_e \left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)_e \left( \frac{\partial p'}{\partial n} \right)_e \approx -\rho_e \partial \mathcal{S}_e \partial \Omega_e \left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)_e \left[ \frac{p'_{E'} - p'_{P'}}{L_{P,E}} \right] \quad [\text{Eq 47}]$$

Dans [Eq 47], les valeurs des corrections de pression aux nœuds  $P'$  et  $E'$  (cf. [Fig. 28]) ne sont pas disponibles ( $P'$  et  $E'$  n'étant pas les barycentres des éléments  $P$  et  $E$ , en raison de l'écart à l'orthogonalité).



*Fig. 28 : écart à l'orthogonalité ; influence sur le calcul du gradient*

On peut proposer une approximation au premier ordre de la correction de pression pour de l'expression [Eq 47], afin d'exprimer la correction des débits en fonction des nœuds de calcul  $P$  et  $E$  :

$$\dot{m}'_e \approx -\rho_e \partial \mathcal{S}_e \partial \Omega_e \left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right) \left[ \frac{p'_E - p'_P}{L_{P,E}} - \frac{(\nabla p')_E \cdot (r'_E - r_E) - (\nabla p')_P \cdot (r'_P - r_P)}{L_{P,E}} \right] \quad [\text{Eq 48}]$$

Or les gradients de la correction de pression ne sont pas disponibles de manière explicite, et une forme implicite de ces gradients conduirait à une molécule de calcul<sup>11</sup> variable d'un élément à l'autre et particulièrement volumineuse, car impliquant les voisins de  $E$  et les voisins de  $P$ . Nous utilisons donc la méthode SIMPLE en négligeant l'écart à l'orthogonalité :

<sup>11</sup> Par molécule de calcul, on entend nombre d'éléments impliqués pour le calcul d'une grandeur.

$$\dot{m}'_e \approx -\rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e \left[ \frac{p_E - p_P}{L_{P,E}} \right] \quad [\text{Eq 49}]$$

L'équation de continuité, sous forme discrète, peut maintenant être écrite en imposant que la somme des corrections de débits [Eq 47] et les débits calculés selon [Eq 41] sur un volume de contrôle est nul :

$$\sum_{l \in v(P)} (\dot{m}_l^* + \dot{m}'_l) = 0 \quad [\text{Eq 50}]$$

où  $l$  désigne successivement les faces du volume de contrôle  $P$ .

La somme  $\sum_{l \in v(P)} \dot{m}_l^*$  est un résidu de masse à annuler, calculé avec les vitesses issues de la quantité de mouvement.

En reportant [Eq 49] dans [Eq 50], on obtient l'équation de correction de pression, système algébrique d'inconnues  $p'$  qu'on peut assembler face par face selon :

$$A_{PP+} = \rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e \left[ \frac{1}{L_{P,E}} \right], A_{PE-} = \rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e \left[ \frac{1}{L_{P,E}} \right] \quad [\text{Eq 51}]$$

$$A_{EE+} = \rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e \left[ \frac{1}{L_{P,E}} \right], A_{EP-} = \rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e \left[ \frac{1}{L_{P,E}} \right] \quad [\text{Eq 52}]$$

$$B_{P-} = \dot{m}_e \text{ et } B_{E+} = \dot{m}_e \quad [\text{Eq 53}]$$

La résolution de la matrice de corrections de pression donne un champ de correction  $p'$ , qui nous permet, grâce à la relation [Eq 47], de corriger les débits sur les faces du domaine calculé : notons  $\dot{m}$  les débits obtenus en corrigeant les débits  $\dot{m}^*$  :

$$\dot{m}_e = \dot{m}_e^* + \dot{m}'_e \text{ avec } \dot{m}'_e = -\rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_e^{u_i}} \right)} \left[ \frac{p'_E - p'_P}{L_{P,E}} \right]$$

Après cette étape, les débits corrigés vérifient l'équation de continuité sous forme discrète :

$$\sum_{l \in v(P)} \dot{m}_l = 0 \quad [\text{Eq 54}]$$

Ce sont donc ces débits corrigés qui seront mis à contribution par toutes les équations de transport (y compris les équations de quantité de mouvement), de façon à éviter des sources ou puits artificiels qui pourraient être dus à un déséquilibre des flux de convection même avec un champ uniforme de la variable transportée. Dans un cas à convection dominante, ces sources ou puits artificiels provoqueraient de très forts extremums locaux, qui conduisent inévitablement à une divergence du processus itératif dans le cas d'une équation de transport influençant l'écoulement (comme la quantité de mouvement).

Contrairement au cas des maillages décalés, corriger le débit n'est pas équivalent à corriger les vitesses, puisque les débits et les vitesses ne sont pas stockés aux mêmes points. On utilise ici la relation correction de vitesses – correction de pression pour mettre à jour les vitesses<sup>12</sup>, selon [Eq 46] :

$$u_{i,P} = u_{i,P}^* - \frac{1}{A_P^{u_i}} \nabla p'_{i,P} \partial \Omega_P \quad [\text{Eq 55}]$$

Il nous faut maintenant corriger le champ de pression, en utilisant une **sous-relaxation de la pression** : en raison de l'approximation grossière [Eq 45], la méthode SIMPLE est de nature à donner des corrections de pression surestimées. Aussi, n'ajouter qu'une partie de la correction de pression au champ de pression employé pour la résolution des équations de quantité de mouvement permet d'amortir les variations des vitesses. L'équation de correction de pression résolue donne le champ de pression  $p'$ , on n'ajoute qu'une partie  $\alpha$  à la pression<sup>13</sup> :

$$p = p^{\text{prec}} + \alpha_p \cdot p' \quad [\text{Eq 56}]$$

D'une manière générale, on trouve, dans la littérature des coefficients de sous-relaxation pour la pression de l'ordre de 0.3, et de 0.7 pour la vitesse.

À cette étape, nous avons un champ de débits qui vérifie l'équation de continuité, un champ de vitesses modifié par les corrections de pressions que nous avons obtenues et un champ de pression mis à jour qui nous permet d'itérer sur les équations de quantité de mouvement.

**L'algorithme de résolution** complet pour la vitesse et la pression est le suivant :

1. initialiser le champ de pression et les débits
2. Assembler et résoudre les équations de quantité de mouvement, pour obtenir les vitesses  $u_{i,P}^*$ .
3. Calculer les débits  $m^*$ , résoudre l'équation de correction de pression pour obtenir la variable  $p'$ .
4. Mettre à jour les débits pour vérifier l'équation de continuité, et les vitesses au centre des mailles
5. Mettre à jour le champ de pression avec la sous-relaxation  $\alpha_p$  (voir [Eq 56]), et aller à l'étape 2 jusqu'à convergence.

### 3.4.2 Description de la méthode SIMPLEC

La méthode SIMPLE présente une étape brutale lors du passage de [Eq 44] à [Eq 46]. Elle oblitère l'influence des corrections des vitesses voisines sur la correction de la vitesse en P, le volume de contrôle courant. Une méthode alternative, proposée initialement par Van Doormal et Raithby [1984] consiste à tenter d'estimer ce dernier terme au lieu de le supprimer, en supposant que les corrections de vitesse  $u'_L$  dans les cellules voisines sont approximativement égales à  $u'_P$  :

$$\sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{U_i} u'_L \approx u'_P \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^{U_i} \quad [\text{Eq 57}]$$

<sup>12</sup> Cette mise à jour n'est pas indispensable, dans la mesure où seuls les débits doivent vérifier l'équation de continuité. La résolution des équations de quantité de mouvement avec le champ de pression mis à jour et les débits qui vérifient l'équation de continuité modifiera à nouveau les vitesses. Cependant, une première mise à jour des vitesses dans cette étape permet de rapprocher le champ de vitesses de ce qu'il sera lors de la résolution des équations de quantité de mouvement, et faciliter ainsi la résolution matricielle.

<sup>13</sup> On soulignera ici le fait que la sous-relaxation n'intervient que dans l'évolution de la pression de l'itération  $n$  à  $n+1$ , et pas dans la correction des débits : sinon, l'équation de continuité ne serait pas respectée à cette étape.

Cela permet de définir le lien corrections de vitesses – correction de pression suivant :

$$u'_{i,P} \approx - \frac{1}{A_P^u + \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^u} \nabla p'_i \partial \Omega_P$$

[Eq 58]

Le lien correction de vitesses - correction de débit devient :

$$\dot{m}'_e \approx -\rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PX}^u} \right)}_e \left( \frac{\partial p'}{\partial n} \right)_e \approx -\rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PX}^u} \right)}_e \left[ \frac{p'_E - p'_P}{L_{P,E}} \right]$$

[Eq 59]

avec  $\overline{\left( \frac{1}{A_{PX}^u} \right)}_e$ , moyenne de  $\frac{1}{A_{PP}^u + \sum_{L \in V(P)} A_{PL}^u}$  et de  $\frac{1}{A_{EE}^u + \sum_{L \in V(E)} A_{EL}^u}$ .

On assemble ensuite l'équation de correction de pression [Eq 50] selon les mêmes étapes que pour la méthode SIMPLE ([Eq 51], [Eq 52] et [Eq 53]). Seul est modifié le coefficient  $\overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e$  qui intervient dans le terme de couplage.

En raison de la relation plus fine correction de vitesses-corrrections de pression que celle de SIMPLE, **la sous-relaxation de pression n'est pas indispensable**. D'une manière générale, la littérature présente la méthode SIMPLEC comme n'ayant pas besoin de sous-relaxation. Cela est vrai pour les cas qui ne présentent pas un couplage avec d'autres phénomènes physiques comme la convection naturelle : il est souvent nécessaire d'effectuer une sous-relaxation des équations de quantité de mouvement, de la pression ainsi que de l'équation qui ajoute un couplage fort au calcul (notamment l'équation de la thermique pour la convection naturelle).

**L'algorithme de résolution** est identique à celui de SIMPLE.

### 3.4.3 Description de la Méthode PISO

Le couplage 'pression-vitesse' que présente PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) [Issa, 1986], est basé sur un degré plus élevé de l'approximation de la relation entre les corrections de pression et de débits que dans l'approche 'SIMPLE'. La méthode SIMPLE présente deux approximations fortes, qui sont de négliger l'influence des corrections des vitesses voisines [Eq 45] sur la correction de vitesse d'un élément, et, passant de [Eq 48] à [Eq 49], de négliger l'influence de l'écart à l'orthogonalité qui induit un écart (spatial) au nœud de calcul de la correction de pression.

La première étape de l'approche PISO est commune à SIMPLE : dans un premier temps, on effectue l'approximation employée dans l'étape SIMPLE, [Eq 45], pour obtenir une première correction de pression  $p'$  identique à celle de SIMPLE, ainsi que des vitesses  $\mathbf{u}'$  corrigées à l'aide de la relation correction de vitesses- correction de pression simplifiée de SIMPLE ([Eq 46]).

L'idée de base de Issa [1986] est d'introduire les corrections de voisinage dans la correction de débit, bien qu'on les ait négligées lors de l'assemblage de la matrice de correction. Ce faisant, on introduit un nouveau déséquilibre des débits dans chaque maille (lié aux corrections supplémentaires  $\tilde{m}'_{e1}$  ainsi introduites), qu'on peut compenser par une nouvelle correction de pression ( $p''_1$ ) : on appelle ce terme "correction de voisinage".

De plus, disposant d'une première estimation (connue partout) de la correction de pression, il est possible dans la seconde étape de calculer de manière explicite un gradient de  $p'$ , qui servira à calculer le terme de non-orthogonalité de [Eq 48], que nous avons dû négliger dans SIMPLE à défaut d'avoir un gradient de  $p'$ . Ceci conduit à une seconde partie ( $p''_2$ ) de la deuxième correction.

#### *Débit dû au terme de voisinage*

Nous avons dû négliger dans SIMPLE l'influence des corrections de vitesses des volumes  $L$  voisins sur la correction de vitesse des volumes  $P$ , alors que cette influence pouvait se déduire des équations de quantité de mouvement sous la forme :

$$\tilde{u}'_{i,P} = -\frac{1}{A_p^{u_i}} \sum_{L \in V(P)} A_L^{u_i} u'_{i,L} \quad [\text{Eq 60}]$$

en notant  $\tilde{u}'_{i,e}$  son interpolation centrée sur la face courante  $e$ , on peut exprimer le débit supplémentaire sur la face  $e$ , correspondant à la prise en compte de ce terme dans la correction de débit, après résolution du premier système de correction de pression :

$$\tilde{m}'_{e1} = \rho_e \tilde{u}'_{i,e} \cdot \bar{\mathbf{n}} \partial S_e \quad [\text{Eq 61}]$$

#### *Débit dû à l'écart à l'orthogonalité*

Connaissant le champ de correction de pression  $p'$ , on peut calculer son gradient et réintroduire dans l'expression de la correction de débit [Eq 48] la correction qui tient compte de l'écart à l'orthogonalité :

$$\tilde{m}'_{e2} = -\rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \left( \frac{1}{A_e^{u_i}} \right) \left[ (\nabla p')_e \cdot \mathbf{n}_e \partial S_e - \frac{p'_E - p'_P}{L_{P,E}} \right] \quad [\text{Eq 63}]$$

### ***Nouvelle étape de correction***

Les débits supplémentaires présentés ci-dessus induisent, si on les prend en compte sans précautions, un défaut de masse supplémentaire dans chaque maille. Avec le même raisonnement que celui de SIMPLE, nous pouvons chercher à annuler ces nouveaux résidus par une correction de débit  $m''$ , exprimée à partir d'une correction de pression  $p''$  :

$$m_e'' \approx -\rho_e \partial S_e \partial \Omega_e \left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)_e \left[ \frac{p''_E - p''_P}{L_{P,E}} \right]$$

[Eq 62]

Au plan matriciel, seule la relation ci-dessus intervient sur la matrice à inverser, qui est donc identique à celle de SIMPLE. Seul le second membre diffère de celui de SIMPLE : il s'agit de la somme des résidus de masse basée sur les suppléments de débits  $\tilde{m}'_{e1} + \tilde{m}'_{e2}$  définis ci-dessus.

En notant  $p''$  la correction de pression résultante, (somme des deux correction  $p''_1$  et  $p''_2$ ), on peut maintenant écrire l'assemblage du second membre du système matriciel à inverser, pour obtenir  $p''$  :

$$B_{P+} = \tilde{m}'_{1e} + \tilde{m}'_{2e} \quad \text{et} \quad B_{E-} = \tilde{m}'_{1e} + \tilde{m}'_{2e}$$

[Eq 63]

**Nécessité de la sous-relaxation** : comme pour SIMPLEC, le couplage étant plus fin, il n'est généralement pas nécessaire sous relaxer, avec les mêmes réserves que pour SIMPLEC dans les cas où un couplage additionnel existe.

**L'algorithme de résolution** complet pour la vitesse et la pression est le suivant :

1. Choisir un champ de pression  $p^*$  (phase d'initialisation).
2. Résoudre les équations de quantité de mouvement, pour obtenir les vitesses  $u_{i,p}$ .
3. Résoudre l'équation de correction de pression pour obtenir la variable  $p'$ .
4. Mettre à jour les débits pour vérifier l'équation de continuité.
5. Traiter le champ de pression  $p$  obtenu en additionnant  $p^*$  et  $p'$  comme nouveau champ de pression  $p^*$ .
6. Résoudre la deuxième étape de correction de pression pour affiner les champs de pression et de vitesse, tenant compte de la non-orthogonalité et de l'influence des voisins. Cette étape (6) est itérée jusqu'à convergence.
7. Après mise à jour des vitesses et pression, itérer à l'étape 2.

En raison de la prise en compte de l'écart à l'orthogonalité, cette méthode est, par construction, plus adaptée aux maillages irréguliers : nous la privilégierons dans notre optique de raffinement automatique du maillage.

## **3.5 Conditions aux limites**

### **3.5.1 Conditions aux limites pour la pression**

Pour l'équation de correction de pression, les conditions aux limites en pression ont un mode d'application particulier, puisque la variable réelle de l'équation est la correction de pression.

Nous allons donc détailler les modes d'application de ces conditions aux limites, afin de voir comment une condition sur la pression se traduit sur la correction de pression. D'une manière générale, il existe deux grands types de conditions aux limites pour cette inconnue : pression imposée, ou libre.

#### **Pression imposée**

La condition aux limites de pression imposée se traduit, à la frontière, par  $p = p_0$ , où  $p_0$  est la pression spécifiée. Si la pression est connue, la correction de pression est nulle, ce que l'on peut spécifier par une condition aux limites de type Dirichlet nulle pour  $p'$ .

#### **Pression libre**

La condition aux limites de type 'pression libre' correspond à une condition aux limites de Neumann homogène pour la correction de pression : dans la mesure où à une condition libre est associée un condition en vitesse imposée, le débit local sur cette zone est connu et ne doit donc pas être corrigé. Ainsi, la pression doit s'adapter dans cette zone pour respecter cette contrainte.

#### **Remarques d'ordre algébrique**

Dans l'optique de résoudre les systèmes matriciels issus des équations discrétisées de manière itérative, il est important de s'intéresser à la structure des matrices obtenues.

Nous l'avons vu lors dans l'établissement de la correction de pression, les coefficients de la matrice liée au problème sont proportionnels à l'inverse des termes de la matrice employée pour les équations de quantité de mouvement.

Ceux-ci peuvent être très variables dans un même problème en fonction de la géométrie, et de l'écoulement local. Lors de l'application d'une condition aux limites de type pression imposée, soit une condition de type Dirichlet nul pour la correction de pression, nous proposons un coefficient pour que le coefficient relatif au Dirichlet soit cohérent avec la valeur locale de la matrice : l'élément frontière connaissant l'élément auquel il est accolé, il suffit de copier du coefficient diagonal de la matrice relatif à l'élément intérieur dans l'élément frontière.

#### **La nature relative de la pression**

La contribution de la pression, dans les équations de quantité de mouvement, se fait via son gradient local, quel que soit la manière par laquelle elle est discrétisée. Aussi, un champ de pression est défini à une constante près.

Ainsi, il est utile d'imposer une pression de référence si, pour un calcul donné, il n'existe pas de zone à pression imposée. Dans ces cas-là, nous avons opté pour une pression moyenne nulle. Cela peut être aisément imposé en initialisant le calcul avec un champ de pression de moyenne nulle (pondérée par les volumes des éléments), et en ajoutant des champs de correction de pression à moyenne nulle. Dans le cas contraire, on peut voir des variations considérables de la pression moyenne, variations qui dépendent de la méthode de résolution algébrique employée. Cette formulation suppose de manière implicite que la pression moyenne dans le domaine est nulle.

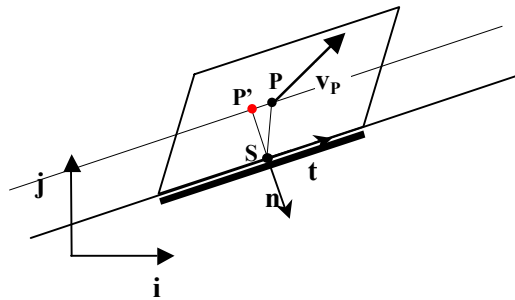
Il est aussi possible de spécifier la pression en un point donné du maillage, pour fournir au système une pression de référence. Dans ce cas, un élément frontière particulier fait l'objet d'une zone à lui seul, zone sur laquelle la valeur de la pression est explicitement spécifiée.



### 3.5.2 Conditions aux limites pour les équations de quantité de mouvement

Les équations de quantité de mouvement, en raison de leur nature vectorielle, peuvent induire un traitement particulier des conditions aux limites. Si les deux grands types de condition aux limites sont identiques à celles du transport de scalaire passif, i.e. la vitesse imposée (Dirichlet) et vitesse libre (Neumann), des frontières non alignées avec les directions des équations impliquent quelques modifications de leur mise en place au niveau algébrique. De plus, nous préférons traiter les conditions aux limites par type pour les équations du mouvement dans leur ensemble plutôt que composante par composante.

Pour détailler ces conditions aux limites, nous nous placerons dans un repère local (repère relatif à l'élément frontière)  $(\mathbf{n}, \mathbf{t})$   $\mathbf{n}$  et  $\mathbf{t}$  étant respectivement le vecteur normal (dirigé vers l'extérieur du domaine) et le vecteur tangentiel à l'élément frontière sur lequel on applique une condition aux limites choisie. Nous verrons que le sens du vecteur tangentiel  $\mathbf{t}$  dépend de la direction de la vitesse locale.



*Fig. 29 : Notations employées pour l'application des conditions aux limites*

#### Entrée de fluide dans le domaine ou paroi imperméable

En entrée, les deux composantes du vecteur vitesse sont spécifiées et pour chacune des composantes, la condition aux limites est de type Dirichlet, présenté en 2.4.1.

Pour une paroi imperméable, en raison de la condition d'adhérence d'un fluide visqueux, la vitesse normale  $v_n$  est nulle et la vitesse tangentielle  $v_t$  est connue (cette condition aux limites a été employée pour le test présenté dans ce chapitre).

La condition d'imperméabilité s'exprime en fait sur les débits et non directement sur les vitesses. L'étape de correction de débit n'est donc pas effectuée pour les éléments frontière

La correction de pression sur les faces frontière n'est donc nécessaire que pour mettre à jour la pression, et pour calculer les gradients de correction de pression lorsqu'on utilise l'algorithme PISO. Comme mentionné ci-dessus, cette correction de pression en frontière obéit à une condition de Neumann homogène sur  $p'$ . La pression obéit donc elle aussi à une condition de Neumann homogène : cela est physiquement cohérent dans le cas d'une paroi (couche limite), comme pour une entrée ou sortie de fluide en écoulement établi.

*Remarque : pour la condition de type entrée de fluide, toutes les inconnues des équations de transport doivent être spécifiées pour que le problème soit bien posé.*

La condition de vitesse tangente imposée (nulle en général, sauf dans le cas d'une paroi glissante) s'exprime à l'aide d'un vecteur tangent  $\mathbf{t}$  dont le sens est déterminé en fonction de la vitesse au point P (avec les notations de la [Fig. 29]) :

$$\vec{t} = \frac{\vec{v}_P - (\vec{v}_P \cdot \vec{n}) \vec{n}}{\| \vec{v}_P - (\vec{v}_P \cdot \vec{n}) \vec{n} \|}$$

[Eq 64]

Les contraintes à la paroi résultent en une force de frottement  $\mathbf{F}_s$  sur l'élément frontière discrétisée comme suit :

$$\vec{F}_s = \int_s \vec{t} \tau_{nt} dS_s \approx (\tau_{nt} \partial S_s) \vec{t}$$

[Eq 65]

où  $\tau_{nt}$  est la contrainte tangentielle à la paroi, définie comme suit :

$$\tau_{nt} = \mu \left( \frac{\partial v_t}{\partial n} \right)_s$$

[Eq 66]

En projetant sur les différents axes, on peut obtenir la forme discrète de cette condition aux limites :

$$F_{Si} = \mu \left( \frac{u_{iP'} - u_{iS}}{L_{P'S}} \right) \partial S_s$$

[Eq 67]

Où

*$L_{P'S}$  est la distance entre  $P'$ , projection du barycentre  $P$  de l'élément voisin sur la normale à la face, et la barycentre  $S$  de l'élément frontière.*

L'écart entre  $P$  et  $P'$  est dû à un écart à l'orthogonalité entre  $\mathbf{PS}$  et le vecteur normal  $\mathbf{n}$ . Le traitement de cet écart à l'orthogonalité est identique à celui présenté en 2.2.2. pour les flux de diffusion de l'équation de transport.

Compte tenu de la présence des éléments frontière, ce calcul de frottement est en fait le même que celui effectué sur une face interne du domaine, à condition d'imposer sur l'élément frontière la vitesse de la paroi (condition de Dirichlet sur chaque composante de vitesse), en s'assurant, si elle n'est pas nulle, que cette vitesse est bien parallèle à chaque face de paroi (pour assurer un débit nul).

### Vitesse libre (en sortie)

On impose un gradient nul pour chacune des composantes de la vitesse ; cela correspondant à une condition de type Neumann homogène pour chacune de ces composantes, présenté en 2.4.2 pour l'équation de transport du scalaire passif. Dans ce cas, pour que le problème soit bien posé, nous avons toujours imposé la pression.

### Symétrie

Pour un plan de symétrie, la vitesse normale est nulle, et la dérivée de la vitesse tangentielle est nulle. Dans un souci de simplicité, nous nous sommes placés dans les cas où l'axe de symétrie est aligné avec un des axes des équations de quantité de mouvement. Ainsi, la condition de symétrie prend la forme d'une condition aux limites de type Dirichlet nul pour la vitesse normale à l'axe de symétrie, et Neumann homogène pour la vitesse tangente. On pourra se référer à Ferziger et al. [1999] pour les situations où l'axe de symétrie n'est pas aligné avec un des axes principaux.

## 3.6 Cas test : cavité entraînée à différents Reynolds

### 3.6.1 Présentation du cas test

Le test de la cavité entraînée (ci-dessous) est un test typique de la mécanique des fluides numériques. Il a été proposé par Ghia et al. [1982].

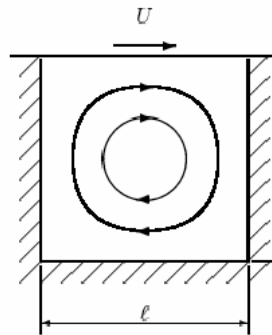
On présente les résultats du test de la cavité entraînée. La paroi supérieure est un mur mobile dont on fait varier la vitesse tangentielle pour faire varier le nombre de Reynolds.

$$Re = \frac{Ul}{\nu}$$

$U$  est la vitesse de défilement du mur supérieur ( $m.s^{-1}$ )

$l$  la taille du domaine carré ( $m$ )

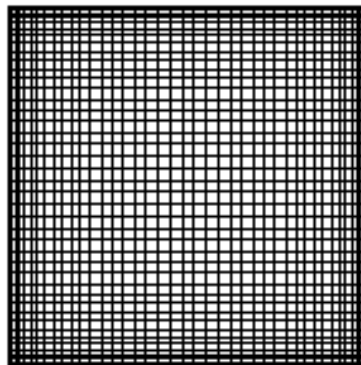
$\nu$  est la viscosité du fluide ( $m^2.s^{-1}$ )



*Fig. 30 : schéma de la cavité entraînée*

Les calculs présentés correspondent à un Reynolds variant de 0.1 à 1000. Le maillage [Fig. 31] comporte 50\*50 mailles rectangulaires de taille variable pour cette série de calculs.

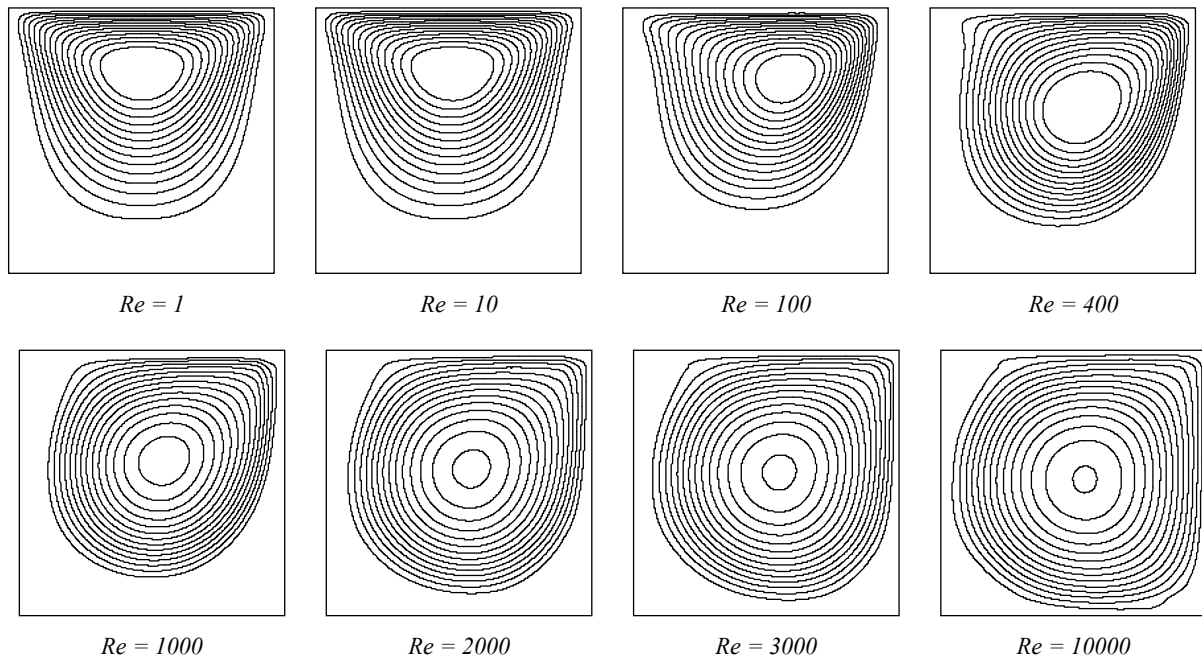
Les conditions aux limites sont partout des conditions de Dirichlet sur la vitesse, et des conditions de pression libre telle que décrit au paragraphe 3.5.



*Fig. 31 : maillage employé : 50\*50 irrégulier*

### 3.6.2 Validation

Le tableau de figures suivant donne l'évolution de la fonction de courant dans ce problème à mesure que le nombre de Reynolds augmente :



*Fig. 32 : Evolution des lignes de courant en fonction du Nombre de Reynolds*

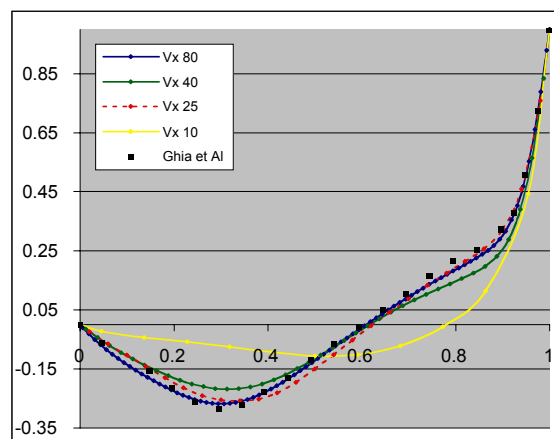
Un nombre de Reynolds de 10000 et une hypothèse laminaire peuvent paraître incompatibles ; cependant, obtenir un calcul convergé avec des nombres de Reynolds élevés est rassurant quant à la robustesse d'un code.

#### Influence de la finesse du maillage.

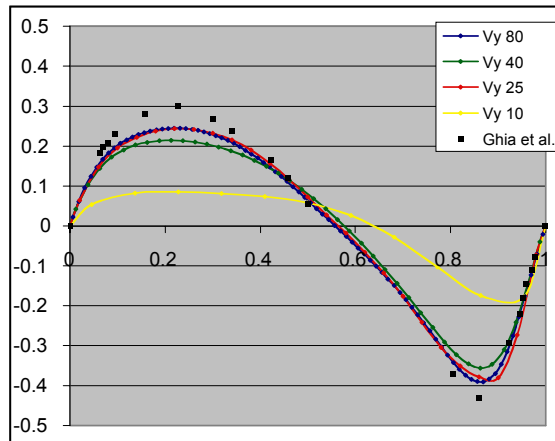
On teste l'influence de la finesse du maillage pour un nombre de Reynolds donné, soit 400. On trace pour cela les profils de vitesse horizontale ( $V_x$ ) à mi-largeur de la cavité ( $X/X_{max}=0.5$ ), et les profils de vitesse verticale ( $V_y$ ) à mi-hauteur ( $Y/Y_{max}=0.5$ ). Les vitesses sont adimensionnalisées par la vitesse  $V_{ref}$  de la paroi supérieure et le nombre de Reynolds est de 400 (l'une des deux valeurs proposées par Ghia et al.[1982]). Les maillages employés sont ici les suivants :

80\*80 régulier (courbes  $V_x$  80 et  $V_y$  80)  
25\*25 régulier (courbes  $V_x$  25 et  $V_y$  25)

40\*40 régulier (courbes  $V_x$  40 et  $V_y$  40)  
10\*10 régulier (courbes  $V_x$  10 et  $V_y$  10)



*Fig. 33:  $V_x/V_{ref}$  de la vitesse à  $X = 0.5X_{max}$  (hauteur  $Y/Y_{max}$  en abscisses)*

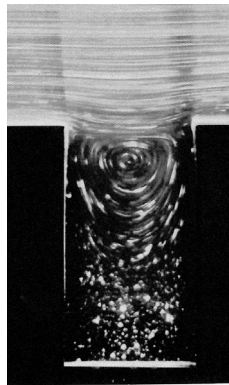


*Fig. 34 :  $V_y/V_{réf}$  de la vitesse à  $Y = 0.5Y_{max}$  (largeur  $X/X_{max}$  en abscisse)*

Les résultats (ci-dessus) montrent que nos valeurs de vitesses horizontales deviennent quasi-identiques à celles de Ghia et al. [1982] quand le maillage est suffisamment fin, alors que ce n'est pas le cas des vitesses verticales. Ce fait étonnant a déjà été mentionné par Thomadakis et al [1996], et montre qu'on peut obtenir des disparités de quelques pourcent entre différentes méthodes, théoriquement équivalentes, appliquées au même problème.

### 3.6.3 Remarque

Bien que ce test soit un grand classique de la mécanique des fluides, il n'a que peu de sens physique. Dans la réalité, il est bien difficile à mettre en place expérimentalement. Cependant, quelques expériences qui présentent des similarités avec ce test ont été mises en place [Fig. 35]. Dans cette série d'expériences, c'est un écoulement au-dessus de la cavité qui induit la recirculation, alors que le test de la cavité entraînée suppose le fluide mis en mouvement par une paroi supérieure mobile (très difficile à réaliser expérimentalement sans problème aux coins).



*Fig. 35 : écoulement rampant (glycérine, traceur : Particules d'Aluminium,  $Re = 0.01$ . Taneda, 1979 d'après 'An Album of Fluid Motion' Van Dyke, Parabolic Press 1982)*

### **3.7 Synthèse**

Nous avons ici présenté les méthodes mises en œuvre pour traiter les écoulements laminares en incompressible, avec le choix d'un stockage colocalisé pour la vitesse et la pression. Après avoir identifié les raisons pour lesquelles ce choix colocalisé était délicat, nous avons présenté la méthode employée pour respecter aussi strictement que possible l'hypothèse d'incompressibilité.

Nous avons vu que le code est relativement robuste, de par sa capacité à traiter les écoulements à nombres de Reynolds élevés. Ces méthodes ont été validées sur un cas classique de la mécanique des fluides numériques, et les résultats sont en accord avec la littérature.



## 4 Thermique et Convection Naturelle

Dans les chapitres qui ont précédé, nous avons présenté l'équation de transport pour un scalaire passif, ainsi que les équations de quantité de mouvement. Nous allons ici présenter l'équation de transport de la chaleur, ainsi que la mise en place du couplage thermique-quantité de mouvement responsable de la convection naturelle.

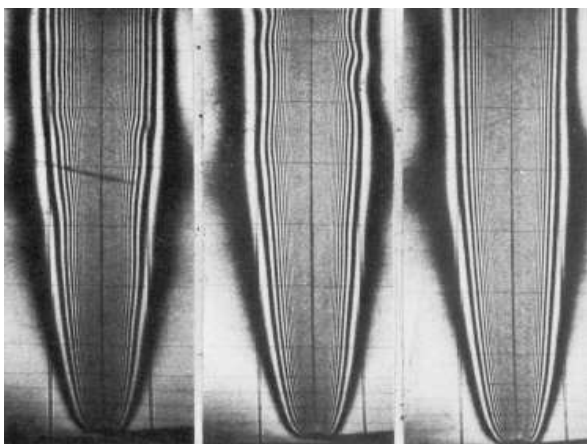


Fig. 36 : Panache laminaire (Gebhard & Dring 1967)  
d'après An Album of Fluid Motion  
Van Dyke, Parabolic Press 1982



## 4.1 Équation de transport de la chaleur

L'équation de transport de la chaleur est une forme d'équation de transport de scalaire passif pour laquelle la variable intensive transportée est la température  $T$  :

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \rho C_p T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S_c$$

[Eq 68]

où

$\rho$  est la masse volumique du fluide ( $\text{kg.m}^{-3}$ )  
 $C_p$  la capacité calorifique du fluide ( $\text{J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$ )  
 $T$  la température locale du fluide (K)  
 $\mathbf{u}$  la vitesse locale du fluide ( $\text{m.s}^{-1}$ )  
 $\lambda$  la conductivité thermique du fluide ( $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )  
 $S_c$  le terme source volumique de chaleur ( $\text{W.m}^{-3}$ ).

Dans l'hypothèse où les propriétés physiques ne varient pas en fonction de la température, nous pouvons réécrire l'équation [Eq 68] sous la forme suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot T) = \alpha \Delta T + s_c$$

[Eq 69]

où

$\alpha = \lambda / \rho C_p$  est la diffusivité thermique du fluide ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )  
 $s_c = S_c / \rho C_p$  est le terme source volumique de chaleur ( $\text{K.s}^{-1}$ ).

Sous cette forme, cette équation de la chaleur prend une forme analogue à celle du transport de scalaire passif. Aussi, dans l'hypothèse où les propriétés physiques ne dépendent pas de la température, nous employons un traitement identique à celle du scalaire passif.

Nous pouvons justifier la simplification que nous avons proposée dans la mesure où nous allons considérer que les seules variations de propriétés physiques (en fonction de la température) que nous allons prendre en compte dans un premier temps concernent la densité du fluide, et que nous allons linéariser cette dépendance dans la partie qui suit.

## 4.2 Thermoconvection - Approximation de Boussinesq

### 4.2.1 Équations

Dans les fluides que le code a pour ambition de traiter, les variations de température induisent des variations de la densité à l'origine de la thermoconvection, ou convection naturelle. Si les variations de température ne sont pas trop importantes, on peut considérer que la densité est constante, sauf dans le terme gravitationnel où ce sont les variations de densité qui constituent le moteur du mouvement. Cette approche constitue l'approximation de Boussinesq.

On considère que la densité ne dépend pas de la pression (ceci est justifié pour des écoulements à faible nombre de Mach) et varie linéairement avec la température (ce qui est justifié tant que les variations de température sont suffisamment faibles), c'est-à-dire qu'on fait le choix de simplifier l'équation d'état du fluide selon :

$$\rho = \rho_0(1 - \beta(T - T_0))$$

[Eq 70]

Où  $\beta$  est la dilatabilité thermique ( $K^{-1}$ ), (ou coefficient de compressibilité à pression constante)  
 $T_0$  une température de référence du fluide (K),  
 $\rho_0$  la densité de référence ( $kg.m^{-3}$ ) à la température  $T_0$   
 $\rho$  la densité locale ( $kg.m^{-3}$ ) à la température  $T$ .

Pour les liquides, l'ordre de grandeur de  $\beta$  est de  $10^{-4} K^{-1}$ . Pour les gaz, cet ordre de grandeur est typiquement dix fois plus élevé.

La force de volume  $\rho \mathbf{g}$  ( $\mathbf{g}$  est le vecteur gravité en  $m.s^{-2}$ ) peut donc être décomposée en une partie indépendante de  $T$ , qu'on regroupe avec le gradient de pression, et une partie proportionnelle à  $(T-T_0)$  qu'on appelle force de flottabilité:

$$-\nabla p + \rho \mathbf{g} = -\nabla(p + \rho_0 \cdot g \cdot z) - \rho_0 \mathbf{g} \beta (T - T_0)$$

[Eq 71]

Où  $z$  est l'altitude par rapport à un niveau de référence quelconque (compté le long d'un axe de même direction et de sens opposé au vecteur gravité, de vecteur unitaire  $\vec{e}_z$ ).

Dans nos hypothèses, le système d'équations à résoudre pour un problème de convection naturelle peut alors se mettre sous la forme suivante :

Équation de continuité

$$\text{div}(\mathbf{u}) = 0$$

[Eq 72]

Équation de Navier-Stokes (équations de quantité de mouvement)

$$\rho_0 \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla(p + \rho_0 g z) + \rho_0 \mathbf{g} \beta (T - T_0) \vec{e}_z + \mu \Delta \vec{u}$$

[Eq 73]

Équation de l'énergie (sous la forme simplifiée)

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla(T) = \alpha \Delta T + s_c$$

[Eq 74]

Des limites pratiques peuvent apparaître dans les cas où l'approximation de Boussinesq est une hypothèse trop forte. Nous ne nous sommes ici intéressés qu'aux cas où l'approximation est valide, ( $\beta$  faibles et gradients de température peu importants). Dans les cas où cette approximation est trop grossière, il peut être nécessaire d'employer des modèles couplés et / ou compressibles. On peut se référer à Galpin et Raithby (1986) pour les cas où le couplage thermique – mécanique des fluides est plus complexe.

## 4.2.2 Traitement numérique

Le terme de Boussinesq apparaît comme un terme source dans les équations de quantité de mouvement. Sa discrétisation est identique à celle du terme source de l'équation de transport. Sa nature vectorielle conduit à l'écrire pour chacun des axes des équations de quantité de mouvement.

En outre, la thermoconvection introduit une action du champ de température sur le champ de vitesse (force de flottabilité, linéaire), qui se combine avec l'action du champ de vitesse sur la thermique (terme d'advection, non linéaire par rapport au vecteur d'inconnues  $u,v,p,T$ ), pour donner un système non linéaire d'équations couplées. Le découplage et la linéarisation introduits par l'approche ségrégative (résolution des équations l'une après l'autre) peuvent être pénalisants pour la convergence dans le cas d'équations fortement couplées par la physique de l'écoulement. Il s'est avéré nécessaire de faire intervenir des paramètres de sous-relaxation, pour limiter les évolutions trop brutales des différentes variables d'une itération à l'autre afin d'éviter la divergence du calcul.

### Algorithme de résolution.

Il faut ici intégrer la résolution de l'équation de la chaleur à l'algorithme global de résolution du problème.

L'équation de la chaleur est résolue immédiatement après la phase de correction de pression, de sorte que les débits vérifient l'équation de continuité. Les températures obtenues après résolution de l'équation de la chaleur servent ensuite de nouveaux champs moteurs des équations de quantité de mouvement. On itère ainsi jusqu'à convergence, puis on passe au pas de temps suivant.

### Modélisation d'écoulements à propriétés physiques variables

À l'exception de la densité, fonction de la température, nous avons considéré les propriétés physiques des fluides comme constantes. Cette approximation est plus ou moins justifiée.

Tenir compte plus finement de la dépendance entre propriétés physiques et variables augmente le degré de couplage du problème, ainsi que son caractère non-linéaire. Nous avons envisagé ce cas de figure, et il est possible, dans ce code, de tenir compte de chaque propriété physique variable en la considérant comme une variable de la simulation : nous avons prévu un vecteur de stockage pour chaque propriété physique dépendante d'une variable. Il nous suffit alors, à chaque itération, de mettre à jour le champ de propriétés physiques en fonction de la variable que nous venons de calculer. Il est envisageable, et parfois nécessaire de sous-relaxer les variations d'une propriété physique, notamment lorsque celles-ci sont importantes. On peut s'attendre, comme à chaque fois qu'intervient une sous-relaxation, à ce que la convergence soit plus longue.

Nous proposons maintenant de valider l'approximation de Boussinesq dans les tests qui suivent.

## 4.3 Cas Test

On s'intéresse à la convection naturelle dans une cavité carrée dont les parois verticales sont maintenues à des températures constantes et différentes. Les parois horizontales sont adiabatiques.

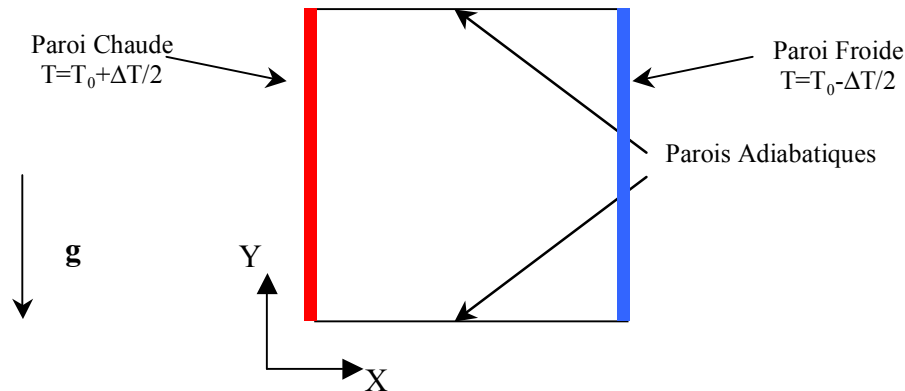


Fig. 37 : Conditions opératoires pour le cas-test

### 4.3.1 La physique de la simulation

Le seul terme moteur dans ce problème est lié à la poussée d'Archimède. Un des nombres caractéristiques de ce type de problème est le nombre (sans dimension) de Rayleigh. Celui-ci est un indicateur du rapport entre la création du mouvement par les forces de flottabilité et sa dissipation par la viscosité et la conduction thermique.

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TH^3}{\alpha\nu}$$

$g$  est la norme du vecteur gravité ( $m^2.s^{-1}$ )

$H$  la hauteur de la cavité (m)

$\alpha$  la diffusivité thermique ( $m^2.s^{-1}$ )

$\nu$  la viscosité du fluide ( $m^2.s^{-1}$ )

$\Delta T$  la différence de température entre paroi chaude et paroi froide (K)

$\beta$  la dilatabilité thermique du fluide ( $K^{-1}$ )

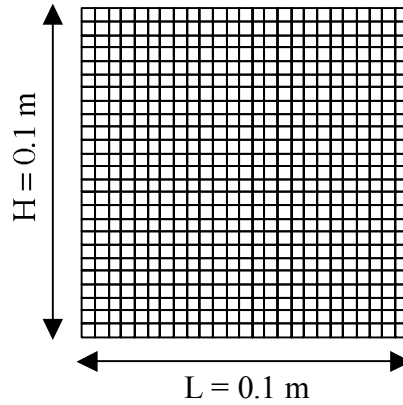
Lorsque ce nombre est faible, les effets diffusifs dominent.

Lorsqu'il augmente, le mouvement s'amplifie et les effets inertiels dans le fluide commencent à apparaître, sous forme de couches limites, d'instabilités puis de turbulence. Nous nous sommes cantonnés ici à des nombres de Rayleigh inférieurs à 150000, gamme dans laquelle l'écoulement est stable et laminaire pour tous les fluides considérés.

Les propriétés du fluide sont ici caractérisées par l'autre nombre sans dimension qui intervient dans ce problème, le nombre de Prandtl, qui mesure le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}$$

Pour des fluides à faible Prandtl (typiquement des métaux liquides) les couches limites dynamiques vont apparaître avant les couches limites thermiques quand on augmente le Rayleigh (on peut avoir un régime thermique diffusif avec un écoulement à couches limites), alors que ce phénomène n'est pas possible pour les fluides à grand nombre de Prandtl (typiquement les huiles).



*Fig. 38 : Choix des dimensions et du maillage (ici 25x25 cellules)*

### 4.3.2 Conditions de la simulation

La température initiale est  $T_0$ , la température pour laquelle la dilatation thermique est nulle. A l'instant  $t=0$ , une différence de température est appliquée entre les deux parois verticales, et on calcule l'évolution du système en instationnaire.

Le temps caractéristique de diffusion thermique  $t^*$  est donné par :

$$t^* = \frac{H^2}{\alpha}$$

En présence de convection, le champ de température s'établit souvent bien avant  $t^*$  du fait de l'échange de chaleur amélioré par la convection. Cependant, dans les cas avec stratification thermique dans le cœur de l'écoulement, l'établissement du champ thermique dans le cœur est en grande partie dû à la diffusion thermique. Nous choisissons donc de simuler l'écoulement systématiquement jusqu'à  $t=t^*$  de façon à obtenir un écoulement stabilisé. Sous forme adimensionnelle, ceci peut s'écrire  $Fo=1$ , où  $Fo$  est le nombre de Fourier :

$$Fo = \frac{\alpha}{H^2} * t$$

Le pas de temps choisi pour la simulation correspond à un centième de ce pas, ce qui permet de décrire de manière réaliste le transitoire de mise en mouvement du fluide.

Les résultats présentés sont ceux obtenus pour les nombres adimensionnels suivants :

Nombre de Prandtl Pr	0.1 ou 1
Gamme de Rayleigh	De 1 à $1.5 \cdot 10^5$

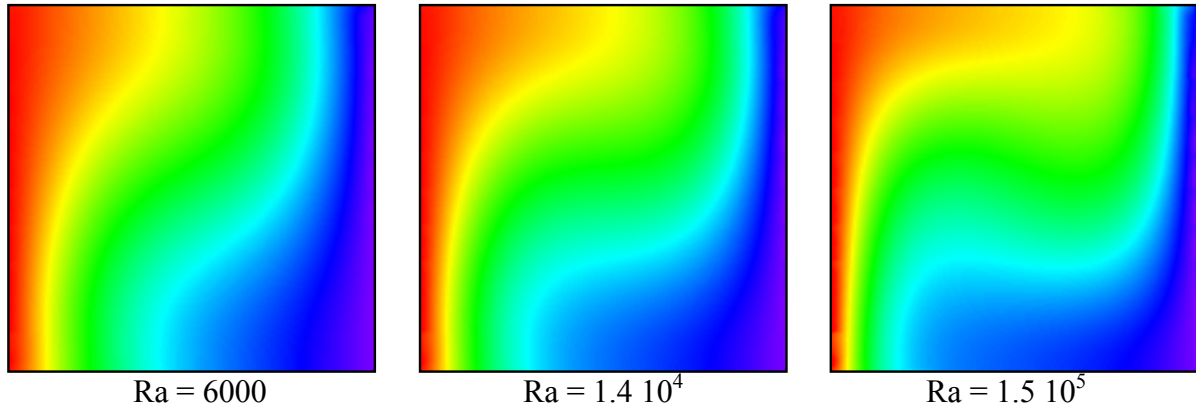
En ce qui concerne les schémas de discrétisation employés, un schéma temporel à trois pas de temps a été employé pour les équations de transport et de quantité de mouvement.

La méthode de correction de pression employée est PISO.

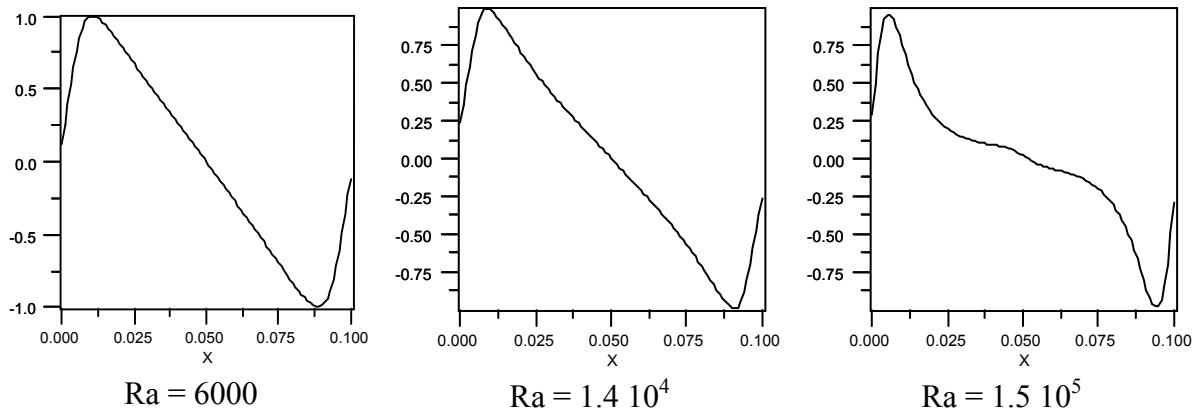
La méthode de discrétisation spatiale employée est le schéma ENO2 pour l'équation de la chaleur et l'équation de quantité de mouvement.

### 4.3.3 Résultats

Les cartes de température tracées [Fig. 39] pour  $Pr=0.1$  montrent que les isothermes se déforment à mesure que la convection prend de plus en plus d'importance. Du profil diffusif pur, elles se déforment jusqu'à présenter une stratification (Rayleigh élevés). Le transfert thermique se fait alors essentiellement par convection, et les couches limites de quantité de mouvement sont alors plus nettes : le centre de la cavité voit des vitesses bien plus faibles que près des parois, comme en témoignent les profils de vitesse verticale tracés sur une droite horizontale à mi-hauteur, représentés sur les figures



*Fig. 39 : Déformation des isothermes en fonction du Nombre de Rayleigh ( $Pr = 0.1$ )*



*Fig. 40 : Evolution de la couche limite de quantité de mouvement ( $Vy/V_{max}$  à  $y = 0.5H$ )*

La convection n'est plus négligeable alors que la stratification se manifeste de manière sensible, pour des nombres de Rayleigh élevés. Le temps caractéristique demeure, pour l'ensemble des calculs, le temps de diffusion thermique entre les parois verticales (à faible  $Ra$ ) ou entre les couches limites horizontales pour installer la stratification (à fort  $Ra$ ). Cela motive, pour un calcul instationnaire, le choix d'un nombre de Fourier basé sur la hauteur et égal à 1 dans notre cas, pour s'assurer du régime établi.

À mesure que le nombre de Rayleigh augmente, les temps de calcul augmentent eux aussi: ceci est dû aux effets convectifs croissants qui demandent de plus en plus d'itérations à l'équation de correction de pression (à mesure que le nombre de Reynolds croît),

Le nombre de Nusselt permet de mesurer le flux de chaleur échangé, sous forme adimensionnelle. On peut ainsi construire un nombre de Nusselt local :

$$Nu = \frac{\left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)}{\left( \frac{T_{chaud} - T_{froid}}{H} \right)}$$

et un nombre de Nusselt global par moyenne des valeurs locales du Nusselt à la paroi (chaude ici) :

$$\overline{Nu} = \frac{\frac{1}{H} \int_{Face} \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right) df}{\left( \frac{T_{chaud} - T_{froid}}{H} \right)}$$

Ce nombre vaut 1 en l'absence de convection naturelle, et augmente lorsque la convection thermique s'ajoute à la diffusion. Il sera employé pour comparer nos résultats à des corrélations de la littérature.

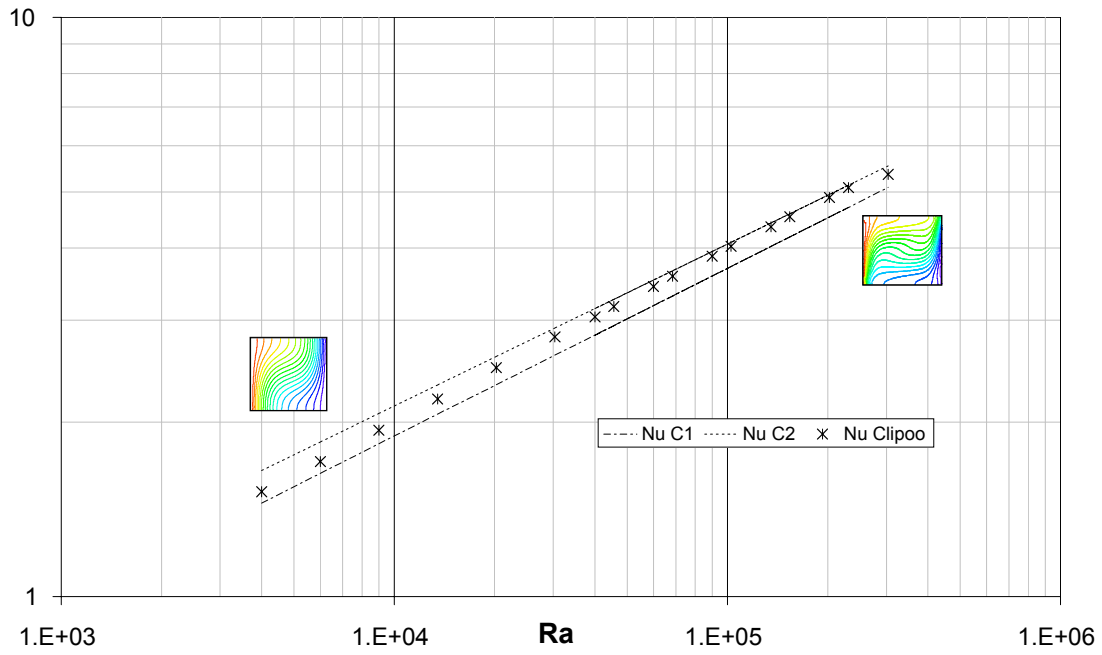
#### 4.3.4 Validation

Une étude d'ordre de grandeur montre que la pente  $\text{Log}(Nu) = f(\text{Log}(Ra))$  est de 1/4 pour les régimes à couche limite, c'est-à-dire dès que le nombre de Rayleigh devient supérieur à une valeur limite (classiquement 500 à 2000) en dessous de laquelle le Nusselt vaut 1 (échange purement diffusif). On trouve dans la littérature, [Incropera, DeWitt, 1996] les corrélations suivantes :

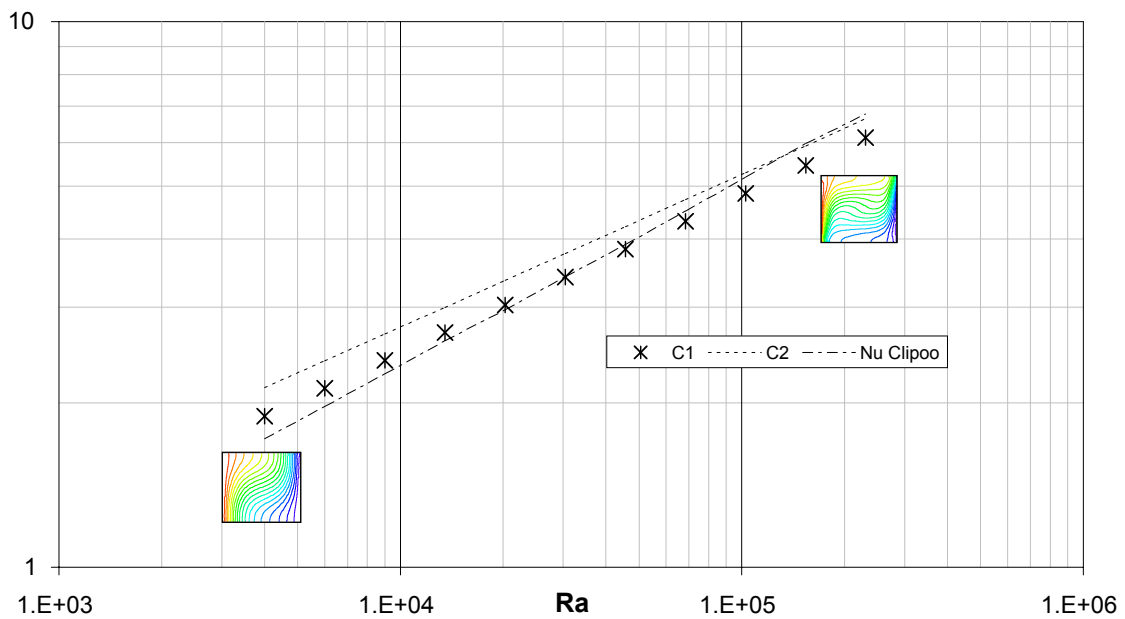
$$Nu_L = 0.18 * \left( \frac{\text{Pr}}{0.2 + \text{Pr}} Ra_L \right)^{0.29} \quad \text{pour} \quad \begin{cases} 1 < H/L < 2 \\ 10^{-3} < \text{Pr} < 10^5 \\ 10^3 < \text{Pr} \cdot Ra_L / (0.2 + \text{Pr}) \end{cases} \quad (\text{C1})$$

$$Nu_L = 0.22 * \left( \frac{\text{Pr}}{0.2 + \text{Pr}} Ra_L \right)^{0.28} \left( \frac{H}{L} \right)^{-1/4} \quad \text{pour} \quad \begin{cases} 2 < H/L < 10 \\ \text{Pr} < 10^5 \\ 10^3 < Ra_L < 10^{10} \end{cases} \quad (\text{C2})$$

Les figures [Fig. 41] et [Fig. 42] présentent les transferts thermiques calculés comparés à ces deux corrélations : (la seconde corrélation **(C2)** est tracée ici à titre indicatif ; elle n'est pas dans le domaine de validité du cas que nous proposons).



*Fig. 41 : Comparaison du calcul avec les corrélations C1 et C2 pour  $Pr = 0.1$*



*Fig. 42 : Comparaison du calcul avec les corrélations C1 et C2 pour  $Pr = 1$*

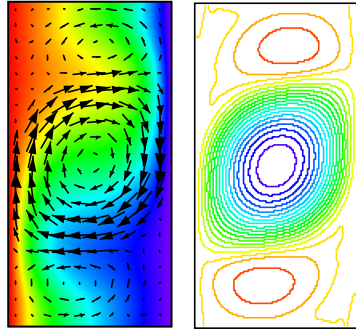
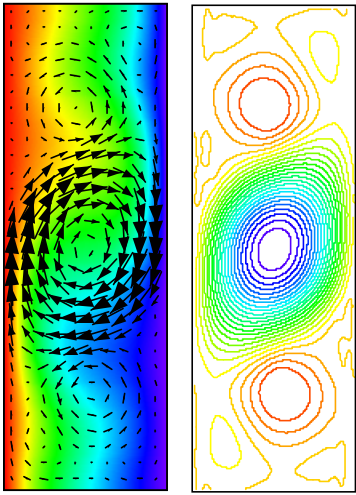
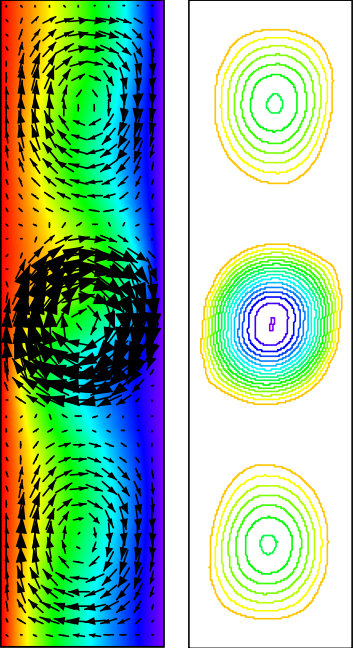
La série de calculs est en bon accord avec les deux corrélations, dans la mesure où l'écart moyen aux deux corrélations est de 3.5 % pour  $Pr = 0.1$ , et de 5,2 % pour  $Pr = 1$ .



### 4.3.5 Quelques tests en cavité élancée : structure de l'écoulement

Par ailleurs, nous avons aussi effectué quelques tests en cavité élancée. Nous avons fait varier le rapport H/L de 2, 3 et 4, ceci afin de nous intéresser à la structure de l'écoulement. La corrélation employée est (C2). Pour ces tests, nous avons employé un maillage régulier en carrés (respectivement 25\*50, 25\*75 et 25\*100). Le critère d'arrêt pour cette série de calculs est la convergence du nombre de Nusselt à la paroi chaude à 1 % près.

Le but de cette série de tests n'est pas tant une vérification des corrélations, mais plus un commentaire qualitatif sur les structures qui se mettent en place. La cohérence des structures a été mise en regard du travail expérimental réalisé par Elder [1965].

Élancement H/L = 2	Élancement H/L = 3	Élancement H/L = 4
 <p><i>Isothermes, et champ de vitesses (gauche)</i> <i>Fonction de courant (droite)</i></p>	 <p><i>Isothermes, et champ de vitesses (gauche)</i> <i>Fonction de courant (droite)</i></p>	 <p><i>Isothermes, et champ de vitesses (gauche)</i> <i>Fonction de courant (droite)</i></p>
<p>Les paramètres de simulation sont les suivants :</p> <p style="text-align: center;"><math>Ra = 8,3 \cdot 10^4</math>, <math>Pr = 0.02</math>.</p> <p>La corrélation (C2) donne <math>Nu = 2,26</math>, et le code donne une valeur <math>Nu = 1.96</math>. Les isothermes sont assez déformées, et on voit ici apparaître trois structures, une cellule centrale et deux de part et d'autre de la cellule principale.</p>	<p>Les paramètres de la simulation sont les suivants :</p> <p style="text-align: center;"><math>Ra = 4,2 \cdot 10^4</math>, <math>Pr = 0.02</math>.</p> <p>La corrélation (C2) donne <math>Nu = 1,68</math>, et le code donne une valeur <math>Nu = 1.62</math>. Les isothermes sont assez déformées. Il y a plus de trois cellules de convection dont les sens s'opposent.</p>	<p>Les paramètres de la simulation sont les suivants :</p> <p style="text-align: center;"><math>Ra = 5208</math>, <math>Pr = 0.02</math>.</p> <p>Le code donne une valeur de 1,16, et la corrélation C2 est en limite de validité. Trois cellules principales sont visibles, les cellules secondaires ont une intensité nettement inférieure.</p>

On peut dans le cas H/L = 2 notamment voir des cellules de convection annexes, qui tournent dans le sens contraire de la cellule principale. C'est là un effet d'entraînement : les cellules secondaires étant dans le sens de rotation opposé à la cellule principale, elles sont freinées par la poussée d'Archimède. Étant moins intenses que la cellule principale, elles sont peu efficaces en termes d'échange de chaleur. Le nombre de Nusselt à Rayleigh équivalent est ainsi plus faible que dans une cavité carrée, chose que la corrélation (C2) prévoit dans le coefficient  $(H/L)^{-1/4}$  qu'elle fait apparaître.

### 4.3.6 Influence de l'ordre de discrétisation

Alors que le caractère intrinsèquement diffusif du schéma d'ordre 1 a été mis en évidence, les calculs en convection naturelle dans une cavité carrée ont donné des résultats très proches en termes de Nusselt pour les schémas d'ordre 1 et d'ordre 2 (ENO2).

Nous avons souligné (au Chapitre 2) que le schéma d'ordre 1 est d'autant moins diffusif que les faces des mailles sont alignées avec l'écoulement local. Ici, c'est globalement le cas, à l'exception de quelques zones (coins du maillage).

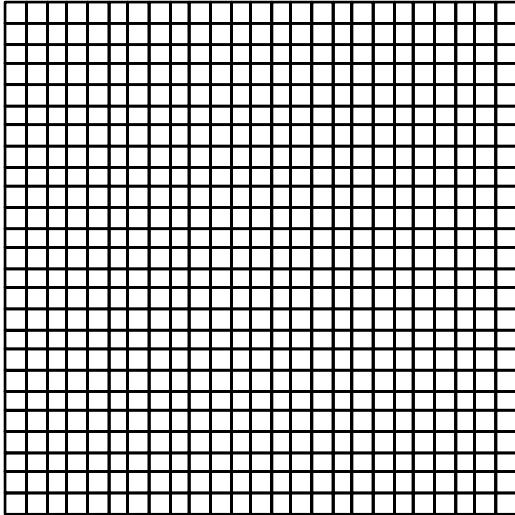


Fig. 43 : maillage employé

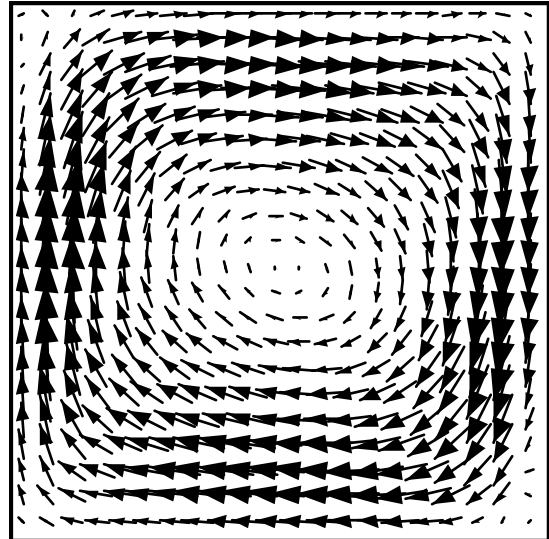


Fig. 44 : Allure du champ de Vitesses pour  $Ra > 10^4$

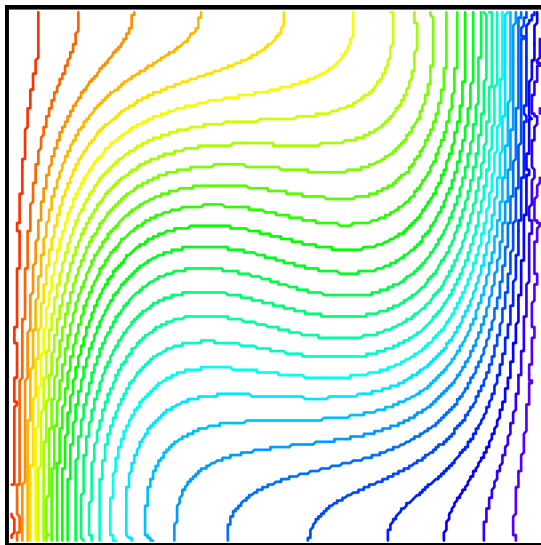


Fig. 45 : Profils de température pour  $Ra > 10^4$

De plus, dans les coins du maillage, où les gradients de température ne sont pas négligeables, les vitesses sont relativement faibles (présence de deux parois à proximité). La diffusion numérique est alors d'autant moins présente que les vitesses convectives sont localement faibles.

Cela contribue à ce que l'ordre de discrétisation influe de manière moins spectaculaire, sur le calcul global du nombre de Nusselt.

## **4.4 Synthèse**

La discrétisation de l'équation de la chaleur procède des mêmes méthodes que celle du scalaire passif présenté au chapitre 2.

Nous avons validé ici la partie thermique et le couplage avec la convection naturelle dans l'approximation de Boussinesq, en constatant la bonne précision de la méthode, sur une gamme de nombre de Prandtl assez large.

Nous allons maintenant mettre à profit l'équation de la chaleur pour considérer le changement de phase du corps pur, en tenant compte de la convection naturelle dans la zone liquide.

## 5 Changement de Phase du Corps Pur

L'objectif de cette partie est de traiter le changement de phase du corps pur (solidification-fusion). Le corps pur a cette caractéristique qu'il change de phase à température constante, et que l'enthalpie fonction de la température varie de manière discontinue. Nous proposons une méthode en mesure de traiter cette discontinuité en tant que telle. D'autres méthodes considèrent le changement de phase du corps pur comme un cas asymptotique du changement de phase d'alliages, employant un intervalle de température dans lequel opère ce changement.

La méthode enthalpique fournit une information relative à la position du front de solidification, dans laquelle la position de l'interface est déterminée a posteriori Crank [1984], et un certain nombre d'auteurs ont étendu cette approche pour prendre en compte les phénomènes de convection dans la zone pâteuse relative au changement de phase des alliages Voller [1980] Bennon [1987] Voller [1987], Rappaz [1989], Morvan [1999].

Nous employons une méthode alternative à celle du changement de phase des alliages, en conservant comme variable principale l'enthalpie, à l'instar de El Ganaoui [1996] El Ganaoui [2000] El Ganaoui et al. [1999], pour, dans notre cas, tenir compte du corps pur en tant que tel.

À travers un cas simple (problème de Stefan), nous verrons que l'évolution temporelle est en bon accord avec la théorie, et qu'il n'y a pas de diffusion du front de solidification. Cela permettra, à l'aide du raffinement de maillage présenté au chapitre suivant, d'obtenir une détermination précise de la forme et de la position de la zone de changement de phase.

Nous verrons aussi que le formalisme proposé peut être vu comme une extension de l'équation de la chaleur, sans compromis sur la résolution de cette dernière.

Dans une deuxième partie, nous ajouterons la convection naturelle à la solidification pour traiter une partie du Benchmark AMETH [Bertrand et al. 1999].

## 5.1 Physique du changement de phase du corps pur

On se propose de traiter le changement de phase du corps pur.

Dans le cas du corps pur, la relation température-enthalpie est la suivante :

$$H = \begin{cases} C_{p_S} \cdot T & \text{si } T < T_F \\ C_{p_S} \cdot T_F + f_L \cdot L_F & \text{si } T = T_F \quad (f_L \in [0,1]) \\ C_{p_S} \cdot T_F + L_F + C_{p_L} \cdot (T - T_F) & \text{si } T > T_F \end{cases}$$

[Eq 75]

Avec :

- $C_{p_S}$  capacité calorifique du solide ( $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ )
- $C_{p_L}$  capacité calorifique du liquide ( $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ )
- $T_F$  température de fusion (unique dans le cas du corps pur) (K)
- $L_F$  chaleur latente de changement de phase ( $J \cdot kg^{-1}$ )
- $f_L$  fraction liquide dans la zone de changement de phase.
- $T$  température locale (K)
- $H$  enthalpie massique locale ( $J \cdot kg^{-1}$ )

Mis sous cette forme, le problème présente une inconnue supplémentaire, la fraction liquide  $f_L$ . De plus l'enthalpie  $H$  n'est pas une fonction de la température (au sens mathématique du terme) en raison de l'indétermination à  $T = T_F$ . Le saut d'enthalpie (Fig 49) est dû au dégagement isotherme de chaleur latente :

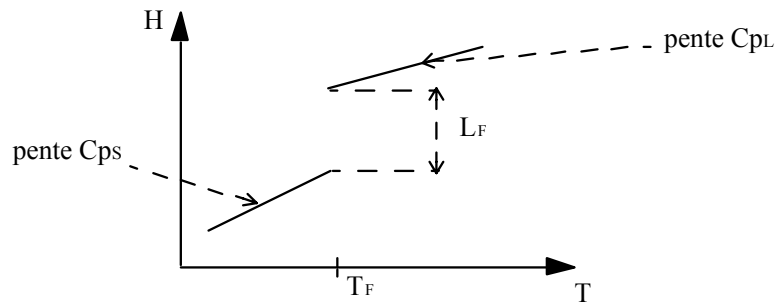


Fig. 46 : Évolution de l'Enthalpie fonction de la Température

L'indétermination due à la fraction liquide  $f_L$  se retrouve ici : pour  $T=T_F$ , on ne peut donner (avec cette courbe) une valeur unique de l'enthalpie. Par contre, en choisissant  $H$  comme variable principale de notre problème, l'indétermination est levée, dans la mesure où  $T(H)$  est une fonction continue [Fig. 47] :

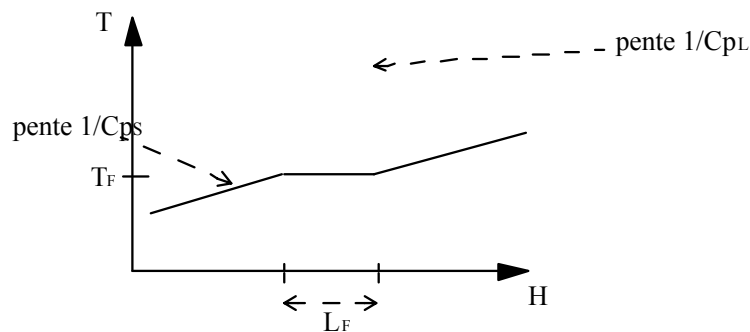


Fig. 47 : Évolution de la Température fonction de l'Enthalpie

## 5.2 Formalisme numérique

Si on veut éviter l'emploi explicite de la fraction liquide, on peut proposer de choisir l'enthalpie comme variable principale. Cela pose d'autres problèmes numériques, que nous évoquerons ici, et que pour lesquels nous proposerons des solutions.

Afin de simplifier le formalisme, nous ferons l'hypothèse que la capacité calorifique du solide et celle du liquide sont identiques.

Cette hypothèse n'est pas très contraignante, et il sera aisé de modifier les équations pour prendre en compte la variation de capacité calorifique lors du changement de phase.

Dans un même souci, et avec les mêmes objections, nous ferons l'hypothèse que les diffusivités thermiques du liquide et du solide sont identiques.

### 5.2.1 L'équation de l'énergie

Formulée en fonction de la température  $T(\mathbf{x},t)$ , l'équation de l'énergie prend la forme qui suit :

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p \mathbf{u} T) = \bar{\nabla} \cdot (k \bar{\nabla} T) + \rho L_F \frac{df_s}{\partial t}$$

[Eq 76]

Où

$k$  est la diffusivité thermique (supposée identique pour le liquide et le solide) ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ )  
 $C_p$  est la capacité calorifique (supposée identique pour le liquide et le solide) ( $J/kg$ )  
 $\rho$  est la masse volumique (supposée identique pour le liquide et le solide) ( $kg/m^3$ )  
 $f_s$  est la fraction solide (égale à  $1-f_l$ )

Dans un souci de lisibilité, nous allons pour l'instant ignorer le terme convectif - déjà traité dans la partie équation de transport. L'équation de l'énergie sans convection devient alors :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \bar{\nabla} \cdot (k \bar{\nabla} T) + \rho L_F \frac{df_s}{\partial t}$$

[Eq 77]

La résolution de cette équation est alors équivalente à la résolution simultanée des deux équations suivantes :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho H}{\partial t} = \bar{\nabla} \cdot (k \bar{\nabla} T) \\ T = f(H) \end{cases}$$

[Eq 78]

Ici, les variations de la variable principale enthalpie ne dépendent explicitement que de la divergence locale de la température : le système algébrique associé prend une forme qui peut s'avérer peu favorable à une résolution aisée, en particulier en raison de l'absence de nature diffusive de la matrice associée.

Le terme de diffusion n'apparaît qu'au second membre du système matriciel (en explicite), et seul un terme temporel apparaît dans la matrice, ce qui risque d'imposer un pas de temps très faible en raison de la forte non-linéarité de la loi  $T(H)$  ([Fig. 47]).

Nous proposons donc, dans ce qui suit, une modification de l'écriture de cette équation de l'énergie, qui, à convergence, demeure équivalente à la forme de celle que nous venons de présenter, mais qui fait réapparaître des termes de diffusion dans la matrice.

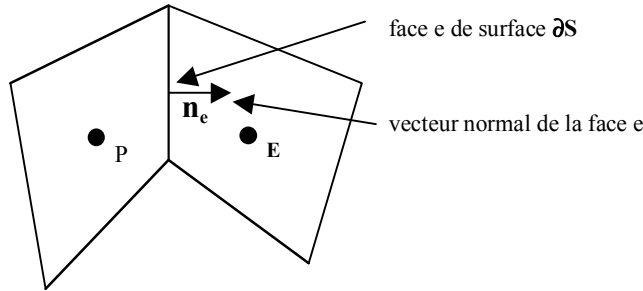
## 5.2.2 Modification de l'écriture de l'équation de l'énergie

Sous forme intégrale, l'équation de l'énergie sans convection devient :

$$\iiint_V \frac{\partial \rho H}{\partial t} dV = \iiint_V \nabla \cdot (k \nabla T) dV \quad [\text{Eq 79}]$$

Que l'on peut aussi écrire, grâce au théorème de Green Gauss :

$$\iiint_V \frac{\partial \rho H}{\partial t} dV = \iint_S k \nabla T \cdot \mathbf{n} dS \quad [\text{Eq 80}]$$



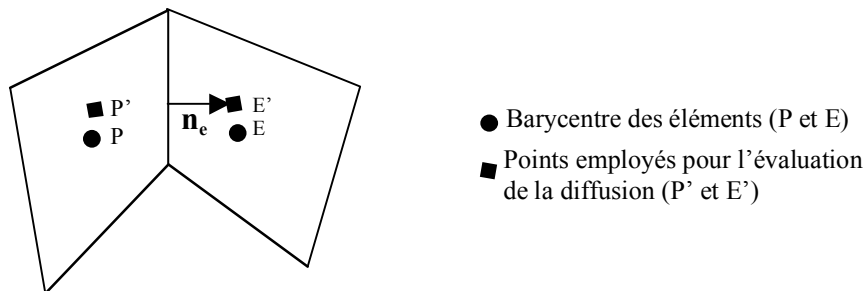
*Fig. 48 : Notations employées*

La discrétisation de cette équation dans la cellule P donne, selon le formalisme volumes finis et avec les notations de la [Fig. 48] (cf. chapitre 2) :

$$\frac{\partial H}{\partial t} \cdot V_P = \sum_{e \in \nu(P)} k_e (\nabla T)_e \cdot \mathbf{n}_e \cdot \partial S_e \approx \sum_{e \in \nu(P)} k_e \frac{T_E - T_P}{L_{PE}} \partial S_e \quad [\text{Eq 81}]$$

Les valeurs de la température  $T_E$  et  $T_P$  (de part et d'autre de la face) sont celles de l'itération précédente, en raison de la dépendance  $T(H)$ .

Dans le cas général d'une face non orthogonale au bipoint P,E, on ajoute une correction de non-orthogonalité calculée à partir des températures de l'itération précédente. La figure [Fig. 49] donne l'écart entre les points d'estimation de la dérivée et les barycentres des cellules.



*Fig. 49 : Ecart entre les points d'estimation de la dérivée et les barycentres des cellules*

De manière analogue à la correction des termes de non-orthogonalité du Chapitre 2, on effectue une correction explicite du second membre de l'équation [Eq 81] : le terme  $\sum_{e \in \nu(P)} k_e \frac{T_E - T_P}{L_{PE}} \partial S_e$  doit, en

toute rigueur, être remplacé par  $\sum_{e \in \nu(P)} k_e \frac{T_E - T_{P'}}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e$ . Pour obtenir les valeurs de la température aux points E' et P', nous emploierons donc l'approximation suivante :

$$\begin{cases} T_{P'} = T_P + (\nabla T)_P \cdot (\overrightarrow{PP'}) \\ T_E = T_E + (\nabla T)_E \cdot (\overrightarrow{EE'}) \end{cases}$$

[Eq 82]

On pourra se référer au Chapitre 2 pour la correction de l'écart à l'orthogonalité.

Dans ce qui suit, nous supposons, dans le souci d'alléger les notations, qu'il n'y a pas d'écart à l'orthogonalité.

Nous proposons d'employer la variable annexe  $\Theta = H/Cp$ , homogène à une température, que l'on peut voir comme une enthalpie réduite. Alors, l'équation de l'énergie discrète s'écrit :

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} \cdot V_P = \sum_{e \in \nu(P)} \alpha \frac{T_E - T_P}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e$$

[Eq 83]

où  $\alpha = k/(\rho Cp)$  est la diffusivité thermique ( $m^2.s^{-1}$ )

Nous pourrions souligner le fait que, en l'absence de changement de phase, cette écriture est non seulement équivalente à l'équation de la chaleur, mais surtout directement exploitable pour résoudre celle-ci, puisque  $\Theta$  et T la température sont alors strictement identiques.

Nous allons maintenant modifier l'écriture de l'équation de l'énergie pour qu'elle adopte une forme plus favorable lors de la résolution matricielle.

Nous allons augmenter artificiellement la nature diffusive de la matrice associée, et compenser - exactement - cette modification dans la partie explicite :

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} \cdot V_P \left[ \sum_{e \in \nu(P)} \alpha \frac{\Theta_E - \Theta_P}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e \right]^{n+1} = \sum_{e \in \nu(P)} \alpha \frac{T_E^n - T_P^n}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e \left[ \sum_{e \in \nu(P)} \alpha \frac{\Theta_E - \Theta_P}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e \right]^n$$

[Eq 84]

Où

*Les exposants  $n+1$  et  $n$  dénotent respectivement l'itération courante, et l'itération précédente de la boucle d'itérations permettant de résoudre la non-linéarité d'un pas de temps.*

À convergence de ce pas de temps, les termes du second membre et de la matrice en (respectivement  $\left[ \sum_{e \in \nu(P)} \alpha \frac{\Theta_E - \Theta_P}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e \right]^n$  et  $\sum_S \lambda \frac{\Theta_E - \Theta_P}{L_{PE}} \partial \mathcal{S}_e$ ) se compensent exactement.

De plus, nous avons ainsi modifié la matrice à inverser de manière à favoriser la résolution algébrique. Sans ce terme additionnel, et en l'absence de convection, la seule contribution à la matrice serait le terme instationnaire, (qui est d'autant plus faible que le pas de temps croît), ce qui pourrait nuire aux qualités de convergence.

**Remarque :** Cette approche implique aussi une résolution fortement itérative (il faut, à chaque itération, corriger la température avec l'enthalpie obtenue).

Cependant, cette condition s'est avérée peu pénalisante en termes de temps de calcul machine, puisque les termes d'advection de la thermique, et les équations du mouvement (chapitre 3) imposent un tel processus fortement itératif. Enfin, cette approche n'impose plus de pas de temps particulier.



Ce formalisme peut être vu comme une extension de l'équation de la chaleur. En effet, dans le cas où il n'y a pas de changement de phase à prendre en compte, la chaleur latente  $L_F$  disparaît de l'équation qui lie  $H$  et  $T$ , et  $\Theta$  et  $T$  prennent alors des valeurs identiques. L'équation [Eq 84] voit alors son second membre s'annuler, et on retrouve l'équation de la chaleur sous sa forme discrète.

Ainsi, l'emploi de la variable  $\Theta$  que nous avons appelée enthalpie réduite permet de traiter indifféremment les problèmes avec et sans changement de phase.

## 5.3 Application : Problème de Stefan.

Le cas considéré est un choc thermique à la surface d'un liquide (c'est un des rares cas où il existe une solution analytique à un problème de solidification). Ici, il s'agit du gel à la surface d'un réservoir d'eau.

### 5.3.1 Conditions de calcul et solution analytique

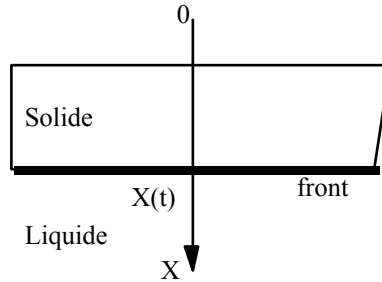


Fig. 50 : Géométrie du problème de Stefan

Le domaine est un carré de 10 Centimètres de côté ; les parois sont toutes adiabatiques, sauf celle où la température est imposée. Pour l'eau, les valeurs numériques employées sont les suivantes :

$$\begin{aligned} T_F &= 0^\circ\text{C}, T_0 = -20^\circ\text{C}, T_i = 10^\circ\text{C}, \\ \alpha &= 1,4 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \\ \rho &= 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \\ C_P &= 4180 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1} \\ L_F &= 3,3 \cdot 10^5 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \\ \Theta_0 &= L_F / C_P = 79^\circ\text{C} \end{aligned}$$

Où

$T_i$  est la température initiale du réservoir d'eau,  
 $T_0$  est la température imposée pour le choc thermique (condition aux limites en  $X=0$ )

Une solution analytique de l'évolution de la position du front de solidification en fonction du temps existe, et peut se mettre sous la forme :

$$X(t) = 2\mu\sqrt{\alpha t} \quad [\text{Eq 85}]$$

où  $\mu$  est une constante régie par l'équation algébrique suivante [Bianchi et al. 2003]:

$$\sqrt{\pi}\mu e^{\mu^2} = \left\{ \frac{T_F - T_0}{\Theta_0 \operatorname{erf}(\mu)} - \frac{T_i - T_F}{\Theta_0 \operatorname{erfc}(\mu)} \right\} \quad [\text{Eq 86}]$$

La valeur de  $\mu$  dépend alors de deux paramètres sans dimension,

- Le nombre de Stefan  $St$  défini comme suit :

$$St = \frac{C_P(T_F - T_0)}{L_F} = \frac{T_F - T_0}{\Theta_0} \quad [\text{Eq 87}]$$

- et le paramètre caractérisant la surchauffe du réservoir  $\frac{T_i - T_0}{T_F - T_0}$ .

Le nombre de Stefan vaut, dans le cas présenté 0,13. Dans la limite des faibles nombres de Stefan, on peut effectuer le développement limité suivant pour  $\mu$  :

$$\mu = \sqrt{\frac{St}{2}} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{T_i - T_F}{T_F - T_0} St + \dots$$

[Eq 88]

Avec les données numériques du problème, une solution approchée au problème de Stefan est la suivante :

$$X(t) \approx 0,6\sqrt{\alpha t}$$

### 5.3.2 Paramètres de résolution

Le maillage employé comprend 50\*3 cellules carrées.

Pour ce type de simulation (changement de phase), un temps caractéristique est le temps pour lequel le produit Stefan\*Fourier vaut 1 [Bianchi et al. 2003]:

$$Ste * Fo = \frac{Cp * \Delta T}{Lf} * \frac{\alpha t}{l^2}$$

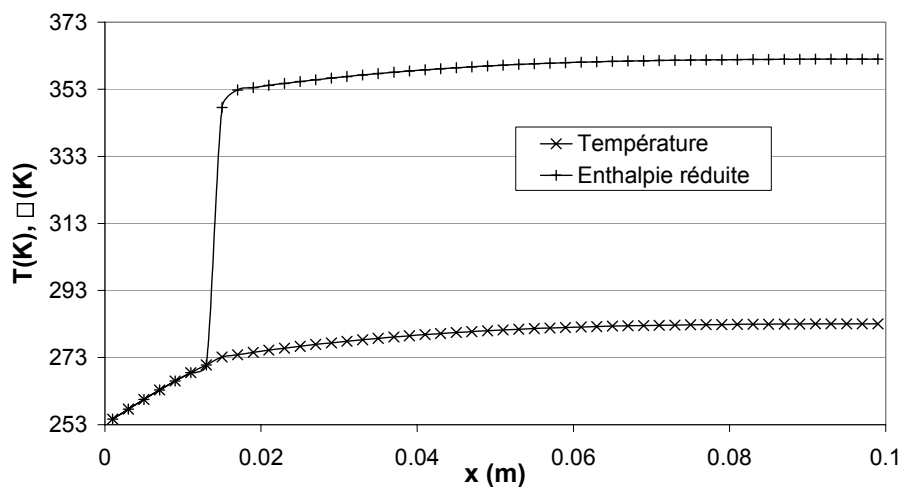
soit

$$t = \frac{l^2 * Lf}{Cp * \Delta T * \alpha}$$

Avec les valeurs du problème, ce temps caractéristique vaut 189 000 s. On choisit de simuler un temps (physique) de 10 000 s, avec un pas de temps de 50 s. Avec cette durée de simulation, le produit Ste \* Fo vaut 0.0529.

### 5.3.3 Résultats

On présente ici des profils caractéristiques de la température et de l'enthalpie pour un temps donné. Par exemple, pour  $t=4000s$ , les profils de température et d'enthalpie sont les suivants :

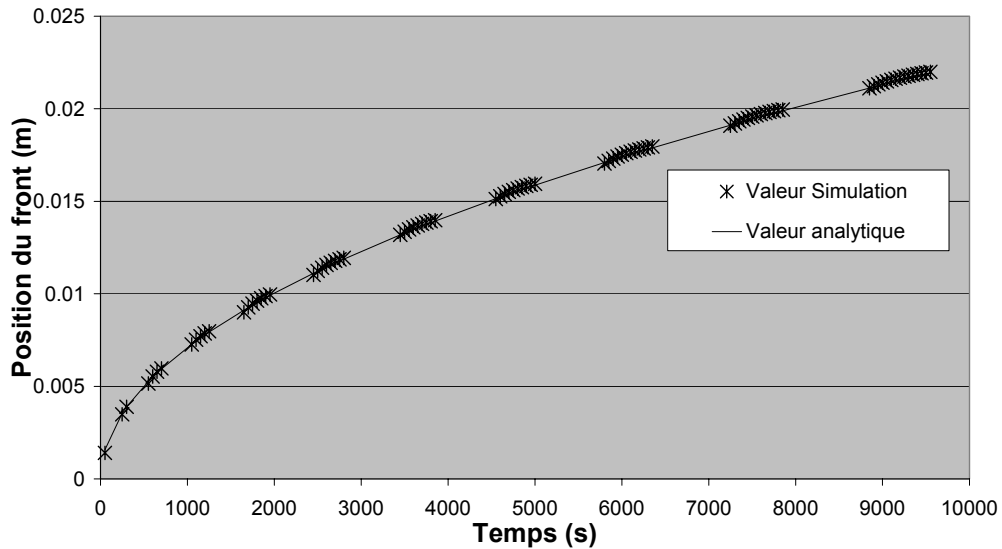


*Fig. 51 : Profils de température et d'enthalpie réduite à  $t = 4000s$*

Chaque point représente un nœud de calcul : on constate qu'il n'y a pas de diffusion du front de solidification sur plusieurs mailles. D'une manière générale, le front de solidification est toujours

confiné dans une maille ou moins. Ainsi, le saut d'enthalpie est toujours capturé dans une maille ou moins, et pourra être capturé aussi finement que souhaité grâce à un maillage de finesse adéquate.

Chaque maille contenant une valeur discrète de l'enthalpie, on extrait les mailles dont les valeurs de l'enthalpie bornent la valeur médiane de l'enthalpie ; la position du front est alors interpolée entre les deux barycentres de ces deux éléments. On reconstruit alors, de façon continue la position de l'interface, pour comparer nos résultats à la solution analytique :



*Fig. 52 : Position de l'interface, Validation avec la solution analytique*

L'évolution de la position du front calculée par la simulation est en excellent accord avec la solution analytique, et sans aucune dérive, même dans le cas d'un temps de calcul long.

## 5.4 Solidification et convection

Dans la partie précédente, nous avons considéré le changement de phase sans convection. Nous allons maintenant ajouter la convection naturelle à un problème de solidification. La solidification est toujours traitée avec la méthode enthalpique que nous avons présentée. La convection de l'enthalpie est traitée de manière identique à celle du scalaire passif (voir Chapitre 2).

Le modèle est testé sur un cas test (le "benchmark AMETH") ayant fait l'objet d'une série de publications [Bertrand et al. 1999]. Nous comparerons donc les résultats du code développé et ceux du Benchmark. Nous nous servirons des résultats de cette partie comme résultats de référence pour le cas de raffinement automatique de maillage présenté au chapitre suivant.

### 5.4.1 Discrétisation

Pour les équations de quantité de mouvement, nous avons employé les discrétisations suivantes :

Schéma de convection d'ordre 2 avec limiteur (DDL2-ENO2) présenté dans le chap.2.

Schéma de diffusion présenté dans le Chap.2.

Pour l'équation de correction de pression, nous avons employé la correction de pression PISO présentée au Chap.3. L'équation de l'énergie est résolue en employant la méthode enthalpique présentée au début de ce chapitre.

Le schéma temporel employé pour les équations de quantité de mouvement, comme pour la méthode enthalpique est un schéma du second ordre à trois pas de temps (§2.2.5)

En raison de la présence d'une zone solide, il est nécessaire d'introduire un couplage supplémentaire entre la méthode enthalpique et les équations de quantité de mouvement. Le premier couplage est dû à la convection naturelle, qui est traitée de la manière présentée dans le Chap.4, le champ de température contribuant au terme source des équations de quantité de mouvement. Nous allons voir maintenant le couplage spécifique dû à la prise en compte du solide dans le domaine.

### 5.4.2 Couplage entre équations de quantité de mouvement et méthode enthalpique

Le changement de phase du matériau est entièrement piloté par la méthode enthalpique.

Pour imposer la vitesse du matériau dans le solide, nous employons un terme de freinage dans les équations de quantité de mouvement. Classiquement, ce terme de freinage est une force volumique  $-B.u$ , où  $u$  est la vitesse locale et  $B$  un coefficient lié à la fraction liquide locale  $f_l$ . Nous employons pour  $B$  la relation de Carman-Koseny pour les milieux poreux constitués par les alliages en cours de solidification [Bertrand et al. 1999], qui a l'avantage d'être continue entre des bornes raisonnables pour  $f_l = 0$  ou 1, même si nos mailles partiellement remplies de liquide n'ont rien à voir avec un milieu poreux :

$$B(f_l) = \frac{C * (1 - f_l)^2}{f_l^3 + \varepsilon}$$

où  $C = 1.6.10^6$  et  $\varepsilon = 10^{-3}$ .

Dans la méthode enthalpique que nous avons présentée, la fraction liquide n'est pas une variable définie explicitement. Nous pouvons l'obtenir avec la valeur de l'enthalpie (notre variable principale) comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{si } H < H_S & f_L = 0 \\ \text{si } H_S < H < H_L & f_L = \frac{H - H_S}{H_L - H_S} \\ \text{si } H > H_L & f_L = 1 \end{array} \right. \text{ où } \begin{array}{l} H_S = Cp.T_F \\ H_L = Cp.T_F + L_F \end{array}$$

*Remarque : afin d'éviter un test triple pour chaque élément et pour chaque équation de quantité de mouvement, on peut proposer la fonction suivante, qui regroupe l'ensemble des trois conditions précédentes :*

$$f_i = 1/2 + (|H - H_S| - |H - H_L|) / (2 * L_F)$$

Sous forme matricielle, introduire ce freinage revient à ajouter le coefficient B(f<sub>i</sub>) sur la diagonale relative à l'élément courant d'indice P.

## 5.5 Le Benchmark Ameth

### 5.5.1 Présentation du problème

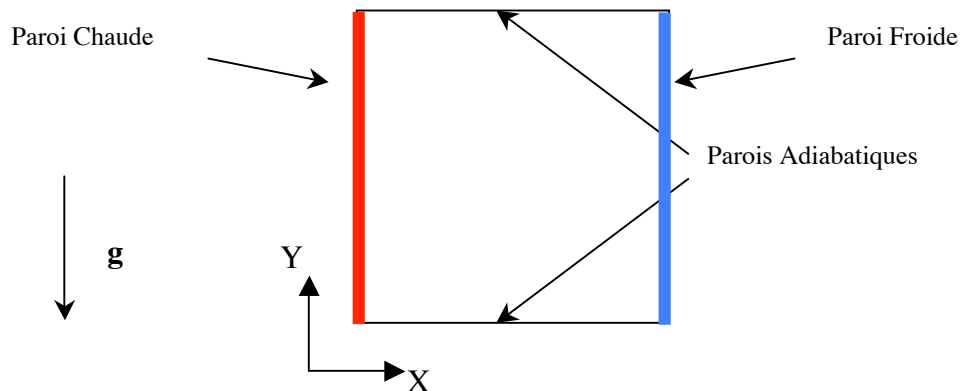
On se propose d'étudier l'évolution temporelle de la fusion d'un corps pur dans une enceinte bidimensionnelle carrée soumise à une différence de température imposée entre les deux parois verticales, alors que les parois horizontales sont adiabatiques.

Cette configuration a été largement présentée et étudiée dans Jany & Bejan [1988] pour les analyses d'ordre de grandeur, en présentant les régimes variés que peut connaître le domaine, par Bénard et al [1985], Gadgil et Gobin [1984] pour les aspects numériques et expérimentaux, et constitue dans son principe le Benchmark Ameth dont des résultats ont été présentés dans Bertrand et al [1999].

Les hypothèses de travail sont les suivantes : les substances sont considérées pures et de propriétés thermophysiques constantes (y compris lors du changement de phase). La convection est supposée laminaire et bidimensionnelle.

Les deux matériaux de référence pour le benchmark AMETH sont l'étain et l'octadécane (que nous appellerons paraffine par la suite, bien que ce nom commun soit moins précis). Ils ont été choisis pour leurs valeurs très différentes du nombre de Prandtl. On rappelle que le Prandtl mesure le rapport de deux diffusivités, la viscosité du fluide et la diffusivité thermique du fluide. Le Prandtl vaut 0.02 pour l'étain et 50 pour la paraffine. On s'attend donc, pour ce problème gouverné par la convection naturelle et la diffusion thermique, à observer des évolutions sensiblement différentes lors de la fusion des deux matériaux.

Les dimensions de la cavité sont de 10 cm\*10 cm, la gravité est selon l'axe Y. En ce qui concerne les équations de quantité de mouvement, les parois sont des murs sans glissement, (vitesse nulle). Pour la thermique, il s'agit de frontières à température imposée ou à flux nul



*Fig. 53 : Conditions aux limites pour le benchmark AMETH*

Le matériau (Etain ou Paraffine) est initialement à température de fusion, et à  $t = 0$  s, on porte une des deux parois verticales à une température supérieure à la température de fusion, l'autre étant maintenue à la température initiale. Les parois horizontales demeurent adiabatiques tout au long de la simulation.

Le maillage employé est un maillage régulier de 30x30 mailles carrées, et les propriétés thermophysiques sont présentées ci-dessous :

Propriété / paramètre	Étain 1	Étain 2
k (W.m.K <sup>-1</sup> )	60	
Cp (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	200	
Masse volumique ρ (kg.m <sup>-3</sup> )	7500	
Alpha (m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	4.10 <sup>-5</sup>	
Nu (m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	8.10 <sup>-7</sup>	
Prandlt Pr = Nu/Alpha	0.02	
Chaleur Latente de Fusion Lf (J.kg <sup>-1</sup> )	6.10 <sup>4</sup>	
Température de Fusion T <sub>F</sub> (°C)	232	
Écart de température Delta T (°C)	3	0.3
Nombre de Stefan	0.01	0.001
Coeff. de dilatation thermique β (K <sup>-1</sup> )	8/3.10 <sup>-4</sup>	
Hauteur (et largeur) de la cavité H (m)	0.10	
Gravité g (m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	10	
Nombre de Grasshof	1.25.10 <sup>7</sup>	1.25 10 <sup>6</sup>
Nombre de Rayleigh	2.5.10 <sup>5</sup>	2.5 10 <sup>4</sup>

### 5.5.2 Résultats : Étain à Ra = 25000 (cas Étain#1)

Nous présentons ci-dessous la loi de Nusselt (flux de chaleur extrait de la paroi chaude, sous forme adimensionnelle), en fonction du produit Ste\*Fo (temps adimensionnel). Nos résultats seront comparés aux résultats numériques présentés par Bertrand et al [1999], à la solution analytique du problème de Stefan (notée "Conduction" dans les figures de Bertrand et al [1999], et à une corrélation pour le cas couplé fusion + convection, présentée dans le même article (notée "corrélation" sur les figures)

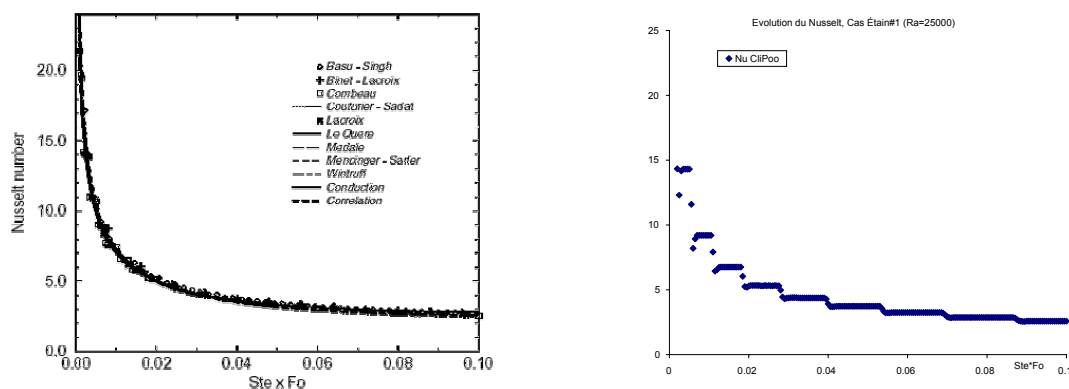


Fig. 54 : Évolution du Nusselt en fonction du Ste\*Fo, cas étain#1 (Bertrand et al. à gauche, CliPoo à droite)

Ce cas est très proche du cas de fusion sans convection. On constate une évolution du nombre de Nusselt en escalier, qui correspond au passage du front d'une maille sur l'autre. Ce caractère fortement discontinu est amorti à mesure que l'on raffine le maillage. La figure suivante illustre les résultats du même calcul, avec un maillage deux fois plus fin :



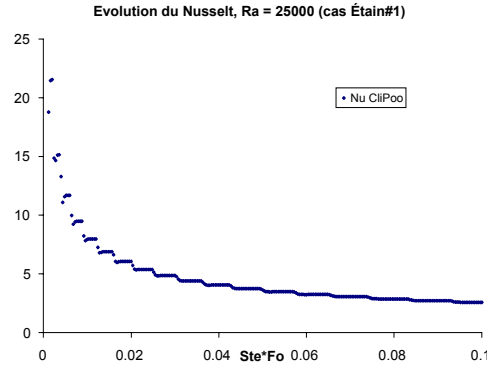


Fig. 55 : Évolution du Nusselt en fonction du  $Ste*Fo$ , cas étain#1

Pour ce nombre de Rayleigh assez faible (25000), la convection naturelle n’influe que très peu le déroulement de la fusion. Les courbes de fusion pure et de fusion avec convection sont quasiment confondues. Effectivement, le front de solidification est très proche de celui du cas de fusion pure (front vertical).

### 5.5.3 Résultats : Étain à $Ra = 250000$ (cas Étain#2)

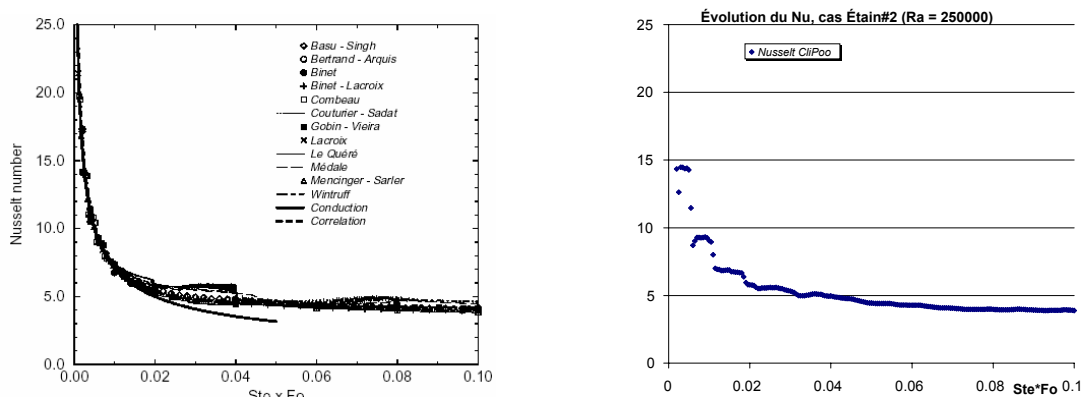


Fig. 56 : Évolution du Nusselt ( $SteFo$  de 0. à 0.1) Cas étain#2  
(Bertrand et al. à gauche, CliPoo à droite)

Ici, l’influence de la convection naturelle sur le déroulement de la fusion est plus sensible. La courbe Nusselt en fonction du temps (adimensionnalisé ici, en produit Stefan\*Fourier) décroît moins vite que la corrélation fusion pure (courbe pleine sur la figure de gauche) : ainsi, grâce à la convection naturelle, les échanges thermiques entre les deux parois sont plus importants. Les évolutions du Nusselt en fonction du  $Ste*Fo$  de CliPoo sont assez proches des courbes numériques des contributeurs du Benchmark AMETH,

On retrouve une évolution par paliers, caractéristiques de notre méthode enthalpique, et correspondant au passage du front de solidification d’une maille sur l’autre : un raffinement de maillage est ici intéressant pour atténuer cette évolution en escalier du nombre de Nusselt.

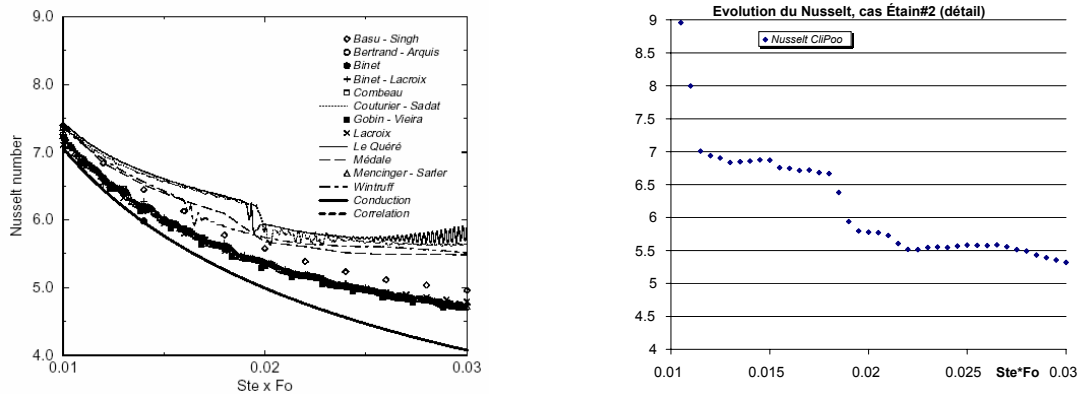


Fig. 57 : Détail de l'évolution du Nusselt ( $SteFo$  de 0.01 à 0.03) Cas étain#2 (Bertrand et al. à gauche, CliPoo à droite)

Cette évolution fortement discontinue du nombre de Nusselt en fonction du  $Ste*Fo$  est particulièrement visible sur le détail de la figure ci-dessus, en raison du maillage grossier que nous avons employé. Cependant, l'évolution du Nusselt à long terme semble cohérente avec celle des autres calculs, ce qui montre que le manque de raffinement du maillage n'introduit pas de dérive particulière.

Dans le benchmark AMETH, pour la simulation étain#2, deux grandes catégories de calculs peuvent être distinguées. La première met en évidence plusieurs cellules de convection naturelle, et la seconde une seule ([Fig. 58]). L'apparition d'une ou de plusieurs cellules a une incidence forte sur la forme que prend, le front de solidification au bout d'un certain temps : dans les cas à une seule cellule de convection, le front est plus régulier que dans les cas à plusieurs.

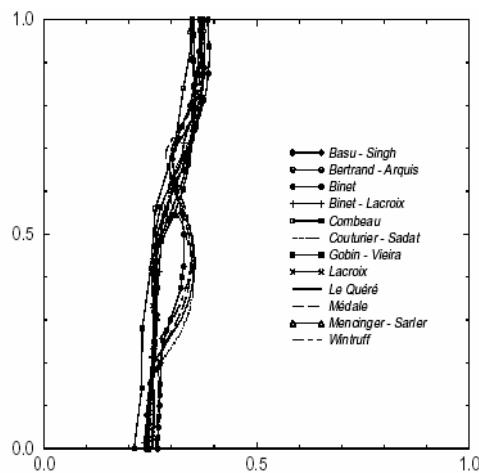


Fig. 58 : Positions comparées du front de solidification à  $Ste*Fo = 0.04$ , cas étain #2 [Bertrand et al. 1999]

La forme de notre front [Fig. 59] montre, à l'évidence, que nous avons plus d'une de ces cellules, ce que confirme le champ de vitesses du cas Étain#2 pour ce temps caractéristique choisi (Fig. 60).

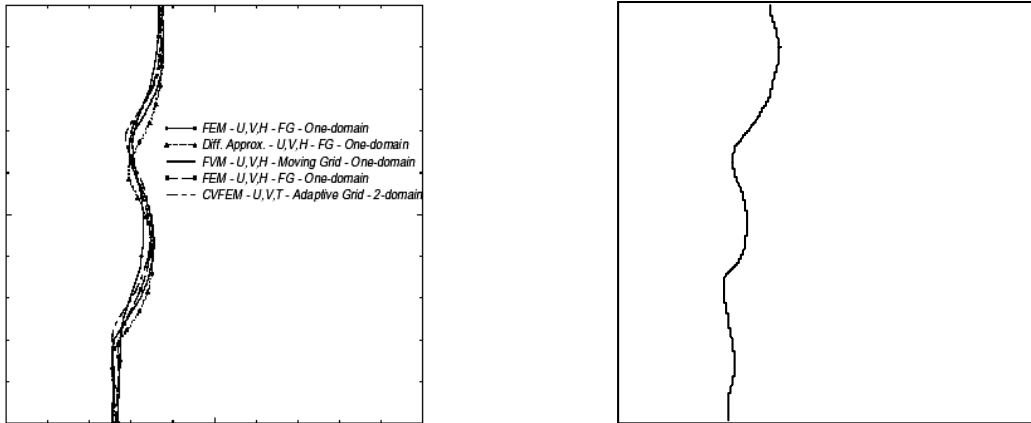


Fig. 59 : Positions comparées du front de solidification à  $Ste*Fo = 0.04$ , cas étain#2 (Bertrand et al. à gauche, CliPoo à droite)

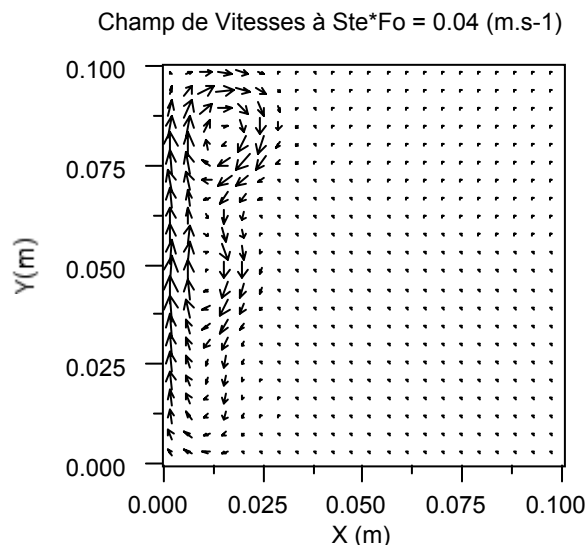
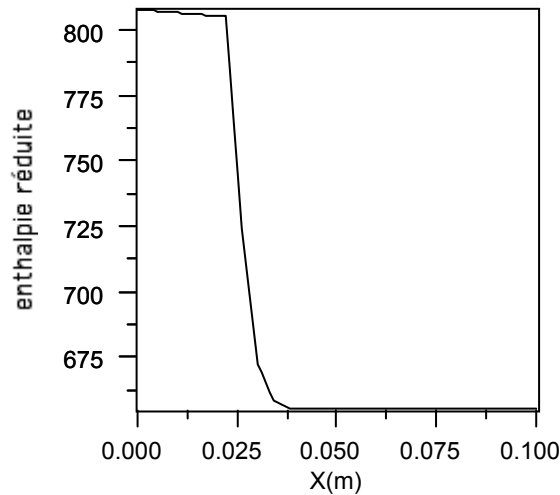


Fig. 60 : Champ de vitesses à  $Ste*Fo = 0.04$  ( $V_{max} \sim 4\text{mm/s}$ ) (maillage  $30*30$ )

Dans les calculs Étain#2 que nous avons menés, nous avons constaté une mise en place systématique de plusieurs cellules de convection. Ce phénomène est cohérent avec la structure d'écoulement rencontré en convection naturelle dans une enceinte élancée, plusieurs cellules se mettant en place, de diamètre de l'ordre de grandeur de la plus petite dimension. Ici, la partie fluide étant nettement plus étroite que haute, la situation est analogue à celle d'un écoulement en convection naturelle une cavité élancée, que nous avons évoquée à titre qualitatif (voir **Quelques tests en cavité élancée : structure de l'écoulement**). Ensuite, la fusion progressant, la largeur fluide se rapproche de l'ordre de grandeur de la hauteur, et les cellules peuvent fusionner pour ne plus donner qu'une seule cellule.

En ce qui concerne la répartition de l'enthalpie, nous pouvons constater, comme dans le cas de convection, que le saut d'enthalpie du corps pur est confiné dans une maille ou deux. La figure ci-dessous est un profil d'enthalpie à  $Ste*Fo = 0.04$ , pour  $Y = 0,05$  m :



*Fig. 61 : Profil d'enthalpie réduite ( $h = H/Cp$ ) pour  $Y=0.05m$ ,  $Ste*Fo = 0.04$ , cas étain#2*

En ordonnée, l'enthalpie réduite est la valeur de l'enthalpie divisée par la capacité calorifique du matériau (ici l'étain). La rupture de pente dans le saut d'enthalpie indique qu'une maille se trouve, dans une zone intermédiaire solide-liquide.

## 5.6 Synthèse

Nous avons proposé dans cette partie une méthode pour traiter le changement de phase du corps pur, qui peut être vue comme une extension du traitement de l'équation de chaleur.

Dans le traitement du front de solidification, nous avons vu qu'elle possède un bon pouvoir prédictif au niveau temporel, et qu'elle confine l'interface dans une maille. Cela est cohérent avec un changement de phase d'un corps pur.

Nous avons présenté et testé le changement de phase avec et sans convection.

Nous avons constaté une évolution fortement discontinue du nombre de Nusselt en fonction du temps. Ce caractère discontinu, qui correspond au passage du front de solidification d'une maille sur l'autre, est d'autant plus faible que la finesse du maillage est importante. Aussi, nous pouvons espérer tirer un grand bénéfice d'un raffinement automatique du maillage.



## 6 Raffinement Automatique de Maillages

Les parties précédentes ayant décrit les différentes méthodes choisies pour notre code en volumes finis non structurés, nous allons présenter les choix effectués pour le raffinement automatique de maillages près d'interfaces.

Notre approche est d'employer la level-set function décrite par Sethian [1996] [2000], qui nous permettra de déterminer la distance signée à l'interface, en tous points du domaine. Nous verrons que cette fonction distance permettra ensuite d'effectuer un découpage continu des mailles, pour effectuer un raffinement en couches limites.

Nous présenterons ensuite la manière par laquelle nous générons les nouveaux éléments, ceux-ci étant de forme arbitraire, et nous discuterons des implications de cette méthode dans un code de mécanique des fluides.

## 6.1 Détermination de la distance à l'Interface

### 6.1.1 La fonction niveau - 'level-set function'

Les level-set functions sont des fonctions qui ont pour but de donner la distance à une interface, en tous points d'un domaine.

Elles trouvent des applications très diverses, dans des domaines parfois très différents de la mécanique des fluides. On trouvera dans Sethian [1996][2000] des exemples concernant le suivi d'interfaces dans les fluides bien sûr, la combustion, la solidification dendritique, les dépôts et attaques chimiques dans la fabrication de semi-conducteurs, les algorithmes de minimisation de trajectoire (application robotiques typiques du problème du voyageur), la segmentation d'images en imagerie médicale, la propagation d'ondes sismiques, et bien d'autres.

Toutes les possibilités (bien vastes) de cette famille de fonctions n'ont pas été employées ici, dans la mesure où les besoins que nous en avons sont plus modestes que ce qu'elles permettent.

La level-set function a été ici mise à contribution sous une forme élémentaire, c'est-à-dire en employant une de ses principales propriétés, qui est d'être une fonction distance. Nous avons besoin de connaître les iso-distances à une interface, à un moment donné de la simulation, c'est-à-dire dans un état donné du problème. Aussi, il ne nous est pas nécessaire de prendre ici en compte un quelconque aspect instationnaire.

### 6.1.2 Problématique

L'objectif de cette première partie est de déterminer les zones qui feront l'objet d'une adaptation de maillage. Cette phase est préliminaire à l'adaptation proprement dite des mailles.

Elle est nécessaire en cela qu'elle permettra de construire un champ d'inconnue (distance signée), et d'effectuer un découpage continu des mailles, en particulier près de l'interface.

Connaître cette distance à un instant donné de notre simulation permet d'effectuer un raffinement du maillage, dans des zones pertinentes, et, nous le verrons, de manière anisotrope.

En outre, comme la level set function (que nous noterons  $\Phi$ ) donne une distance signée à l'interface, il est envisageable d'employer des maillages assez différents de part et d'autre de la frontière  $\Phi_0$ , afin de prendre en compte de manière différente (et plus appropriée) les couches limites de part et d'autre du front.

Par exemple, une couche limite de diffusion (domaine solide) pourra être traitée différemment d'une couche limite de convection (domaine liquide).

Ainsi, en connaissant la répartition discrète du champ distance et étant donné que son gradient est connu en norme (de norme 1 par construction), il est possible de déterminer la position de toute iso valeur de la fonction, c'est-à-dire de toute iso distance à une interface.

### 6.1.3 Mise en place de la level set function

Un des moyens de calculer la distance à une interface est de résoudre l'équation suivante :

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{x}, 0) &= 0 && \text{sur l'interface,} \\ |\nabla\Phi| &= 1 && \text{sur tout le domaine .}\end{aligned}$$

Cela est possible en résolvant de manière itérative le système suivant :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \text{sign}(\phi_0) * (1 - |\nabla \phi|)$$

[Eq 89]

avec la condition initiale suivante (liquide et solide désignent les deux sous domaines séparés par l'interface) :

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{x},0) < 0 & \text{ dans le domaine "solide"} \\ \Phi(\vec{x},0) = 0 & \text{ sur l'interface} \\ \Phi(\vec{x},0) > 0 & \text{ dans le domaine "liquide"} \end{aligned}$$

[Eq 90]

On peut se donner l'initialisation par exemple  $\Phi(\vec{x},0) = -1$  dans le solide,  $\Phi(\vec{x},0) = 0$  sur la frontière et  $\Phi(\vec{x},0) = +1$  dans le liquide. La résolution de  $\Phi$  dans le domaine assure la conservation du niveau zéro et la conservation du signe dans les domaines liquide et solide, de sorte qu'il est ensuite aisé de déterminer le domaine dans lequel se trouve chaque élément.

### Calcul du gradient

Le calcul du gradient est un peu particulier dans ce cas, puisqu'il doit tenir compte des possibilités de rupture de pente de la fonction distance. Le gradient ne sera donc pas évalué selon l'une des deux méthodes employées précédemment (moindres carrés ou moindres carrés ENO).

De plus, les level set functions étant typiquement employées dans des calculs de type différences finies, une modification du gradient est nécessaire pour prendre en compte l'aspect non structuré de nos maillages.

Dans l'optique d'une évaluation au premier ordre des gradients, Sussman et Fatemi [1999] emploient l'approximation suivante (dans un contexte différences finies, avec les notations usuelles) :

$$\begin{aligned} D_x^+ \phi_n & \equiv \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} \\ D_x^- \phi_n & \equiv \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} \end{aligned}$$

respectivement pour le gradient à gauche et à droite.

Le gradient effectif dans l'équation de la level set function est alors évalué comme suit :

$$\frac{\partial \Phi_n}{\partial x} \approx \begin{cases} D_x^+ \phi_n^{(1)} \\ D_x^- \phi_n^{(2)} \\ 0_{(3)} \end{cases}$$

$$(1) \text{ si } D_x^+ \phi_n \text{sign}(\Phi_0) < 0 \text{ et } (D_x^- \phi_n + D_x^+ \phi_n) * \text{sign}(\Phi_0) < 0$$

$$(2) \text{ si } D_x^- \phi_n \text{sign}(\Phi_0) > 0 \text{ et } (D_x^- \phi_n + D_x^+ \phi_n) * \text{sign}(\Phi_0) > 0$$

$$(3) \text{ sinon}$$

Ce formalisme ayant été initialement écrit pour l'approche différences finies, il nous faut l'adapter à notre contexte de volumes finis non structurés.

Nous proposons de remplacer les expressions de  $D_x^+ \phi_n$  et  $D_x^- \phi_n$  par un calcul moindres carrés, dans le même esprit que le calcul du gradient que nous employons pour les équations de transport.



$$D_x^+ \phi_n \approx \frac{\sum_{(x_i - x_0) > 0} (x_i - x_0)(\Phi_i - \Phi_0)}{\sum_{(x_i - x_0) > 0} (x_i - x_0)(x_i - x_0)}$$

et

$$D_x^- \phi_n \approx \frac{\sum_{(x_i - x_0) < 0} (x_i - x_0)(\Phi_i - \Phi_0)}{\sum_{(x_i - x_0) < 0} (x_i - x_0)(x_i - x_0)}$$

Il s'agit d'une évaluation monodimensionnelle d'une composante du gradient, par moindres carrés, qui tient compte d'une seule moitié d'espace.

### Emploi d'un maillage décentré

Pour tous les calculs que nous avons effectués, le choix s'est porté sur un maillage colocalisé.

Exceptionnellement, pour la level-set function, nous emploierons un maillage décalé pour la variable de la fonction distance Phi, qui sera calculée aux nœuds (les sommets des cellules). En effet, obtenir la level-set function aux nœuds permet de déterminer par simple interpolation linéaire, où passe l'interface sur chaque segment du maillage (reliant deux nœuds). Cela permet d'assurer, par construction, la continuité d'un plan de coupe à Phi constant, puisque la découpe de chaque élément s'appuiera sur les mêmes points que les éléments voisins (les points définis par interpolation sur les segments).

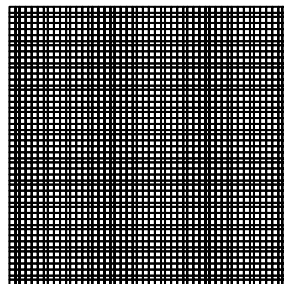
Cette option est facilitée par le fait que le calcul de la fonction distance est effectuée de façon explicite, et qu'elle ne nécessite pas la construction d'une matrice de résolution supplémentaire. En effet, la matrice creuse relative à la connectivité locale du maillage dual (le maillage centré sur les nœuds) est de taille et de structure différentes de la matrice employée pour le maillage basé sur les éléments.

### 6.1.4 Résultats

Les résultats suivants ont pour but d'illustrer le comportement de la level set function dans des cas analogues à ceux rencontrés pour le raffinement de maillage.

Le domaine utilisé est un carré de 0.1 m de côté.

Le maillage employé est un maillage carré de 50\*50 éléments.

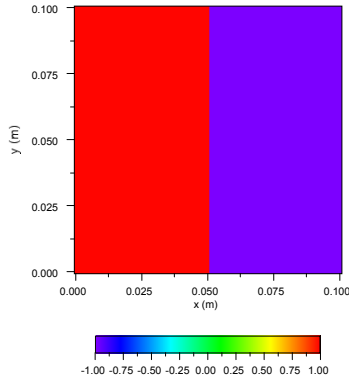


*Fig. 62 : Maillage employé : 50\*50 régulier*

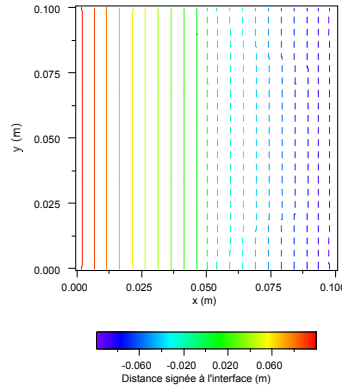
## Premier cas : initialisation avec une séparation des domaines

On sépare le domaine en deux moitiés, selon :

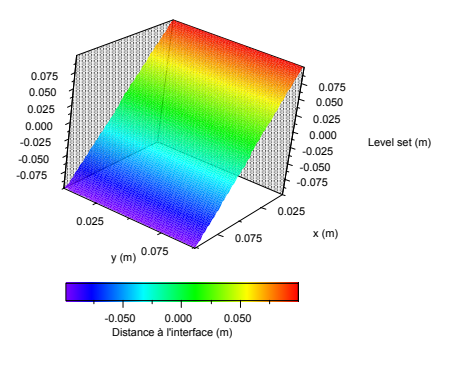
$$\Phi_0 = +1 \text{ si } x < 0.05, \Phi_0 = 0 \text{ si } x = 0.05, \Phi_0 = -1 \text{ si } x > 0.05$$



*Fig. 63 : Initialisation*



*Fig. 64 : Résultat à convergence*



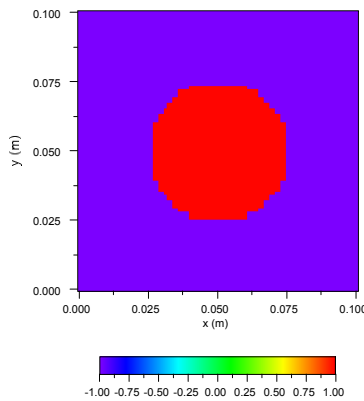
*Fig. 65 : Résultat à convergence (élévation)*

Ce cas simpliste est une illustration mono dimensionnelle qui vise à illustrer le type d'information que donne la level-set fonction, et vérifier le bon fonctionnement de l'algorithme : la solution analytique est ici triviale. Dans ce cas,  $\Phi(x) = 0,05-x$ .

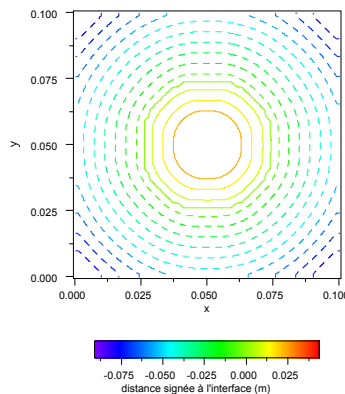
## Deuxième cas : distinction Intérieur-Extérieur d'un cercle.

Les conditions d'initialisation sont les suivantes :

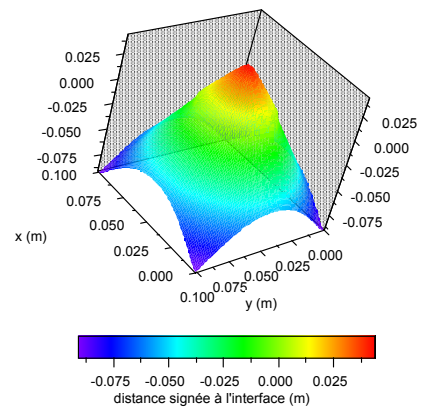
Soit un cercle de diamètre 0.05, centré en (0.05,0.05). On prend  $\Phi_0 = +1$  à l'intérieur du cercle,  $\Phi_0 = 0$  sur le cercle, et  $\Phi_0 = -1$  à l'extérieur du cercle.



*Fig. 66 : Initialisation  
(disque intérieur positif)*



*Fig. 67 : Résultat à convergence*



*Fig. 68 : Résultat à convergence  
(élévation)*

Ce cas est un peu plus complexe que le précédent, valide la level-set fonction pour des cas topologiques simples, et en deux dimensions.

Ici aussi, il est aisé de vérifier les bonnes valeurs numériques de la level-set fonction, puisque la solution analytique est  $\Phi(x) = \sqrt{(x-0.05)^2 + (y-0.05)^2} - 0.025$ .

### Troisième cas : produit de deux fonctions d'espace, une parabole et un cercle.

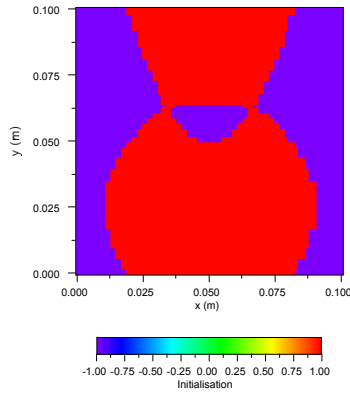


Fig. 69 : Initialisation de la fonction

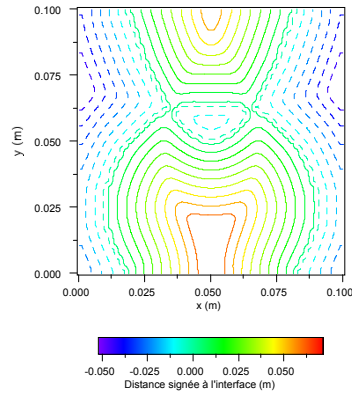


Fig. 70 : Résultat à convergence

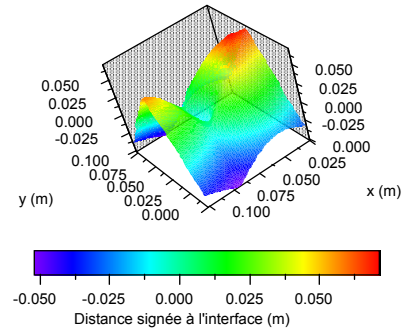


Fig. 71 : Résultat à convergence  
(Élévation)

Ce dernier cas a pour but de vérifier le bon comportement de la level-set fonction aux frontières du domaines, et dans un cas topologique un peu plus complexe que précédemment. En pratique, dans les problèmes de changement de phase, de tels cas sont plutôt rares.

### Illustration sur un calcul de solidification

Dans les cas précédents, nous nous sommes donné des cas où l'initialisation est imposée. Nous pouvons maintenant proposer un cas plus proche de ceux que nous allons rencontrer par la suite, soit un calcul de solidification.

À un instant donné de la simulation, soit un domaine partiellement liquide. Dans ce domaine, l'enthalpie est bornée par deux valeur H<sub>MAX</sub> et H<sub>MIN</sub>, avec

$$H_{MAX} > Cp(T_F - T_{Ref}) + L_f, H_{MIN} < Cp(T_F - T_{Ref}).$$

Posons

$$H_{_l} = Cp(T_F - T_{Ref}) + L_f, \text{ et } H_{_s} = Cp(T_F - T_{Ref}).$$

En choisissant d'initialiser à +1 les mailles qui sont solides et à -1 les mailles qui sont liquides, une initialisation acceptable pour la level set fonction est :

$$\Phi_0 = +1 \text{ si } H < H_{_s}, \Phi_0 = -1 \text{ si } H > H_{_l}, \text{ Et } \Phi_0 = (H - H_{_s}) / L_f \text{ si } H_{_s} < H < H_{_l}$$

Cela revient à employer l'initialisation suivante, si la fraction liquide  $f_l$  est une variable du problème :

$$\Phi_0 = 1 - 2 * f_l$$

Cette initialisation permet de placer implicitement le niveau zéro de la fonction distance, c'est-à-dire la position du front de solidification.

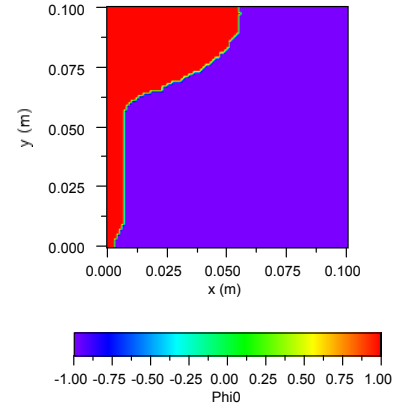
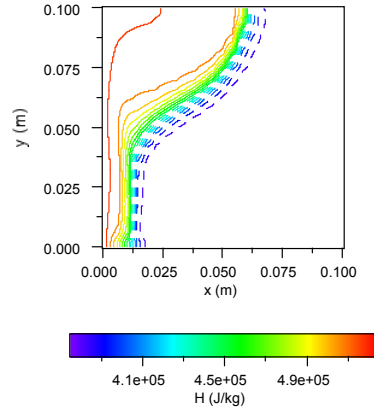
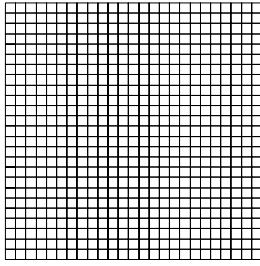


Fig. 72 : Maillage 25\*25 régulier

Fig. 73 : Distribution de l'enthalpie (J.kg<sup>-1</sup>)

Fig. 74 : Initialisation à  $\Phi_0$

Cette initialisation étant faite, nous pouvons maintenant connaître en tout point du maillage la distance à l'interface grâce à la level-set fonction :

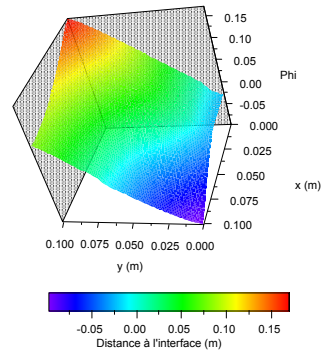
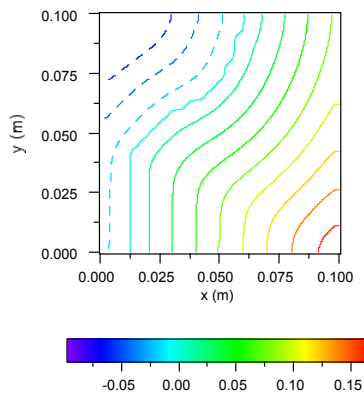


Fig. 75 : Résultat du calcul

Fig. 76 : Résultat du calcul (élévation)

### 6.1.5 Approche Bande Étroite

Dans les exemples qui précèdent, la level set fonction est résolue sur tout le domaine. Dans la mesure où tout le domaine ne sera pas remaillé, il est possible de réduire la résolution de la level set fonction à une bande déterminée à l'avance. Cela correspond à une approche de bande étroite (Narrow-Band Approach).

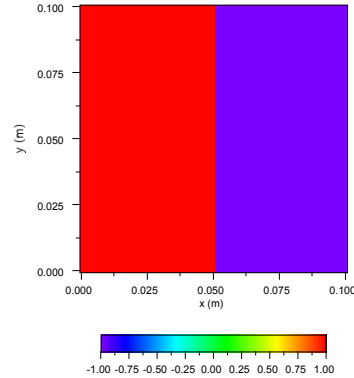
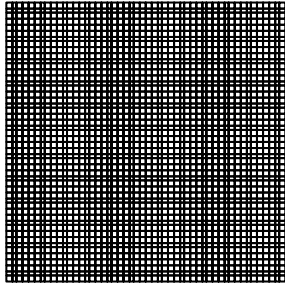
En effet, l'équation régissant la level set fonction peut être vue comme une équation de transport, dont le champ de vitesses est de norme un.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{\omega} \cdot \nabla \Phi = \text{sign}(\phi_0) \quad \text{avec} \quad \bar{\omega} = \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \quad (\text{et la condition initiale déjà évoquée})$$

Aussi, il est possible d'avoir une résolution partielle de cette équation sur une bande de largeur arbitraire,  $\delta x = \alpha \delta t$ , où  $\alpha$  est le nombre d'itérations effectuées.

Dans la phase d'adaptation du maillage, il est possible alors d'exclure par construction les éléments dont le raffinement n'est pas nécessaire, c'est-à-dire ceux qui sont à une distance supérieure à  $\delta x = \alpha \delta t$  de l'interface.

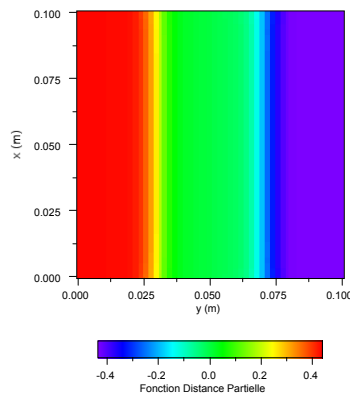
Nous pouvons illustrer l'approche bande étroite avec le premier calcul présenté.



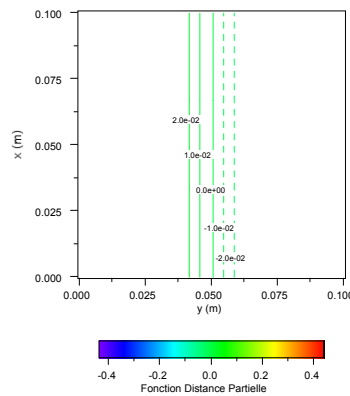
*Fig. 77 : Maillage employé : 50\*50 régulier*

*Fig. 78 : Initialisation du calcul*

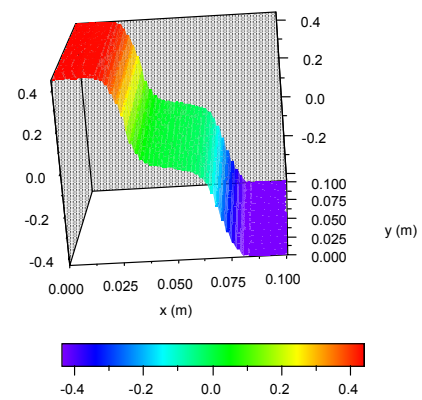
Pour ce calcul bande étroite, choisissons une largeur de bande de 2 cm. Le pas de temps étant de  $10^{-3}$ s, le nombre 20 itérations sont nécessaires puisque la vitesse de propagation associée à la fonction distance est de  $1\text{m.s}^{-1}$ . À l'issue de ce calcul, nous obtenons une fonction distance qui est partiellement vérifiée sur un domaine bien défini de  $-2\text{cm}$  à  $+2\text{cm}$  :



*Fig. 79 : Résultat du calcul bande étroite*



*Fig. 80 : Isodistances*



*Fig. 81 : Résultat du calcul (élévation)*

## 6.1.6 Synthèse

Étant donné un champ d'inconnues, et un critère de séparation de deux domaines, nous pouvons maintenant obtenir une fonction distance sur tout le domaine, afin d'effectuer un raffinement de maillage cohérent avec l'état de la simulation à un moment donné. Il faut maintenant définir la manière de laquelle nous allons tirer profit de cette information distance, pour effectuer le raffinement d'un maillage existant.

Nous supposons dans ce qui suit qu'un calcul de type level-set function a été mené, et qu'est attribué à chaque nœud du maillage une valeur de la level-set function

## 6.2 Raffinement des éléments

La construction d'un maillage de type couche limite est une succession d'opérations élémentaires consistant à découper les mailles le long d'une isoligne particulière de la fonction « distance à l'interface ». Une fois choisie la valeur  $\Phi_{int}$  de la level-set function correspondant à la distance à l'interface, à laquelle on veut découper le maillage, il faut éclater les éléments par lesquels passe cette isoligne.

On propose ici une méthode qui assure par construction la continuité de l'interface de remaillage sur tout le domaine : les facettes sont employées pour déterminer les nœuds additionnels, quand ils existent. Ainsi, le problème de la continuité du découpage des mailles est levé, puisque les faces sont les objets qui lient topologiquement deux éléments voisins.

On présente les choix effectués relatifs aux implications qu'induit un raffinement de maillage, comme les modifications topologiques, les interpolations nécessaires pour assurer le passage de l'information d'un maillage sur l'autre.

Enfin, on montre que la méthode de raffinement employée est facilement réversible, de sorte que le déraffinement est envisageable dès lors que les mailles additionnelles sont superflues.

On suppose ici qu'à chaque nœud d'un élément est attribuée une valeur de la level-set function.

### 6.2.1 Détermination des nœuds additionnels

Pour chaque segment du maillage initial, si la valeur  $\Phi_{int}$  de la level-set function est comprise entre les valeurs de la level-set function  $\Phi$  aux deux extrémités A et B du segment, le plan de coupe passe par ce segment. On y insère alors un nœud additionnel N, situé de la manière suivante :

$$(\Phi_B - \Phi_A) * \overrightarrow{AN} = (\Phi_N - \Phi_A) * \overrightarrow{AB}$$

En bidimensionnel, les segments sont en fait confondus avec les faces, de sorte que l'opération précédente insère en fait un nœud additionnel dans l'objet 'face' correspondant. De cette manière, il ne peut y avoir qu'un nœud additionnel par face.

### 6.2.2 Détermination des éléments additionnels

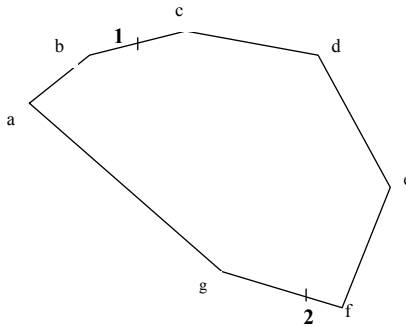
Il s'agit maintenant de déterminer si un élément doit être raffiné ou pas. Chaque élément est repéré par une liste circulaire et orientée de nœuds.

On se donne un élément du maillage. Si, dans cet objet se trouvent des nœuds additionnels, il doit être raffiné. La plupart du temps, un élément qui doit être raffiné est éclaté en deux éléments pour une valeur donnée de  $\Phi$ . (Cas à intersection unique).

#### Cas courant : découpe en deux éléments

Si le nombre de nœuds additionnels dans un élément est de deux, la méthode employée est la suivante :

La liste circulaire des nœuds composant un élément est modifiée par l'insertion, au bon endroit des nœuds additionnels. Ces nœuds sont ici au nombre de deux. Il faut maintenant éclater l'élément en deux éléments : on propose un algorithme qui permet d'effectuer cette découpe de manière systématique (et ne dépendant pas du nombre de faces d'un élément).



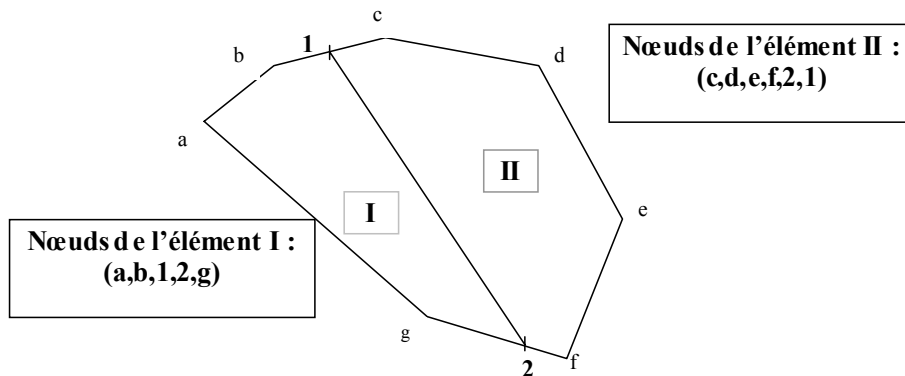
*Fig. 82 : deux nœuds additionnels sur un élément*

On se donne un élément à  $n$  côtés, ( $n \geq 3$ ) et les nœuds additionnels « 1 » et « 2 ».

Pour le premier élément, on parcourt la liste des nœuds, en commençant par celui de tête (qui n'est pas un nœud additionnel). On ajoute ces nœuds dans une liste temporaire jusqu'à ce qu'un nœud additionnel soit rencontré. On insère ce nœud « 1 », puis on saute les nœuds de la liste initiale jusqu'à rencontrer le second nœud additionnel « 2 », qu'on insère. On insère les nœuds suivants de la liste initiale jusqu'à rencontrer le nœud de tête.

Pour le deuxième élément, on se place ensuite, dans la liste initiale, sur le nœud original situé immédiatement après le premier nœud additionnel, et on procède de même.

Dans l'illustration présentée, cette procédure donne les éléments composés des nœuds suivants :



*Fig. 83 : découpage d'un élément en deux éléments*

### Découpage en plusieurs éléments

Dans certains cas, un élément peut être éclaté en plus de deux éléments. On procède alors à un traitement différent du cas précédent.

La procédure de détermination des nœuds additionnels est commune. C'est à l'issue de celle-ci que l'on sait si de quelle manière un élément doit être raffiné.

Si le nombre de nœuds additionnels est de 3 ou plus, on connecte tout d'abord les nœuds additionnels entre eux (dans l'ordre de la liste initiale), pour créer un élément-fils « central ». Ensuite, il faut créer les éléments-fils « périphériques » (ceux qui contiennent au moins un nœud de la liste d'origine).

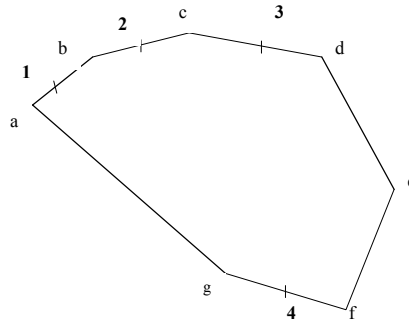
On crée l'**élément central**. On crée dans un premier temps la liste de nœuds qui caractérise cet élément. On parcourt la liste des nœuds initiale, en n'ajoutant que les nœuds qui sont additionnels.

Il faut ensuite créer les **éléments** périphériques. Ces éléments partagent une arête unique avec l'élément central. Sachant qu'il y a autant d'éléments périphériques que de nœuds additionnels, on

opère de la même manière que pour le découpage simple présenté ci-dessus, mais en partant à chaque fois d'un des nœuds additionnels.

**Exemple :**

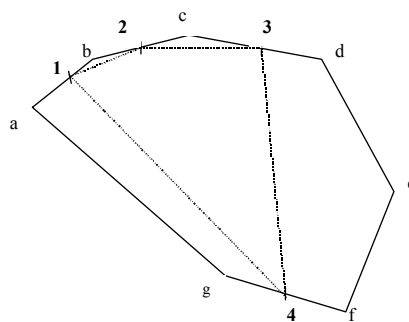
Dans le cas suivant, l'élément qui doit être découpé possède 7 nœuds initiaux, et 4 nœuds additionnels.



*Fig. 84 : Nœuds additionnels sur un éléments*

Il y aura donc un élément central, et quatre éléments périphériques.

Élément central : (1,2,3,4)



*Fig. 85 : Détermination des éléments raffinés ; cas à plus de deux nœuds*

Éléments périphériques :

- (1,b,2)
- (2,c,3)
- (3,d,e,f,4)
- (4,g,a,1)

Par construction, nous avons joint les nœuds qui correspondent aux isovaleurs de la level-set function. Dans la mesure où ces nœuds ont été placés à partir des faces, la continuité du découpage des mailles est assurée. En effet, toute face étant commune à deux éléments, les nœuds de découpe sont communs eux aussi à deux éléments voisins.

**Cas des Éléments frontière**

Sur la frontière, les éléments employés sont des éléments plats. Les procédures proposées alors précédemment ne s'appliquent alors pas.

Soit un élément frontière déterminé par les deux nœuds (N1,N2). Il ne peut y avoir qu'un seul nœud additionnel pour une valeur de Phi donnée. Aussi le découpage est assez simple. Soit A le nœud additionnel. Les deux éléments additionnels seront donc (N1,A) et (A,N2).



## 6.3 Prise en compte des nouveaux éléments : conséquences

Nous souhaitons employer une structure de données qui permette un ensemble d'opérations réversibles, de sorte que le déraffinement soit facile. Cela est opportun dans la mesure où une interface est susceptible de balayer tout un domaine, et qu'avec notre procédure d'adaptation automatique du maillage, le domaine dans son intégralité pourrait se voir raffiné, ce qui induirait une perte inutile de temps calcul.

### 6.3.1 Structure arborescente

Nous avons opté pour une structure en arbre, récursive, qui conserve l'information relative au maillage initial.

Nous noterons niveau 0 le maillage initial, i.e. celui que fournit le mailleur.

Ces éléments initiaux sont stockés dans une liste :



Fig. 86 : Éléments initiaux du maillage : structure de la liste

Ici par exemple, nous allons supposer que les éléments 2 et 3 ont été raffinis pour donner respectivement les éléments a,b et c,d,e, puis que e a été raffiné pour donner f et g :

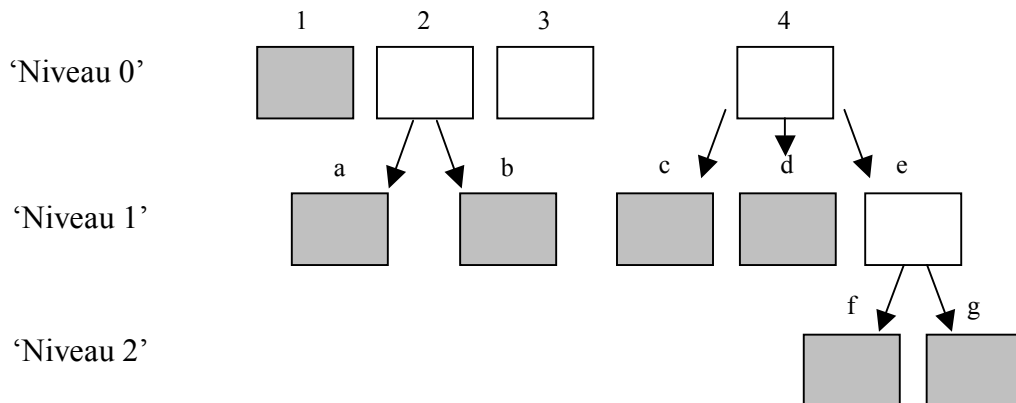


Fig. 87 : Arborescence employée pour repérer la hiérarchie des éléments

Ici, seuls les éléments grisés seront les éléments actifs du maillage : ce sont les éléments qui ne possèdent pas de fils.

À chaque séquence de raffinement, nous attribuerons aux éléments nouvellement créés le numéro de cette séquence. On rend ainsi l'opération aisément réversible.

De même, les faces employées sont celles qui n'ont pas de filles. Une structure en arbre analogue est employée pour la gestion des faces.

En pratique, pour gérer cette hiérarchie fils-père (respectivement fille-mère pour les faces), chaque objet élément du maillage possède par défaut une liste d'éléments-fils (respectivement filles) qui est vide si l'objet élément (face) est actif, et qui ne l'est pas dans le cas contraire. Cette structure est par construction récursive, et n'impose pas de limite au nombre de niveaux de raffinement.

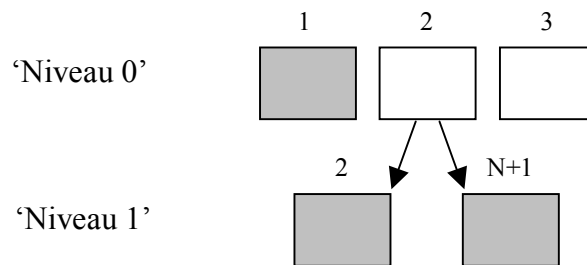
Il nous faut maintenant attribuer des indices aux éléments nouvellement créés en assurant la contiguïté de leur numérotation.

### 6.3.2 Numérotation des éléments

Puisque la numérotation repère les lignes du système matriciel, on doit toujours veiller à employer une numérotation d'élément contiguë : aucun 'trou' ne doit apparaître dans la numérotation des éléments.

Pour cela, lors du raffinement d'un élément, on procède de la manière suivante :

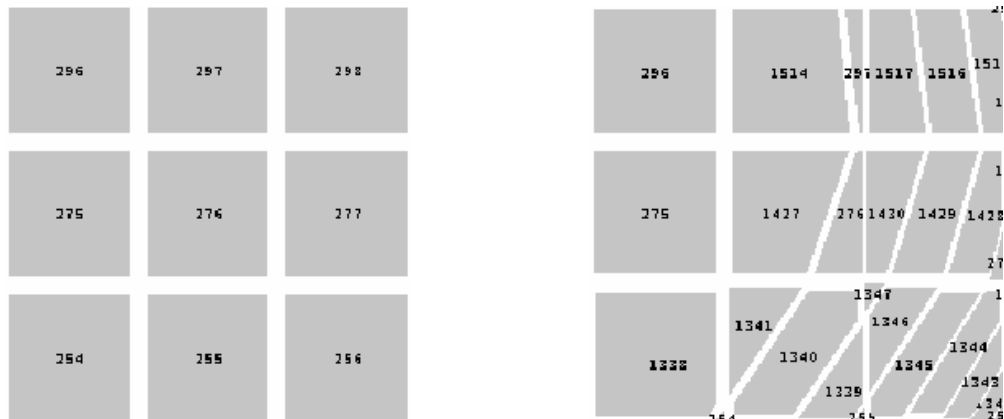
Soit  $N$  le nombre total d'éléments avant ce raffinement, et  $i$  l'indice de l'élément à raffiner. Cet élément va donner  $n$  éléments, une fois  $i$  raffiné. Pour ne pas procéder à nouveau à une indexation complète de tous les éléments, on attribue au premier des  $n$  éléments (résultant du raffinement de  $i$ ) l'indice de l'élément père  $i$ , les autres se voyant attribuer les indices de  $N+1$  à  $N+n-1$ .



*Fig. 88 : Attribution de nouveaux indices assurant la contiguïté de la numérotation*

Cette méthode n'a quasiment aucun impact en termes de performances, la notion de largeur de bande de la matrice de résolution n'influant pas de manière significative sur la vitesse d'exécution du programme. Cela est dû à l'emploi de matrices creuses et de méthodes itératives de résolution matricielles spécifiques.

Les figures suivantes constituent un extrait d'une séquence de raffinement, avec les indices des éléments avant raffinement (figure de gauche) et après raffinement (droite).



*Fig. 89 : Extrait d'une séquence de raffinement : attribution des indices pour les nouveaux éléments*

En ce qui concerne maintenant la connectivité du maillage, nous avons choisi de considérer deux éléments voisins s'ils partagent une face. Ayant créé des éléments, et inactivé les éléments pères, il nous faut mettre à jour cette connectivité.

### 6.3.3 Création de la nouvelle connectivité et mise à jour du système algébrique

La phase de création de la connectivité initiale étant particulièrement longue, il est pertinent de ne pas en effectuer une construction complète à chaque modification du maillage.

Doivent être modifiés :

Les éléments qui

- Viennent d'être créés.
- Sont au voisinage d'élément devenus pères.

Les facettes qui

- Viennent d'être créées.
- Sont dans le voisinage d'éléments qui deviennent pères.

Notre système algébrique emploie un stockage de matrice creuse, c'est-à-dire qu'on ne stocke que les éléments matriciels potentiellement non nuls, autrement dit sont ceux qui relient deux éléments voisins (se touchant par une face). Comme cette connectivité locale a changé, il est nécessaire de modifier aussi la structure de la matrice (concrètement, lui allouer de nouveaux emplacements en mémoire). La connectivité étant basée sur les faces actives, il suffit de balayer ces faces actives pour savoir quels sont les éléments connectés et définir ainsi les nouveaux emplacements des éléments non nuls.

#### Mise à jour des inconnues et interpolation

À cause des éléments supplémentaires, il faut modifier la taille des vecteurs de stockage des inconnues.

On crée des champs de stockage de ces inconnues en accord avec le nouveau nombre d'éléments. Il suffit de copier les valeurs des indices déjà définis pour le maillage précédent ; et les valeurs des inconnues sont copiées d'un élément-père vers ses fils.

De cette manière, on ne change pas les valeurs discrètes des inconnues d'un maillage sur l'autre.

Un soin particulier doit être apporté aux débits : pour que le code voie un champ de vitesses à divergence nulle, il suffit que les débits sur les faces assurent la divergence nulle sur chaque maille. Aussi,

- pour toutes les faces-filles, on met à jour leur débit en employant le rapport de surface entre la face-fille et sa face-mère, (multiplié par le débit de la face-mère) ;
- pour toutes les faces nouvellement créées, on déduit le débit en employant le théorème de la divergence : le débit sur cette nouvelle face est posé de sorte à assurer la divergence nulle sur un des deux éléments adjacents. (Partant d'un champ de vitesses à divergence nulle, on assure automatiquement la divergence nulle sur l'autre).

#### Déraffinement

La structure de donnée employée permet un déraffinement aisé. Ayant repéré chaque séquence de raffinement, il suffit d'effacer les éléments de la séquence de raffinement indésirable pour revenir au niveau précédent.

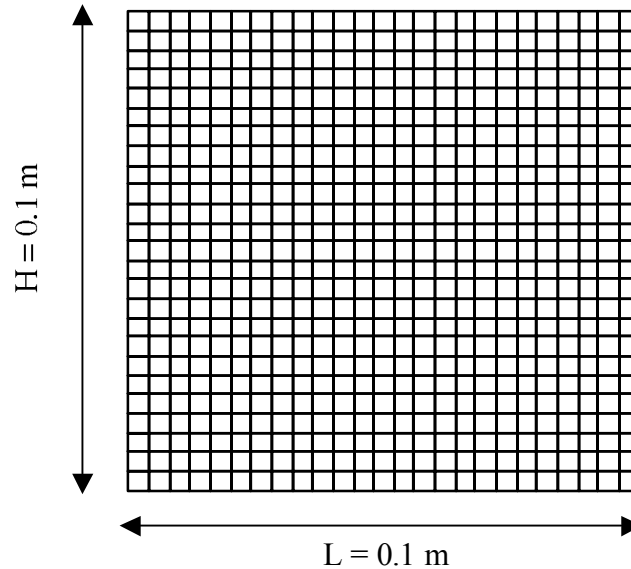
Comme dans le cas du raffinement, il faut mettre à jour la connectivité et la matrice du système algébrique, ainsi que les tailles et valeurs des inconnues.

La valeur d'une inconnue pour un élément déraffiné est obtenue en faisant la moyenne pondérée par le volume des inconnues de ses fils, et le débit pour une facette déraffinée est la somme des débits des facettes filles.

### 6.3.4 Exemple

Dans un premier temps, nous avons validé cette méthode de raffinement en l'utilisant comme une méthode de création de maillages. En partant d'un maillage structuré, régulier, nous avons souhaité éliminer un disque dans ce maillage et effectuer un maillage en couches limites de ce disque.

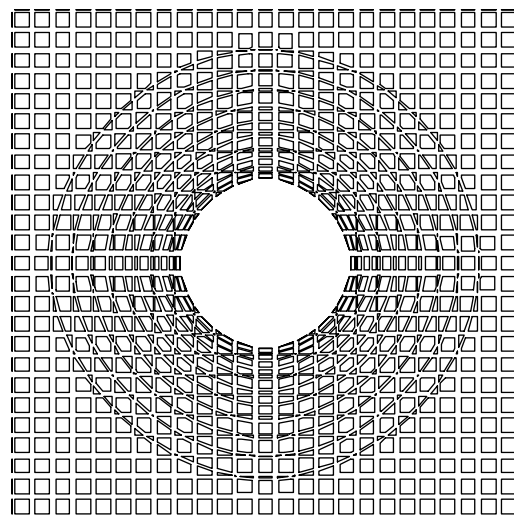
Pour cela, nous sommes parti d'un maillage 25\*25 régulier de 0,1 m de côté :



*Fig. 90 : Maillage initial employé*

Ensuite, nous avons employé la level-set fonction pour distinguer l'intérieur et l'extérieur du disque (calcul présenté [Fig. 66] à [Fig. 68]) puis effectué un raffinement en couche limites pour les valeurs positives de la level-set fonction. En sortie, nous n'avons retenu que les éléments pour lesquels tous les nœuds avaient une valeur de la level-set fonction positive ou nulle.

Le maillage obtenu est alors le suivant :

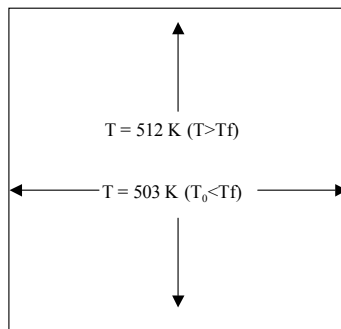


*Fig. 91 : Raffinement automatique autour d'un disque*

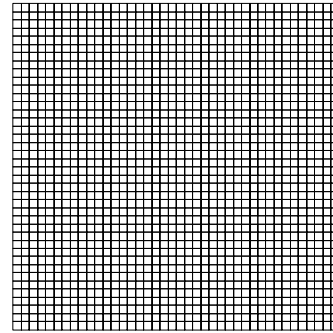
## Exemples de raffinement

On s'intéresse à un cas de fusion (sans convection naturelle) de l'étain dans une cavité carrée

On impose une température inférieure à la température de fusion  $T_f$  sur trois des quatre frontières du domaine, et une température supérieure à la température de fusion sur la frontière du domaine. La température initiale est de 503 K dans tout le domaine. À  $t = 0$  s, on applique le choc de température  $T = 512$  K sur la paroi supérieure.



Conditions opératoires



Maillage 40\*40 régulier

Fig. 92 : Présentation des conditions de la simulation

On emploie la méthode enthalpique présentée Chapitre 5 pour résoudre ce cas de fusion sans convection. Pour un temps de  $t = 32000$ s, on obtient les profils d'enthalpie et de température suivants :

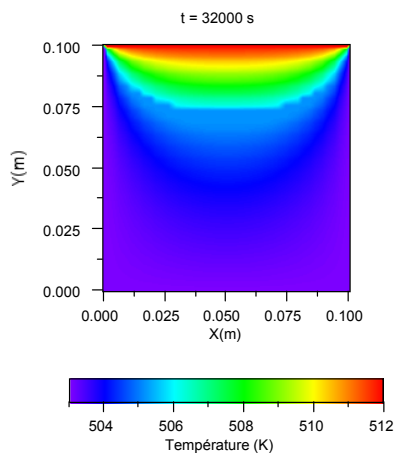


Fig. 93 : Profil de température à  $t = 32000$  s

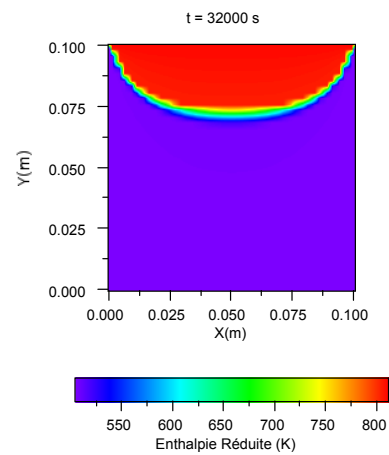
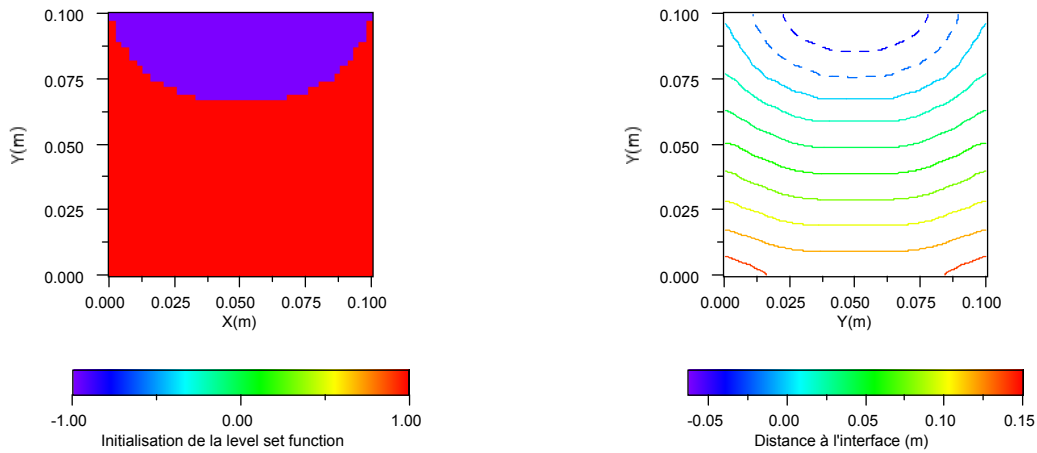


Fig. 94 : Profil d'enthalpie réduite à  $t = 32000$  s

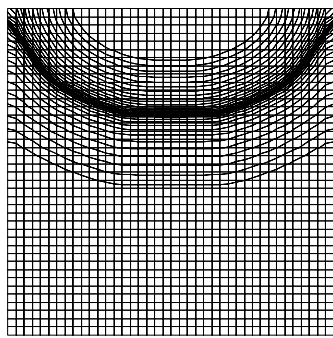
On met ensuite à contribution le profil d'enthalpie réduite présenté [Fig. 94] pour initialiser la level set function.

La résolution de cette dernière donne la distance à l'interface, à partir de laquelle on procède à un raffinement en couches limites dans les deux domaines liquides et solides.

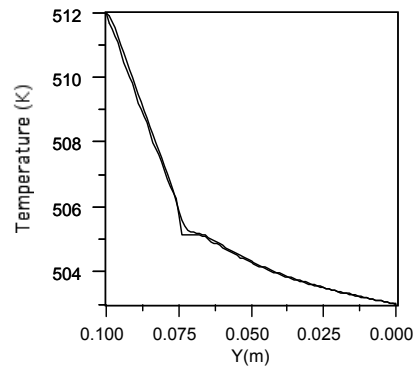


*Fig. 95 : Initialisation et résultats de la level-set fonction*

On peut maintenant proposer un raffinement en couches limites, en employant les valeurs extrêmes de la level set fonction, pour ajouter 15 niveaux de raffinement dans le solide et dans le liquide (cf. [Fig. 96]): On peut maintenant mener un calcul avec ce maillage raffiné, pour une capture plus fine du front de solidification. La figure suivante illustre le gain sur le profil de température. Le tracé a été réalisé à  $X = 0,05$  m sur la verticale

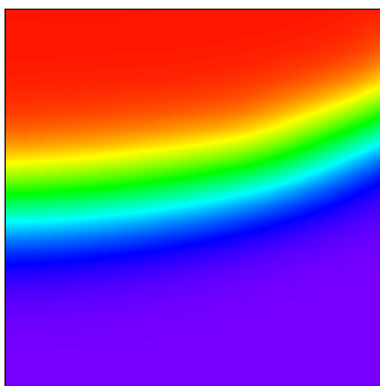


*Fig. 96 : Maillage obtenu après raffinement*

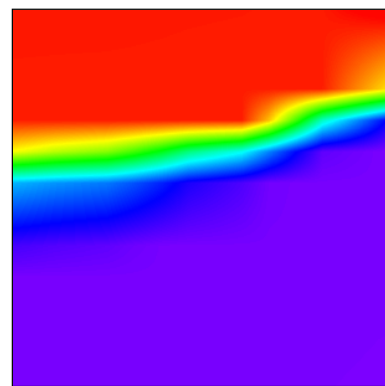


*Fig. 97 : Profils de température à  $X = 0.05$  avant et après raffinement*

Le gain sur l'enthalpie est moins visible, dans la mesure où le maillage initial est déjà relativement fin. Par contre, il est notable sur la température, dans la mesure où le plateau de température a été gommé par le raffinement. On présente ici un détail du front de solidification avant et après raffinement (resp. [Fig. 98] et [Fig. 99]).



*Fig. 98 : Détail du front de solidification avant raffinement*

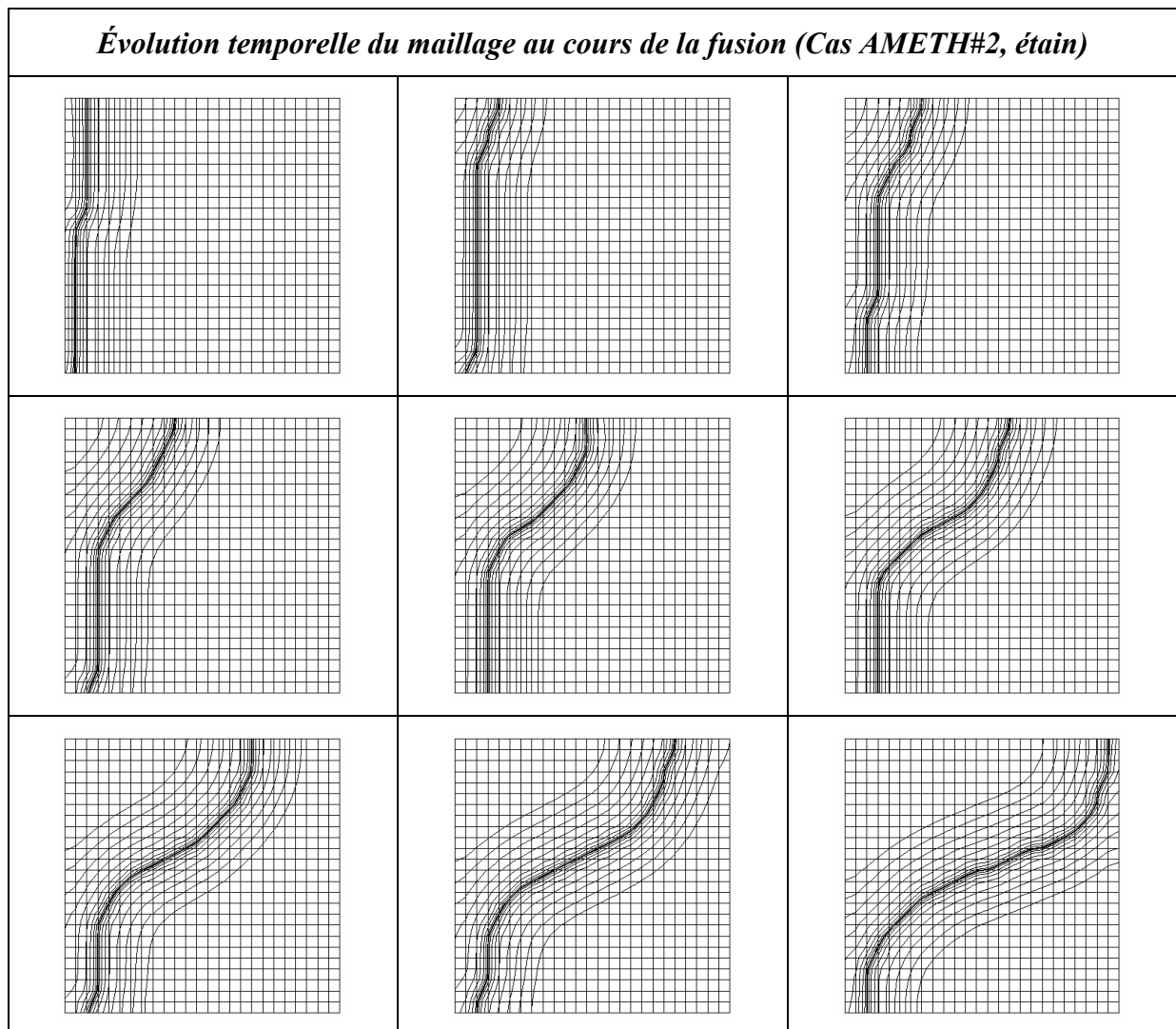


*Fig. 99 : Détail du front de solidification après raffinement*

## Raffinement sur le cas AMETH #2

Le même type de calcul a été mené sur le Cas#2 du Benchmark Ameth. (présenté au chapitre 5). La fusion et la convection naturelle induisent un déplacement de l'interface, dont nous présentons quelques raffinements à des instants choisis de la simulation.

Nous avons employé la même procédure que dans le cas présenté précédemment, en effectuant à chaque fois un déraffinement pour éviter de voir tout le domaine remaillé.



*Fig. 100 : Évolution temporelle du maillage au cours de la fusion (Cas AMETH#2, étain).*

## **6.4 Synthèse**

Nous avons présenté dans cette partie une méthode originale de découpage automatique des éléments, basée sur la distance signée à une interface donnée.

Nous avons dans un premier temps adapté la level-set function à notre contexte de volumes finis non structurés. Le signe de cette fonction est une information topologique importante, qui permet de distinguer les deux types de domaines que sépare l'interface, et d'envisager un traitement différent des domaines en fonction de leur type (par exemple liquide ou solide).

Nous avons ensuite proposé une méthode originale de découpage des éléments. Cette méthode faisant emploi de la level-set function en mettant à contribution d'abord les nœuds du maillage puis les faces, elle assure la continuité du découpage des mailles.

Enfin, nous avons présenté les différentes implications qu'a une adaptation de maillage de ce type, et fait état des solutions mises en place dans le code.





## 7 Conclusion

Dans le cadre de cette thèse, nous avons réalisé un code de calcul de mécanique des fluides en volumes finis non structurés, et testé une méthode de raffinement automatique anisotrope pour modéliser plus finement les fronts de solidification de corps purs. Le code modélise la solidification par une méthode enthalpique, et tient compte de la convection naturelle, qui est de nature à changer considérablement la forme d'un front de solidification (cf. chap 5). Plusieurs conclusions peuvent être tirées du développement du code lui-même :

- Les méthodes numériques choisies pour la mécanique des fluides au sens strict, en particulier l'utilisation de volumes finis en maillage non structurés, avec stockage colocalisé des inconnues vitesse et pression, se sont révélées facilement adaptables à des mailles fortement distordues ou de formes inconnues à l'avance (telles que celles issues du raffinement).
- Le schéma convection non oscillant ENO2 et les méthodes de correction de pression telles que PISO se sont révélées robustes, y compris dans le cas de changements brutaux des différentes quantités en présence, à cause des fronts de solidification de corps pur.
- L'efficacité de la méthode enthalpique a été mise en évidence, y compris sur des cas instationnaires, pour lesquels aucune dérive n'a été observée par rapport aux solutions analytiques.

La méthode de raffinement que nous avons choisie présente plusieurs aspects originaux qui la rendent intéressante pour des développements ultérieurs :

- Ce raffinement est basé sur la level-set function, que nous avons adapté à notre contexte de volumes finis non structurés, (chap. 6), et utilise directement l'information 'distance à l'interface' qu'elle est capable de fournir, pour assurer, par construction, un découpage continu des mailles, y compris pour des topologies complexes de l'interface.
- De plus, étant basée sur la distance signée à l'interface, elle permet d'envisager un raffinement différent pour les deux côtés de l'interface en fonction de paramètres physiques, comme une taille caractéristique de diffusion.
- L'approche proposée, par son mode de stockage arborescent lié à la programmation orientée objet de notre code, fait que l'opération de raffinement de maillages est aisément réversible, et permet un suivi d'un front de solidification en calcul instationnaire avec un minimum de mailles superflues.

### Perspectives de développement

Le code est pour l'instant bidimensionnel, et, grâce à l'approche objet pour laquelle nous avons opté, il est raisonnable d'envisager une extension à trois dimensions. De même, la conception objet du code devrait faciliter l'intégration d'un modèle de turbulence, qui peut être nécessaire à une modélisation physique pertinente de procédés de grande taille ou fortement brassés.

Autre extension possible, il est envisageable de modifier la méthode enthalpique pour traiter de la solidification des alliages, dans les cas où la zone pâteuse peut être traitée comme un matériau homogène de rhéologie connue. La convergence devrait alors être encore plus facile que pour les corps pur, du fait de l'absence de saut d'enthalpie.

L'approche la plus prometteuse de ce travail est probablement la mise à contribution de la level-set function pour le raffinement. On peut améliorer cette méthode pour prendre en compte une information sous-maille à l'initialisation, et ainsi, obtenir un positionnement plus fin du front de solidification dès le premier raffinement du maillage.

De plus, il serait souhaitable d'introduire au niveau du raffinement de maillage, des critères de qualité de maillage, notre méthode pouvant induire des mailles fortement hétérogènes dans leurs formes et leur taille. Cette hétérogénéité est de nature à dégrader la qualité des résultats ou à augmenter sensiblement les temps de convergence, et pourrait être limitée par des techniques relativement simple comme le déplacement des nœuds ou leur fusion avec le voisin, ou des techniques plus complexes si nécessaire.

Le présent travail a donc jeté les bases d'une méthode de calcul adaptée aux procédés d'élaboration de matériaux, dont on a pu montrer toutes les potentialités sur le cas académique du Benchmark « AMETH ». Cette méthode ne demande plus qu'à être exploitée sur des procédés réels, et développée plus avant en fonction des besoins qui apparaîtront lors de ces utilisations.

## 8 Annexe pression : Modification du Terme de Couplage

Le choix colocalisé pour le stockage des inconnues vitesse et pression nous a conduit à employer une modification de l'écriture des débits sur les faces, ceci dans le but d'éviter des oscillations en damier. Il s'avère que l'efficacité de ce terme dépend des conditions de la simulation.

Des conditions de la simulation dépend aussi la qualité du couplage vitesse-pression employé dans les méthodes de type SIMPLE. Dans certaines situations que nous présentons ici, on peut tirer grand bénéfice à modifier le terme de couplage dans le but d'améliorer la convergence.

Après une analyse de la sensibilité du terme de couplage, nous en proposons ici des modifications améliorant son efficacité, pour le rendre moins dépendant des paramètres de la simulation.

## Motivation

Nous allons voir dans cette partie que le terme de couplage vitesse-pression est très fortement influencé par les paramètres de la simulation, dans un sens qui n'est pas forcément favorable aux qualités de convergence d'un calcul. La qualité du couplage vitesse pression intervient par deux fois dans l'étape de correction de pression :

Dans un premier temps, on emploie les coefficients  $A_p^{U_i}$  des matrices du système algébrique des équations de quantité de mouvement pour lier les variations de vitesses et variations de pression (3.4) (étape de correction de pression proprement dite). Or ces coefficients dépendent non seulement de l'écoulement local, des paramètres géométriques du maillage, mais aussi des paramètres de la simulation.

Ensuite, nous avons introduit un terme de lissage de la pression (3.3.6), qui intervient dans l'interpolation des débits sur les faces. Pour les mêmes raisons que dans l'étape de correction de pression, l'efficacité de ce terme correctif dépend aussi des conditions de la simulation. Au plan numérique, il s'avère que ce terme correctif possède une tolérance intrinsèque à ce que l'on peut voir comme un filtrage de la pression. Il existe des cas où cette tolérance peut être d'un ordre de grandeur proche de celui des corrections de pressions elles mêmes.

Nous allons identifier ici des situations défavorables à l'efficacité de ce terme.

## Sensibilité du terme de couplage vitesse-pression

Dans un premier temps, nous allons présenter les sensibilités du terme de couplage vitesse pression, commun aux deux étapes que nous venons d'évoquer :

$$\rho \Delta \Omega_e \overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e$$

où  $\rho$  est la masse volumique du fluide,

$\Delta \Omega_e$  un terme de volume relatif à la face  $e$ ,

$\overline{\left( \frac{1}{A_{PP}^u} \right)}_e$  la moyenne sur  $e$  de l'inverse des termes diagonaux des matrices des équations de qdm..

À paramètres géométriques fixés, ce coefficient dépend de l'écoulement local, du pas de temps employé, et de la sous-relaxation des équations de quantité de mouvement. Avant l'étape de sous-relaxation des équations de quantité de mouvement, le coefficient  $A_{PP}^u$  du système algébrique relatif aux équations de quantité de mouvement prend la forme générale suivante :

$$A_{PP}^u = \sum_{e \in v_{sor}(P)} \dot{m}_e + \sum_{e \in v(P)} \frac{\mu_e}{L_{P,E}} \partial \mathcal{S}_e + \frac{\Delta \Omega_P}{\Delta t}$$

où  $\dot{m}_e$  est le débit sur la face  $e$ , du sous ensemble  $v_{sor}(P) \subset v(P)$  des faces où le débit est sortant

$\mu_e$  la valeur de la viscosité sur la face courante  $f$  appartenant au volume de contrôle  $P$ ,

$L_{P,E}$  la distance entre le volume de contrôle courant  $P$  et le volume  $E$  du voisinage  $V(P)$ ,

$\partial \mathcal{S}_e$  la surface de la face commune aux volumes  $P$  et  $E$ ,

$\frac{\Delta \Omega_P}{\Delta t}$  le rapport entre le volume de  $P$  et le pas de temps de la simulation  $\Delta t$ .

Lors de l'étape de sous-relaxation<sup>14</sup>, le coefficient  $A_{PP}^u$  est divisé par la valeur du coefficient de sous-relaxation. Ainsi, la valeur du coefficient  $A_{PP}^u$  est d'autant plus grande que le pas de temps est petit et que la sous-relaxation est faible. Le terme  $\left(\frac{1}{A_{PP}^u}\right)_e$  tend vers zéro lorsque le pas de temps tend vers zéro, ou lorsque le coefficient de sous relaxation des vitesses tend vers zéro (équation fortement sous-relaxée). Ceci impose en fait de fortes corrections de pression pour obtenir une même correction de débit.

## Modification du terme correctif

Pour une simulation donnée, les corrections de pression peuvent donc être élevées alors que l'évolution des vitesses est lente (faible pas de temps ou sous-relaxation importante). Ce lien amène souvent l'utilisateur à sous-relaxer à son tour la correction de pression, dans le dessein d'amortir cette sensibilité trop forte. Sous-relaxer à la fois vitesse et correction de pression conduit à des simulations dont les vitesses de convergence sont particulièrement faibles. Cette caractéristique des méthodes de type SIMPLE a conduit quelques auteurs à développer des méthodes alternatives de détermination de la pression [Niceno et al. 1998].

D'autres ont adapté l'approche SIMPLE pour faire en sorte qu'à faibles variations de vitesses soient liées faibles variations de correction de pression. C'est notamment le cas de la méthode SIMPLEX [Anjorin & Barton 2001], dont l'objectif est de s'affranchir de l'influence des termes de sous-relaxation ainsi que de la contribution (pénalisante) des termes instationnaires dans le terme de couplage.

## Modification du terme de lissage de la pression

Rappelons la forme du terme considéré

$$-\rho\Delta\Omega_e\left(\frac{1}{A_{PP}^u}\right)_e\left[\left(\frac{\partial p}{\partial n}\right)_e - \left(\frac{\partial p}{\partial n}\right)_e^{prec}\right]$$

où  $\rho$  est la masse volumique du fluide,

$\Delta\Omega_e$  un terme de volume relatif à la face,

$\left(\frac{1}{A_{PP}^u}\right)_e$  la moyenne de l'inverse des termes diagonaux des matrices de quantité de mouvement sur la face.

Dans les situations où le pas de temps ou la sous-relaxation sont faibles, on peut voir réapparaître des oscillations en damier du champ de pression qui ne sont plus négligeables devant les corrections de pression, et qui sont donc nuisibles et à la qualité des résultats et à la vitesse de convergence.

On peut donc suggérer de modifier le terme correctif pour préserver son efficacité dans ce type de situation asymptotique, mais tout à fait plausible.

Nous avons vu [3.3.5] qu'il était possible de multiplier ce terme correctif par une constante sans modifier la nature de la solution, dans la mesure où ce terme additionnel est du même ordre que les erreurs de troncature de la méthode numérique, et tend vers 0 quand la taille de maille tend vers zéro.

La méthode que nous avons employée consiste à multiplier le terme correctif par l'inverse du temps caractéristique  $\Delta t$ . Elle ne semble pas amputer les qualités de convergence, et ne semble pas nuire à la qualité du résultat.

<sup>14</sup> Nous avons ici distingué les valeurs de  $A_P$  avant et après sous-relaxation, puisque l'écriture de la sous-relaxation, selon sa formulation modifie la valeur de ce coefficient ou pas.



# Bibliographie

- Abgrall R., Lafon F.C.** (1993) : "Eno Schemes on Unstructured Meshes"  
*Rapport de Recherche Inria n°2099 Programme 6.*
- Anjorin, V.A.O. & Barton, I.E.** (2001) : "Removal of Temporal and Under-Relaxation Terms from the Pressure-Correction Equation of the SIMPLE Algorithm".  
*International Journal of Fluid Dynamics, Vol. 5, Article 5*
- Aziz, K. et Hellums J.D.** (1967) : "Numerical Solution of the Three Dimensional Equations of Motion for Laminar Natural Convection".  
*Phys. Fluids, vol 10, p 314.*
- Barakat, H.Z. et Clark, J.A.** (1966) : "Analytical and Experimental Study of Transient Laminar Natural Convection Flows in Partially Filled Containers".  
*Proc. 3rd Int. Heat Transfer Conf. Chicago, vol II, paper 57, p. 152.*
- Batchelor, G.K.** (1967) : "An Introduction to Fluid Dynamics".  
*Cambridge University Press.*
- Bertrand O., Binet B., Combeau H., Couturier S., Delannoy, Y. Gobin D., Lacroix M., LeQuéré P., Médale M., Menciger J., Sadat H., Viera G.** (1999) : "Melting Driven By Natural Convection - A Comparison Exercise: First Results".  
*Int. J. Therm. Sci., 38, 5-26.*
- Bénard C., Gobin D., Martinez F.** (1985) : « Melting in Rectangular Enclosures : Experiments and Numerical Simulations »  
*Journal of Heat Transfer, Transactions of the ASME, Vol.107, Nov.1985*
- Bennon WD, Incropera FP** (1987) : "A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems : 1. Model Formulation".  
*Int J Heat Mass Transf 1987 ;30(10) :2161-70*
- Bianchi A-M., Fautrelle Y., & Etay J.** (2003)<sup>15</sup> : "Transferts Thermiques : Théorie et Applications".  
*Presses Romandes et Universitaires de Lausanne.*

---

<sup>15</sup> A paraître.



- Courant R., Isaacson E. & Rees M.** (1952) : “On the Solution of Non-Linear Hyperbolic Differential Equations by Finite Differences”  
*Comm. Pure Appl. Math.*, vol. 5, p. 243.
- Coplien J.O.** (1992) : “Programmation Avancée en C++”  
*Editions Addison Wesley France, Diffusion Bordas ISBN 2-87905-014-2*
- Crank I.J.** (1984) : “Free an Moving Boundary Problems”.  
*Oxford U.K : Clarendon Press.*
- Dix, D.M.** (1963) : “The Magneto hydrodynamic Flow past a Non-Conducting Flat Plane in the Presence of a Transverse Magnetic Field”.  
*J. Fluid Mech*, vol 15, pp. 449
- Elder J.W.** (1965) : “Laminar Free Convection in a Vertical Slot”  
*J. Fluid Mech*, vol. 23, part 1. pp. 77-98
- El Ganaoui M.** (1996) : “Modélisation Numérique de la Convection Thermique Instationnaire en Présence d’un Front de Solidification Déformable”.  
*Thèse de l’Université d’Aix-Marseille.*
- El Ganaoui M, Mazhorova O.S., Bontoux P.** (2000) : “Computer Simulation of Pure and Alloys Melt Growth”.  
*Microgravity Quart Rev*;7(4) :171-178.
- El Ganaoui M, Bontoux P, Morvan D.** (1999) : “Localisation d’un Front de Solidification en Interaction Avec un Bain Fondu Instationnaire.”  
*Paris : CR Acad Sciences. p. 41-48, t. 327, Série lib.*
- Ferziger J., Peric M.** (1999) : “Computational Methods for Fluid Mechanics”  
*2nd Ed., Springer*
- Fontaine G., Delannoy Y.** (2001) : “Automatic Mesh Refinement Along Interfaces”,  
*9th CNRS-DFG Workshop on numerical flow simulation, Nice, 26th Oct 2001.*
- From, J.E. & Harlow, F.H.** (1963) : “Numerical Solution of the Problem of Vortex Street Development”.  
*Phys, Fluids*, vol. 6, p. 975.
- Gadgil A., Gobin D.** (1984) : “Analysis of Two-Dimensional Melting in Rectangular Enclosures in Presence of Convection”  
*Journal of Heat Transfer, Transactions of the ASME, Vol.106, Feb.1984*
- Galpin, P.F., Raithby, G.D.** (1986) : “Numerical Solution of Problem in Incompressible Fluid Flow : Treatment of the Temperature-Velocity Coupling”  
*Numer. Heat. Transfer*, 10, 105-129.
- Ghia U., Ghia K.N., Shin C.T.,** (1982) : “High-Re Solution of problems in incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method”.  
*J. Comp. Phys.* 48, 387-411.

- Gooch C.F.Ollivier** (1997) : “Quasi-ENO Schemes for Unstructured Meshes Based on Unlimited Data-Dependent Least-Squares Reconstruction”,  
*J. Comp. Phys.* 133, 6-17
- Incropera F.P., DeWitt D.P.** (1996) : “Fundamentals of Heat and Mass Transfer”  
4th ed.,  
*J.Wiley & Sons, ISBN 0-471-30460-3.*
- Jany P., Bejan A.** (1988) : “Scaling Theory of Melting with Natural Convection in an Enclosure”.  
*Int. J. Heat Mass Tran.* 31 pp. 1221-1235.
- Lorenz E.N** (1963) : “Deterministic non Periodic Flow”  
*Atmos. Sci., n° 20, pp. 130-141.*
- Murray R.M.** (1994) : “Stratégies et Tactiques C++”  
*Editions Addison Wesley France, Diffusion Bordas ISBN 2-87908-066-5*
- Morvan D, El Ganaoui M, Bontoux P.** (1999) : “Numerical Simulation of 2D Crystal Growth problems in a Vertical Bridgman-Stockbarger Furnace, Latent Heat Effects and Crystal-Melt in Interface Morphology”.  
*Int J Heat Mass Transf* 1999 ;42 ;573-579
- Muzaferija S., Peric M., Seidel (1995)** : “Computation of Flow Around aCircular Cylinder in a Channel”.  
*International Report, Institut für Schiffbau, University of Hamburg*
- Neises J., Steinbach I., Delannoy Y., Fontaine G.** (1998) : " Modelling of free surfaces in casting processes ",  
*in "Numerical Flow Simulation I, CNRS/DFG Collaborative Research Programme, Results 1996-1998", pp168-186, ed. H.Hirschel, Vieweg*
- Niceno B., Hanjalic K., & Nobile E.** (1998) : “An Extension of the Projection Method to Unstructured Hybrid Colocated Grids”.  
*ECCOMAS 98 John Wiley and Sons, Ltd.*
- Patankar, S. V.** (1980): “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”.  
Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences.  
*Hemisphere Publishing Corporation, New York, New York, U.S.A., ISBN 0-89116-522-3.*
- Pearson , C.E.** (1965): “A Computational Method for Viscous Flow Problems”  
*J. Fluid Mech. Vol. 21, p. 611*
- Prakash C., & Patankar, S.V.** (1985): “A Control Volume-Based Finite-Element Method for Solving the Navier-Stokes Equations Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation”.  
*Numerical Heat Transfer, 8:259-280, 1985.*
- Raithby G. D., & Torrance, K. E.** (1974): “Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow”.  
*Computational Fluids, 8(12):191-206*

- Rappaz M.** (1989) : “Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes”.  
*Int Matter Rev.* ;34 :93-123.
- Rhie C.M. & Chow, W. L.** (1983) : “Numerical Study of The Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation”.  
*American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, 21(11):1525-1532.
- Sethian J.A.** (2000) : “Fast Marching Methods and Level Set Methods for Propagating Interfaces”.  
[http://math.berkeley.edu/~sethian/level\\_set.html](http://math.berkeley.edu/~sethian/level_set.html)
- Sethian J.A.** (1987) : “Numerical Methods for Propagating Fronts : in Variational Methods for Free Surface Interfaces”  
*Proceedings 1985 Vallambrosa Conference, Eds. P. Concus and R. Finn, Springer-Verlag, NY,.*
- Stroustrup, B.** (1999) : “The C++ Programming Language”  
*Addison Wesley Publishing Company ISBN 0201700735*
- Sussman M., Fatemi E.,** (1999) : “An Efficient, Interface-Preserving Level Set Redistancing Algorithm and Its Application to Interfacial Incompressible Fluid Flow”.  
*Siam J. Sci. Comput. Vol 20, No. 4, pp 1165-1191.*
- Thomadakis M., & Leschziner M.** (1996): “A Pressure-Correction Method for The Solution of Incompressible Viscous Flows on Unstructured Grids”.  
*Int Journal for Num. Meth. In Fluids vol 22, pp 581-601.*
- Van Doormaal J. P., & Raithby, G.D.** (1987): “The Segregated Approach to Predicting Viscous Compressible Fluids Flows”.  
*Journal of Turbomachinery*, 109:268-277.
- Voller VR, Prakash C.** (1987): “A Fixed Grid Numerical modelling methodology for convection diffusion mushy region phase change problems”.  
*Int J Heat Mass Transfer* 30(8) :1709-19
- Voller VR, Cross M.** (1980) : “Accurate Solutions of Moving Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method”.  
*Int J Heat Mass Transf* ;24 :545-546

