



**Titre:** Adaptation de maillages hybrides et application aux simulations  
Title: d'équipements de combustion.

**Auteur:** Yannick Sirois  
Author:

**Date:** 2010

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Sirois, Y. (2010). Adaptation de maillages hybrides et application aux simulations  
Citation: d'équipements de combustion. [Thèse de doctorat, École Polytechnique de  
Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/382/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**  
Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/382/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de  
recherche:** François Guibault, & Jean-Yves Trépanier  
Advisors:

**Programme:** Génie mécanique  
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ADAPTATION DE MAILLAGES HYBRIDES ET APPLICATION AUX  
SIMULATIONS D'ÉQUIPEMENTS DE COMBUSTION

YANNICK SIROIS  
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph.D.)  
(GÉNIE MÉCANIQUE)  
AOÛT 2010

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

ADAPTATION DE MAILLAGES HYBRIDES ET APPLICATION AUX  
SIMULATIONS D'ÉQUIPEMENTS DE COMBUSTION

présentée par : SIROIS Yannick

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury constitué de :

M. REGGIO Marcelo, Ph.D., président

M. GUIBAUT François, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. TRÉPANIÉ Jean-Yves, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. PELLETIER Dominique, Ph.D., membre

M. CUILLIÈRE Jean-Christophe, Ph.D., membre

*À Gilles pour la motivation initiale. . .*

*À Juliette pour la motivation finale. . .*



## REMERCIEMENTS

Par la présente, je voudrais remercier toute ma famille, en particulier ma mère Danielle et ma conjointe Annie pour leur soutien moral tout au long de mes travaux. Je remercie aussi le FQRNT et l'École Polytechnique de Montréal pour leur soutien financier. Sans vous, rien de tout cela n'aurait été possible.

## RÉSUMÉ

Dans le domaine de la simulation des écoulements réactifs en milieu industriel, spécifiquement pour la conception des équipements de combustion pour les chaudières industrielles, les ressources de calculs sont limitées et la durée du cycle de conception est très courte. La taille des domaines simulés est de l'ordre de plusieurs échelles au-dessus de la taille des éléments nécessaires pour capturer précisément les phénomènes reliés à la réaction chimique, tel le front de flamme. Puisque la prédiction des polluants associés à ces équipements est dépendante de la qualité de la solution numérique pour plusieurs champs scalaires, la qualité de la discrétisation est de la plus haute importance. La qualité du maillage peut être augmentée en utilisant de l'adaptation de maillage anisotrope. Cette technique modifie le maillage de manière à minimiser l'erreur d'interpolation d'une solution ainsi que le nombre de degrés de liberté nécessaire à une résolution précise du problème.

Les objectifs de cette thèse par article consistent à élaborer une mesure de la qualité des éléments du maillage, qui doit être cohérente sur tous les éléments simpliciaux et non simpliciaux. Elle doit quantifier la distorsion anisotrope en taille, étirement et orientation par rapport à une spécification de ces quantités. Il est important que cette mesure soit applicable sur des maillages hybrides, puisqu'il est présumé que les simulations des équipements industriels utilisent des modèles de turbulence à loi de parois logarithmiques dans des géométries complexes, difficiles à mailler. Dans ces cas, le type de maillage le plus approprié est le maillage hybride. La mesure développée doit ensuite être utilisée dans la construction d'une fonction coût et d'un algorithme d'optimisation minimisant cette fonction sur le maillage. Il est démontré, par des exemples physiques, que l'optimisation de la mesure de qualité sur un maillage augmente directement la précision de la solution numérique sur celui-ci. Pour terminer, l'algorithme développé est appliqué à un cas de combustion industrielle pour lequel il est démontré que l'algorithme d'adaptation de maillage proposé permet d'augmenter la qualité de la solution des variables importantes en minimisant les

ressources requises.

Dans le premier article, on propose une mesure de qualité, appelée mesure de non-conformité d'un élément à une métrique riemannienne. Cette mesure, déjà définie pour le simplexe de chaque dimension, quantifie la distance entre le tenseur métrique courant d'un élément et le tenseur métrique spécifié. La métrique courante est celle qui transforme l'élément en élément de référence, et la métrique spécifiée est celle qui contient ce qui est requis du maillage localement pour minimiser l'erreur. Étant basée sur le concept de métrique riemannienne, la mesure de non-conformité permet de quantifier toutes les distorsions anisotropes en une seule fonction matricielle. Cependant, il est montré que la mesure n'est pas directement applicable aux éléments simpliciaux sans perdre sa capacité de détection de certaines dégénérescences des éléments. Pour remédier à cette situation, une approche alternative sous forme de subdivision des éléments non simpliciaux en sous-simplexes de coin sur lesquels la mesure de non-conformité peut être calculée est proposée. L'utilisation du sous-simplexe, pour lequel la transformation vers l'élément de référence est toujours constante, permet de détecter les dégénérescences du non-simplexe, ce qui n'était pas le cas originalement. Une caractérisation de la mesure de non-conformité appliquée aux éléments non simpliciaux par la technique des sous-triangles de coin montre qu'elle se comporte de la même manière sur tous les types d'éléments soumis à plusieurs types de déformations par rapport à une métrique spécifiée. La mesure est continue, différentiable, nulle pour une métrique courante égale à la métrique spécifiée et tend vers l'infini à l'approche de la dégénérescence. On peut aussi noter que le comportement du coefficient de non-conformité est symétrique autour du point de conformité absolue pour certaines déformations donnant ainsi la même valeur à un élément deux fois trop grand et à un élément deux fois trop petit.

Le deuxième article présente un algorithme de déplacement de sommets optimisant une fonction coût construite à partir de la mesure de non-conformité des éléments composant le voisinage du sommet à déplacer. Cet algorithme de lissage, jumelé aux opérations de raffinement, de déraffinement et de modifications topologiques de la bibliothèque d'adaptation de maillage *OORT*, permet d'adapter des maillages hybrides en appliquant des techniques de modifications de la connectivité dans les régions non structurées et de terminer par la minimisation de la non-conformité par lissage sur tout le domaine. Plusieurs exemples d'adaptation de maillages démontrent l'efficacité de l'algorithme proposé pour augmenter la qualité de maillages non simpliciaux et

hybrides en euclidien ou avec un métrique spécifiée anisotrope. En particulier, l'étude du profil d'aile RAE2822 en transsonique avec un maillage hybride démontre qu'avec un maillage initial ne permettant pas de capturer le choc correctement, l'adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité permet d'obtenir des résultats très près des résultats expérimentaux pour cet écoulement complexe avec une discontinuité difficile à résoudre correctement.

L'algorithme d'adaptation proposé est ensuite appliqué à un cas de combustion industrielle, soit celui d'une chambre de combustion axisymétrique au gaz naturel. Cette chambre de combustion présente, à une plus petite échelle, les mêmes caractéristiques d'écoulement qu'une chaudière industrielle. On fait référence ici à un écoulement multi-échelle turbulent avec flamme de diffusion sans prémélange où le front de flamme représente une quasi-discontinuité de plusieurs variables. La solution de cet écoulement est obtenue à l'aide du résolveur Star-CD de CD-Adapco en utilisant les mêmes modèles que ceux utilisés dans une simulation industrielle, plus précisément le modèle  $k-\epsilon$  avec loi de paroi pour la turbulence ainsi qu'au modèle d'équilibre chimique pour modéliser la réaction et le transport des espèces chimiques. Une étude de convergence du maillage nous a permis d'établir une solution et un temps de calcul de référence sur un maillage isotrope raffiné sur tout le domaine. Une solution convergée a été obtenue en environ 265 heures sur un maillage de 825 000 éléments. Le maillage initial servant à résoudre le problème à la première itération globale du processus d'adaptation ne comporte que 8011 éléments isotropes. Il est montré que la solution sur ce maillage est imprécise et insatisfaisante pour obtenir une bonne précision de la prédiction des polluants. Le maillage adapté en cinq itérations, quant à lui, comprend 16 450 éléments, et la durée complète du processus est évaluée à près de 1,5 heure. La solution obtenue est comparable à la solution sur le maillage raffiné, satisfaisante pour une prédiction précise des polluants. Ceci constitue un gain important en temps de calcul pour l'obtention de deux solutions comparables.

Cependant, la méthode proposée comporte certaines limitations. La mesure de non-conformité ne s'applique qu'aux éléments linéaires, pour lesquels la transformation du sous-simplexe de coin vers l'élément de référence est toujours constante. L'augmentation en qualité lors de l'adaptation de maillage hybride est aussi limitée par le fait qu'il n'existe aucune méthode de raffinement et de déraffinement ne sont disponibles dans la bibliothèque d'adaptation, ce qui limite l'approche à conserver le même nombre de degrés de liberté dans les zones structurées et donc à ne pas

nécessairement minimiser la non-conformité en raison des restrictions de tailles imposées par le nombre d'éléments fixe.

Les résultats obtenus nous permettent tout de même de conclure que la méthode d'adaptation de maillage minimisant la non-conformité à une métrique riemannienne permet d'améliorer les maillages hybrides dans les cas de combustion industrielle, ce qui entraîne une nette augmentation de la qualité de la solution pour un nombre de degrés de liberté minimisé. Quoique l'approche ne soit validée que sur un cas avec des modèles numériques fixes, il est envisageable de tester l'approche sur une plus grande variété de cas et d'implanter l'adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité dans un contexte de conception d'équipement industriel pour améliorer la précision des prédictions de polluants et réduire considérablement le cycle de conception.

## ABSTRACT

In the field of reacting flow simulations for industrial combustion equipment design, specifically for large utility boilers, computational resources are scarce and the design cycle usually short. The difference between the size of the furnaces to be simulated and the scale of the chemical reactions is of many orders of magnitude, which makes the generation of an adequate mesh to capture features such as the flame front almost impossible. Since the prediction of the pollutants generated by the designed equipment is dependent on the quality of the numerical solution for many scalar fields, the quality of the discretization is of the utmost importance. Mesh quality can be increased by using anisotropic mesh adaptation. This technique modifies the mesh so as to minimize the interpolation error and the degrees of freedom to solve the problem.

The objectives of this thesis first consist of developing a measure of mesh element quality which must be coherent for simplicial and non-simplicial elements. The measure must quantify the anisotropic distortion of length, stretching and orientation with respect to a specification of those quantities. It is important that the proposed measure be applicable to hybrid meshes since it is assumed that the combustion simulations use turbulence models with logarithmic wall functions in geometries which are complicated to mesh. In those cases, the most appropriate type of mesh to use is a hybrid mesh. The measure must also be constructed in such a way that it can be used in the construction of a cost function that will be minimized in a mesh optimization algorithm. It will be also shown that the minimization of the cost function based on the proposed quality measure directly improves the solution quality, using multiple examples. Lastly, the developed algorithm is applied to a numerical combustion test case with which it is shown that the mesh adaptation process increases solution accuracy for important variables while minimizing the required computational resources.

The first journal article presents a quality measure called the non-conformity to a

Riemannian metric. The measure, previously defined for simplices of each dimension, quantifies the distance between the current metric tensor of an element and the specified metric tensor. The current metric is defined as the transformation of an element into its reference element while the specified metric contains the requested characteristics of the mesh. The use of a Riemannian metric notation allows for the control of all anisotropic characteristics of the mesh in a single matrix function. It is shown that the non-conformity measure is not directly applicable to non-simplicial elements without losing its capacity to detect element degeneration. An alternative in the form of subdivision of non-simplices into corner sub-simplices on which non-conformity is calculated is proposed. The use of the simplex, for which the transformation into the reference element is always constant, allows for detection of element degenerations which was not the case for the original formulation. A characterization of the non-conformity measure applied to non-simplices using the corner sub-simplices approach shows that it behaves similarly for all element types when submitted to different types of deformations with respect to a constant specified metric. The measure is continuous, differentiable, reaches zero for an element that satisfies the specification and tends towards infinity when the element approaches a degenerated state. Symmetry around the absolute conformity value can be observed in many types of deformations which gives, for example, the same non-conformity coefficient to an element which is two times too large as to an element which is two times too small.

The second published paper presents a vertex displacement algorithm which optimizes vertices positions by minimizing a cost function constructed from the non-conformity measure on the first order neighbourhood of the vertex to be moved. This smoothing algorithm, coupled with operations of refinement, unrefinement and topological modifications programmed in the adaptation library *OORT*, allows hybrid mesh adaptation by applying connectivity modification techniques on the unstructured regions of the mesh followed by non-conformity minimization mesh smoothing on the whole domain. Efficiency of the proposed approach to improve mesh quality is shown through multiple examples. In particular, the study of the transonic RAE2822 wing profile with a hybrid mesh shows that with an initial mesh that cannot capture the shock properly, mesh adaptation with non-conformity minimization generates a solution very close to the experimental results for this complex flow with a discontinuity.

The proposed adaptation algorithm is then applied to an industrial combustion

test case. The presented case is the one of a natural gas industrial axisymmetric combustor. This combustor presents, at a smaller scale, the same flow characteristics that are expected in an industrial furnace. The flow possesses multi-scale effects, is highly turbulent and generates a non-premixed diffusion flame. The solution to this problem is obtained with the commercial solver Star-CD from CD-Adapco using the same numerical models that would be used in the industry. A mesh convergence study allowed a reference mesh to be determined and a reference solution to the problem to be obtained. The meshes used for this study are isotropic and refined over the whole domain equally in each case. The reference solution was obtained in 265 CPU hours and the mesh contains 825 000 elements. The initial mesh for the adaptation process contains 8011 isotropic elements. It is shown that the solution obtained with this mesh is imprecise and too inaccurate to reliably predict pollutant levels. After five global adaptation iterations, the mesh now contains 16 450 elements and the total time to obtain the solution from the initial mesh is about 1.5 hours. The final solution is comparable to the solution on the refined mesh and is accurate enough to use with pollutant prediction models. This constitutes an important gain in terms of computational time with respect to the time needed to obtain a comparable solution without mesh adaptation.

Certain limitations to the proposed method do apply. The non-conformity measure is only applicable to linear elements, for which the sub-simplex transformation into the reference element is always constant. The quality increase caused by the hybrid mesh adaptation process is also limited by the fact that no refinement and unrefinement operations are available for the structured regions of the mesh. Therefore, the non-conformity in those regions is not necessarily minimized due to the restrictions caused by the fixed number of elements available to occupy the space.

The results obtained clearly show that the proposed hybrid mesh adaptation method based on Riemannian metric non-conformity minimization increases hybrid meshes quality for industrial combustion simulations. The result is a direct increase in solution accuracy for a fixed number of degrees of freedom. Even if the approach has only been validated on a single combustion problem with predetermined numerical models, it is possible to envision implementation of this approach to test a wider variety of combustion problems in the context of industrial equipment design to predict pollutant levels with greater accuracy while considerably reducing the time required for the design cycle.



## TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE . . . . .	iii
REMERCIEMENTS . . . . .	iv
RÉSUMÉ . . . . .	v
ABSTRACT . . . . .	ix
TABLE DES MATIÈRES . . . . .	xii
LISTE DES TABLEAUX . . . . .	xv
LISTE DES FIGURES . . . . .	xvi
LISTE DES ANNEXES . . . . .	xix
LISTE DES SIGLES ET ABBRÉVIATIONS . . . . .	xx
Chapitre 1 INTRODUCTION . . . . .	1
1.1 Définitions et concepts de base . . . . .	1
1.1.1 La discrétisation de l'espace et l'erreur d'interpolation . . . . .	1
1.1.2 L'adaptation de maillage . . . . .	2
1.2 Éléments de la problématique . . . . .	4
1.2.1 Écoulements réactifs en milieu industriel . . . . .	4
1.2.2 Méthodes d'adaptation actuelles . . . . .	5
1.2.3 Évaluation de la qualité d'un maillage adapté . . . . .	6
1.3 Objectifs de recherche . . . . .	7
1.4 Plan de la thèse . . . . .	8

Chapitre 2	REVUE DE LITTÉRATURE . . . . .	10
2.1	Estimation de l'erreur d'une simulation numérique en mécanique des fluides . . . . .	11
2.1.1	Reconstruction de l'erreur résiduelle . . . . .	11
2.1.2	Résolution d'un problème dual . . . . .	12
2.1.3	Estimation de l'erreur d'interpolation . . . . .	13
2.1.4	Choix de l'approche d'estimation de l'erreur . . . . .	14
2.2	Mesure et contrôle de qualité d'un maillage . . . . .	14
2.2.1	Mesures de qualité . . . . .	15
2.2.2	Contrôle du maillage par métrique riemannienne . . . . .	16
2.2.3	Mesures de qualité dans l'espace de la métrique . . . . .	19
2.2.4	Non-conformité à une métrique riemannienne . . . . .	20
2.3	Techniques d'adaptation de maillage . . . . .	22
2.3.1	Application aux maillages structurés . . . . .	22
2.3.2	Méthodes de lissage . . . . .	23
2.3.3	Application aux maillages non structurés . . . . .	27
2.3.4	Application aux maillages hybrides . . . . .	29
2.4	Adaptation de maillage appliquée à la simulation d'écoulements réactifs . . . . .	29
2.4.1	Choix des variables d'adaptation . . . . .	30
Chapitre 3	SYNTHÈSE DES TRAVAUX . . . . .	33
3.1	Extension de la mesure de non-conformité aux éléments non simpliciaux . . . . .	33
3.1.1	Extension par la valeur moyenne . . . . .	34
3.1.2	Méthode des sous-triangles de coin . . . . .	35
3.1.3	Étude du comportement de la mesure . . . . .	37
3.1.4	Analyse de la mesure sur des maillages adaptés . . . . .	43
3.2	Adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité . . . . .	50
3.2.1	Choix de la fonction coût . . . . .	52
3.2.2	Algorithme de lissage . . . . .	54
3.2.3	Exemples d'adaptation de maillages utilisant la minimisation de la non-conformité . . . . .	60
3.3	Applications de l'approche développée à un cas de combustion . . . . .	70
3.3.1	Présentation du cas étudié . . . . .	70
3.3.2	Équations régissant l'écoulement et modèles numériques utilisés . . . . .	70

3.3.3	Conditions frontières . . . . .	75
3.3.4	Étude de convergence du maillage . . . . .	75
3.3.5	Maillage et solution initiaux de la chambre de combustion . . . . .	77
3.3.6	Résultats de l'adaptation du maillage de la chambre de combustion . . . . .	77
Chapitre 4 DISCUSSION GÉNÉRALE . . . . .		90
Chapitre 5 CONCLUSION . . . . .		95
5.1	Limitations de l'approche proposée . . . . .	96
5.2	Perspectives futures . . . . .	97
RÉFÉRENCES . . . . .		101
Annexes . . . . .		110

## LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 3.1	Valeurs des constantes de déplacement . . . . .	59
TABLEAU 3.2	Conditions d'opération, RAE2822, Cas 9 . . . . .	62
TABLEAU 3.3	Coefficients de fermeture du modèle de turbulence $k - \epsilon$ . . .	73
TABLEAU 3.4	Conditions frontières à l'entrée de combustible . . . . .	75
TABLEAU 3.5	Conditions frontières à l'entrée d'air . . . . .	76
TABLEAU 3.6	Résultats de l'étude de convergence du maillage . . . . .	76
TABLEAU 3.7	Statistiques de l'adaptation de maillage de la chambre de combustion . . . . .	79

## LISTE DES FIGURES

FIGURE 1.1	Processus général de la boucle résolution-adaptation de maillage.	3
FIGURE 3.1	Déterminant de la matrice jacobienne de la transformation non inversée d'un quadrilatère dégénéré. . . . .	35
FIGURE 3.2	Quadrilatère dégénéré décomposé en deux sous-triangles. . . .	36
FIGURE 3.3	Éléments non simpliciaux utilisés pour l'étude de comportement de la mesure de non-conformité. . . . .	38
FIGURE 3.4	Mise à l'échelle d'un quadrilatère. . . . .	38
FIGURE 3.5	Mise à l'échelle d'un hexaèdre. . . . .	39
FIGURE 3.6	Effets de la mise à l'échelle sur la non-conformité. . . . .	39
FIGURE 3.7	Étirement d'un quadrilatère. . . . .	40
FIGURE 3.8	Étirement d'un hexaèdre. . . . .	40
FIGURE 3.9	Effets de l'étirement sur la non-conformité. . . . .	40
FIGURE 3.10	Positionnement de l'axe $y$ pour chaque type d'élément étudié.	41
FIGURE 3.11	Effets de l'orientation sur la non-conformité. . . . .	41
FIGURE 3.12	Dégénérescence par arête nulle pour un quadrilatère. . . . .	43
FIGURE 3.13	Dégénérescence par arête nulle pour un hexaèdre. . . . .	43
FIGURE 3.14	Effets de la dégénérescence par arête nulle sur la non-conformité.	44
FIGURE 3.15	Dégénérescence par grand angle pour un quadrilatère. . . . .	44
FIGURE 3.16	Dégénérescence par grand angle pour un hexaèdre. . . . .	44
FIGURE 3.17	Effets de la dégénérescence par grands angles internes sur la non-conformité. . . . .	45
FIGURE 3.18	Dégénérescence par petit angle pour un quadrilatère. . . . .	45
FIGURE 3.19	Dégénérescence par petit angle pour un hexaèdre. . . . .	45
FIGURE 3.20	Effets de la dégénérescence par petits angles internes sur la non-conformité. . . . .	46
FIGURE 3.21	Image de Riemann sous forme de surface solution . . . . .	47
FIGURE 3.22	Représentation du terme $M_{11}$ de la métrique spécifiée. . . . .	48

FIGURE 3.23	Représentation du terme $M_{22}$ de la métrique spécifiée. . . . .	48
FIGURE 3.24	Représentation du terme $M_{12}$ de la métrique spécifiée. . . . .	49
FIGURE 3.25	Maillage initial de Riemann, $\varepsilon = 11.33$ . . . . .	50
FIGURE 3.26	Adaptation de Riemann par l'analogie des ressorts, $\varepsilon = 5.16$ . .	51
FIGURE 3.27	Adaptation de Riemann par la méthode combinée, $\varepsilon = 4.79$ . .	52
FIGURE 3.28	Différence entre la mesure de non-conformité et des mesures de taille, d'étirement et d'orientation. . . . .	53
FIGURE 3.29	Maillage par interpolation transfinie du tube en U. . . . .	60
FIGURE 3.30	Maillage du tube en U lissé avec métrique euclidienne spécifiée.	61
FIGURE 3.31	Maillage initial du profil RAE2822. . . . .	63
FIGURE 3.32	Maillage initial du profil RAE2822, bord d'attaque. . . . .	64
FIGURE 3.33	Solution initiale du profil RAE2822, nombre de Mach. . . . .	65
FIGURE 3.34	Coefficient de pression autour du profil RAE2822. . . . .	66
FIGURE 3.35	Évolution du facteur de forme ( $\eta$ ) au cours d'une itération globale.	66
FIGURE 3.36	Évolution du coefficient de non-conformité au cours d'une ité- ration globale. . . . .	67
FIGURE 3.37	Maillage du profil RAE2822 après 10 itérations d'adaptation. .	68
FIGURE 3.38	Solution du profil RAE2822 après 10 itérations d'adaptation. .	69
FIGURE 3.39	Géométrie non à l'échelle de la chambre de combustion. . . . .	71
FIGURE 3.40	Maillages résultants de l'adaptation aux itérations 2, 3 et 4. .	80
FIGURE 3.41	Maillage adapté de la chambre de combustion après 5 itérations, vue globale. . . . .	81
FIGURE 3.42	Maillage adapté de la chambre de combustion après 5 itérations, vues spécifiques. . . . .	82
FIGURE 3.43	Solution sur le maillage de la chambre de combustion à l'itéra- tion 2. . . . .	83
FIGURE 3.44	Solution sur le maillage de la chambre de combustion à l'itéra- tion 3. . . . .	84
FIGURE 3.45	Solution sur le maillage de la chambre de combustion à l'itéra- tion 4. . . . .	85
FIGURE 3.46	Solution finale sur le maillage de la de la chambre de combustion après 5 itérations. . . . .	86
FIGURE 3.47	Zone de recirculation secondaire, itération 1. . . . .	87
FIGURE 3.48	Zone de recirculation secondaire, itération 5. . . . .	87

FIGURE 3.49	Zone de recirculation secondaire, maillage de 825 000 éléments.	87
FIGURE 3.50	Adaptation de la chambre de combustion, fraction de mélange axiale. . . . .	88
FIGURE 3.51	Adaptation de la chambre de combustion, fraction de mélange radiale. . . . .	88
FIGURE 3.52	Adaptation de la chambre de combustion, température radiale.	89

## LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A Measuring the conformity of non-simplicial elements to an anisotropic metric field . . . . .	110
ANNEXE B Hybrid mesh smoothing based on Riemannian metric non-conformity minimization . . . . .	124
ANNEXE C Hybrid mesh adaptation applied to industrial numerical combustion	157



## LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

### Abréviations

$Ar$	Argon
BTU	British Thermal Unit
CFD	Computational Fluid Dynamics
$C_2H_6$	Éthane
$CH_4$	Méthane
$CO$	Monoxyde de carbone
DNS	Direct Numerical Simulation
LES	Large Eddy Simulation
MAGNU	Laboratoire de recherche en maillage et géométrie numérique
$N_2$	Azote
$NO_X$	Oxyde d'azote
$O_2$	Oxygène
$\mathcal{OORT}$	Object Oriented Remeshing Toolkit
PPDF	Presumed Probability Density Function

### Caractère usuels

$c$	Facteur multiplicatif de la fraction de déplacement ou corde d'un profil
$C_h$	Coefficient de taille
$C_\alpha$	Coefficient d'orientation
$C_\kappa$	Coefficient d'étirement
$C_{\epsilon 1}$	Coefficient de fermeture du modèle $k - \epsilon$
$C_{\epsilon 2}$	Coefficient de fermeture du modèle $k - \epsilon$
$C_\mu$	Coefficient de fermeture du modèle $k - \epsilon$
$C_p$	Coefficient de pression
$f$	Fonction coût ou fraction de mélange

$g$	Variance de la fraction de mélange ou métrique d'une transformation
$h$	Longueur dans la direction d'une valeur propre ou enthalpie
$h_R$	Enthalpie de formation d'une espèce
$I$	Tenseur identité
$K$	Un élément
$k$	Énergie cinétique de turbulence
$\mathcal{M}$	Métrique riemannienne
$\overline{\mathcal{M}}$	Métrique moyennée sur un élément
$\mathcal{R}$	Tenseur de rotation contenant des vecteurs propres
$M_\infty$	Nombre de Mach de l'écoulement relatif
$m_i$	Fraction massique d'une espèce chimique dans un mélange
$N(\cdot)$	Un voisinage
$n$	Un nombre d'itérations
$P$	Terme source
$P_k$	Production d'énergie cinétique de turbulence
$Pr$	Nombre de Prandtl
$p$	Pression
$Re$	Nombre de Renolds
$Sc$	Nombre de Schmidt
$s$	Coefficient stœchiométrique de réaction
$T$	Un tenseur, ou la température
$T_0$	Température de référence des enthalpies de formation
$\mathcal{T}$	Un maillage
$t$	Temps
$u$	Vitesse dans une direction logique, usuellement en x
$V$	Un sommet
$v$	Vitesse dans une direction logique, usuellement en y
$\vec{x}$	Vecteur position

### Caractère grecs

$\Lambda$	Matrice diagonale contenant des valeurs propres
$\alpha$	Angle de rotation ou Angle d'attaque
$\delta$	Fraction de déplacement ou delta de Kronecker

$\epsilon$	Taux de dissipation de la turbulence
$\eta$	Facteur de forme
$\varepsilon$	Coefficient de non-conformité
$\kappa$	Facteur d'étirement
$\lambda$	Valeur propre
$\mu$	Viscosité
$\xi$	Coordonnées paramétriques
$\rho$	Densité
$\sigma_\epsilon$	Coefficient de fermeture du modèle $k - \epsilon$
$\sigma_k$	Coefficient de fermeture du modèle $k - \epsilon$
$\tau$	Sous-triangle de coin, tenseur de contraintes
$\zeta$	Concentration de combustible

## Indices

$A$	Conditions dans l'entrée de comburant
$d$	Dimension du problème
eff	Efficace
F	Conditions dans l'entrée de carburant
$fu$	Carburant
$i$	Direction logique
$j$	Direction logique
$k$	Direction logique
$K$	Un élément
min	Minimum
max	Maximum
$NC$	Non-conformité
$s$	Spécifié
$t$	Turbulent
$V$	Un sommet

## Symboles

$\cap$	Intersection
$\sum$	Sommation

$\Pi$	Multiplication
$\nabla$	Opérateur de gradient
$ \cdot $	Déterminant ou valeur absolue
$\bar{\cdot}$	Valeur moyenne
$\tilde{\cdot}$	Valeur moyenne pondérée par la masse
$'$	Fluctuation
$''$	Fluctuation pondérée par la masse

## Chapitre 1

### INTRODUCTION

Dans le domaine de la simulation numérique des écoulements fluides, le gain de précision dans les solutions obtenues et la diminution des coûts, en temps humain et machine, constituent les principaux moteurs du progrès. Ceci est particulièrement vrai dans le domaine de la prédiction des polluants pour la conception des équipements de combustion industrielle. Que la résolution des équations aux dérivées partielles permettant de décrire l'écoulement dans le domaine soit faite par différences finies, éléments finis ou volumes finis, la précision des solutions obtenues et les temps requis pour les obtenir sont directement liés à la qualité de la discrétisation spatiale des domaines étudiés.

#### 1.1 Définitions et concepts de base

##### 1.1.1 La discrétisation de l'espace et l'erreur d'interpolation

Le maillage est une discrétisation de l'espace permettant la résolution numérique des équations aux dérivées partielles étudiées. La discrétisation d'un domaine en dimension 2 ou 3 peut se faire en plusieurs types d'éléments. Les maillages générés de façon structurée le sont en subdivisant l'espace en blocs de quadrilatères ou d'hexaèdres avec un nombre fixe d'éléments selon chaque direction logique. En pratique, la génération de maillages structurés est une tâche très complexe qui nécessite une décomposition de l'espace en sous-domaines, qui doit généralement être faite manuellement. Avec la disponibilité croissante de la puissance de calcul, les géométries étudiées sont devenues de plus en plus complexes à mailler. Pour réduire les coûts associés à la génération des maillages, la communauté scientifique a introduit les maillages de type non structurés. Ceux-ci sont générés de façon automatique et sont com-

posés d'éléments connectés selon une topologie variable à chaque sommet. L'élément de base généralement utilisé dans les maillages non structurés est le simplexe de la dimension du domaine. Le simplexe est l'élément qui possède le moins d'arêtes possible en deux dimensions et le moins de faces possible en trois dimensions pour couvrir une section de l'espace de la dimension en question. Un troisième type de maillage, le maillage hybride, est composé de plusieurs types d'éléments structurés ou non. Le principal avantage de ce dernier type de maillage est de permettre l'utilisation des simplexes non structurés pour facilement discrétiser le domaine étudié, tout en utilisant des éléments de type structuré près des parois. Ce type d'éléments est nécessaire lors de l'utilisation de modèles de turbulence, tels les modèles de type  $k-\epsilon$ , qui requièrent des éléments orientés de façon normale à la paroi.

La constante entre tous ces types de maillage est toute discrétisation d'un espace entraîne une erreur d'interpolation. En effet, que les valeurs des champs scalaires et vectoriels soient stockées aux nœuds, aux faces ou aux centres des éléments, lorsqu'une quantité est évaluée à l'intérieur d'un élément, sa valeur est interpolée à partir des valeurs stockées avoisinantes. Ainsi, plus le volume d'un élément est grand, plus l'erreur d'interpolation sur cet élément sera grande. La façon simple de réduire cette erreur est de tout simplement réduire la taille des éléments du maillage. Mais cette augmentation en degrés de liberté aura un impact important sur les coûts de calcul de l'analyse. Un compromis doit donc être établi entre les besoins de précision et le temps de calcul.

### 1.1.2 L'adaptation de maillage

Afin d'atteindre cet équilibre, deux méthodes sont envisageables. La première consiste simplement à régénérer un maillage en utilisant des fonctions de concentration dans les zones spécifiques où une densité de degrés de liberté importante est désirée. Mais ceci implique une connaissance approfondie du cas étudié afin de prévoir les endroits où des phénomènes importants de l'écoulement seront présents. Dans certains cas, la complexité de la géométrie ou celle des phénomènes étudiés peuvent rendre cette procédure très coûteuse, autant en temps homme qu'en temps machine, si les zones importantes de l'écoulement sont mal identifiées.

La deuxième solution consiste à adapter le maillage. L'adaptation de maillage est un procédé par lequel un maillage est modifié ou régénéré automatiquement pour satisfaire un critère. Ce critère peut autant être de source analytique que provenir de la

géométrie étudiée. Une procédure reconnue est l'approche d'adaptation *a posteriori*. Cette méthode tente d'adapter le maillage afin de réduire l'erreur d'interpolation d'une solution obtenue sur le maillage. Le processus général d'adaptation *a posteriori* est présenté à la figure 1.1.

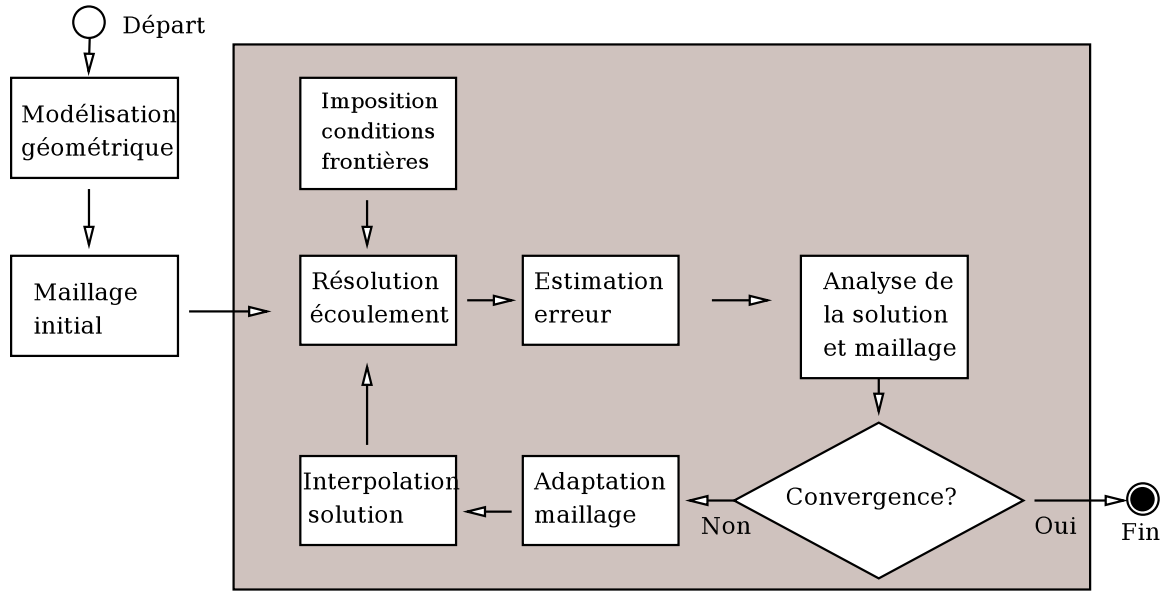


FIGURE 1.1 Processus général de la boucle résolution-adaptation de maillage.

L'application de cette procédure permet de réduire le nombre d'éléments dans les endroits où l'écoulement varie peu, et de l'augmenter dans les zones de variations accrues. Plusieurs méthodes qui seront discutées au chapitre suivant utilisent une minimisation de mesures d'erreur sur le maillage pour construire le maillage utilisé à l'itération suivante.

L'adaptation de maillage peut aussi introduire des cellules anisotropes dans le maillage. Il a été démontré dans McRae (2000) que l'utilisation de cellules anisotropes dans les écoulements, si elles sont alignées correctement, permet d'augmenter la précision de la solution dans les régions de hauts gradients d'un écoulement. L'estimation de l'erreur d'interpolation combinée avec l'adaptation de maillage permet ainsi de découvrir automatiquement les phénomènes complexes d'un écoulement et de les résoudre, tout en optimisant la distribution des degrés de liberté, et de réduire le temps de préparation et de résolution des simulations numériques d'écoulements fluides.

## 1.2 Éléments de la problématique

### 1.2.1 Écoulements réactifs en milieu industriel

Dans le domaine de la conception d'équipements de combustion industrielle, la réduction des émissions polluantes est devenue une préoccupation pour tous. En réponse à ces préoccupations environnementales grandissantes, les gouvernements imposent de nouvelles restrictions sur les émissions obligeant ainsi les industriels à construire de nouveaux équipements ou à modifier les équipements déjà en place de façon à satisfaire les nouvelles réglementations. Avec les années, la simulation numérique des écoulements fluides (CFD) est devenue un outil d'avant-plan dans la conception des équipements de combustion comme les chaudières à vapeur servant à générer de l'électricité. À titre d'exemple, des études récentes utilisant la CFD sur ce type de chaudières ont été publiées par Abdul Majid *et al.* (2009), Hasini *et al.* (2009) et Razali *et al.* (2009).

Un des buts premiers de l'utilisation des simulations dans la conception des équipements de combustion industrielle consiste à prédire les émissions de polluants et en particulier les émissions d'oxyde d'azote ( $NO_X$ ). Les modèles numériques utilisés pour leur prédiction sont généralement basés sur les mécanismes très connus de Zel'dovich (1946). Nous savons que la formation des  $NO_X$  thermiques se produit dans les régions d'un écoulement où les températures sont assez élevées pour briser le triple lien entre les atomes des molécules d'azote ( $N_2$ ) présentes dans l'air ambiant. Comme discuté dans Kong et Reitz (2003) et dans Haldenwang et Pignol (2002), une résolution adéquate du maillage est nécessaire afin de bien capturer les crêtes de température provenant de la zone de réaction de la flamme. Cette zone, aussi appelée front de flamme, est une région très mince de l'écoulement où le comburant et le carburant se mélangent et où, si les bonnes conditions sont présentes, la majorité de la réaction exothermique se produit. C'est donc dans cette région de l'écoulement que l'on retrouve les crêtes de température. Cette réaction entre le carburant et le comburant se produit à l'échelle moléculaire. Mathématiquement, le front de flamme ne représente pas une discontinuité de l'écoulement, mais, à l'échelle macroscopique du maillage, il peut être considéré comme tel, au même titre qu'un choc aérodynamique.

La résolution du maillage est aussi importante pour la prédiction des émissions de monoxyde de carbone ( $CO$ ). Kong et Reitz (2003) mentionnent que, dans les régions près des murs non adiabatiques, où les températures sont assez basses, un manque



de résolution du maillage augmente la diffusion des températures plus fraîches en s'éloignant du mur, ce qui pourrait avoir pour effet de forcer l'arrêt de la réaction d'oxydation de  $CO$  plus loin du mur qu'en réalité, entraînant ainsi une surprédiction des concentrations de  $CO$ .

Dans le domaine spécifique des chaudières industrielles, l'obtention de résultats de simulations numériques précis reste un défi majeur. En effet, la taille des foyers de ces chaudières peut varier de seulement quelques mètres cubes avec un seul brûleur à quelques milliers de mètres cubes avec seize à vingt brûleurs capables de générer des millions de BTU chacun. L'énorme différence entre le volume du foyer et l'échelle des phénomènes étudiés rend presque impossible la discrétisation du foyer avec des éléments isotropes ayant une résolution assez fine pour obtenir des résultats précis sans générer des dizaines de millions, voire des centaines millions d'éléments. Dans un contexte où l'on veut se servir des résultats de ces simulations pour le design des équipements de combustion, une telle taille de maillage rend impossible la résolution dans un temps acceptable sur des machines des calculs de petite échelle.

Lors de la conception des équipements industriels, une prédiction précise des niveaux de polluants est souvent l'objectif principal d'une simulation de l'écoulement. Comme la prédiction des champs de concentration des espèces polluantes est directement liée à la qualité des solutions des champs de température et de concentrations des espèces chimiques, on pourrait facilement bénéficier de l'implantation d'une méthode d'adaptation de maillage permettant l'obtention de solutions précises des scalaires importants afin de mieux prédire les émissions, et ce, dans des délais raisonnables.

### 1.2.2 Méthodes d'adaptation actuelles

La plupart des maillages utilisés dans les simulations numériques d'écoulements réactifs dans des équipements industriels sont de type hybride. En effet, l'utilisation fréquente des modèles de turbulences tels le  $k$ - $\epsilon$ , qui génèrent des résultats acceptables à peu de coûts, requiert l'imposition de cellules orthogonales à la paroi d'une épaisseur bien contrôlée afin de permettre une imposition correcte des lois de parois logarithmiques. Les maillages hybrides tentent de combiner les avantages des maillages structurés et non structurés en une seule discrétisation de l'espace. Ces maillages permettent de facilement couvrir les domaines complexes avec des éléments non structurés, tout en conservant des éléments structurés dans les régions près des parois.

Plusieurs méthodes d'adaptation de maillages s'appliquant à des écoulements avec

discontinuités sont disponibles, et ont démontré qu’elles sont en mesure de fournir des résultats précis. Cependant, très peu de méthodes ont été développées pour l’adaptation de maillages hybrides. La plupart des méthodes visent à optimiser un seul type d’élément par des opérations de modifications topologiques et/ou géométriques. La simplicité de la définition du simplexe rend facile la détermination de transformations constantes sur chaque élément permettant l’optimisation de sa taille et de sa forme. De plus, sa nature non structurée facilite les changements topologiques. Ces caractéristiques font du simplexe l’élément de choix de la majorité des méthodes d’adaptation. Ceci n’est cependant pas le cas pour les maillages d’éléments non simpliciaux structurés. Généralement, les maillages structurés sont limités à des modifications géométriques seulement, puisque’un changement topologique d’un élément requiert que le même changement soit appliqué sur toute la direction logique dans le bloc structuré. Les opérations de raffinement des maillages structurés deviennent donc rapidement très coûteuses en termes de degrés de liberté et sont très peu utilisées.

Les maillages utilisés dans les simulations de combustion industrielles étant composés de zones de simplexes non structurés combinées avec des zones d’éléments non simpliciaux structurés, il apparaît pertinent de développer une méthode qui permette l’adaptation globale de tous les types d’éléments, de façon à minimiser l’erreur d’interpolation. Cette optimisation doit être faite de façon continue sur tout le maillage

### 1.2.3 Évaluation de la qualité d’un maillage adapté

La capacité de mesurer la qualité des éléments générés lors de l’adaptation d’un maillage apparaît comme un outil essentiel afin de déterminer les gains obtenus grâce à l’adaptation. Comme l’objectif de toute méthode d’adaptation de maillage est de contrôler la précision de la solution et le coût de calcul, il est donc nécessaire que la mesure de qualité soit directement liée à l’algorithme d’optimisation de ces propriétés. Cependant, dans plusieurs méthodes, la façon de décrire la qualité d’un maillage et la fonction d’optimisation sont deux choses distinctes.

Un très grand nombre de critères de qualité des maillages ont été élaborées au cours des dernières années et seront discutés au chapitre suivant. Ces critères sont généralement liés à un aspect spécifique de l’élément, soit sa taille ou sa forme. Cependant, lors de l’utilisation de méthodes d’adaptation anisotrope, les éléments générés doivent satisfaire des critères de taille, de forme et aussi d’orientation. Il devient donc important de mettre au point une mesure quantifiant toutes les déformations possibles

de l'élément par rapport à une spécification des caractéristiques désirées.

Les travaux de Vallet (1992) ont démontré qu'il est possible de spécifier les caractéristiques anisotropes désirées des éléments par une seule entité, soit un tenseur métrique riemannien. Labbé *et al.* (2004) proposent une méthode permettant de mesurer la qualité d'un simplexe comme étant la non-conformité à ce tenseur métrique. Il a été démontré que cette mesure est sensible aux déformations de taille, de forme et d'orientation des éléments simpliciaux. Bien qu'une extension aux éléments non simpliciaux ait été proposée, le comportement de cette mesure, lorsque les éléments non simpliciaux sont soumis à des distorsions ou à des dégénérescences, est inconnu. Dans le cas qui nous intéresse, il est important de posséder une mesure de qualité ayant le même type de comportement pour chaque forme géométrique, de manière à permettre l'adaptation d'éléments adjacents de différents types selon le même critère et ainsi conserver une certaine continuité aux travers de ces interfaces.

Il importe donc de développer un critère de qualité du maillage adapté qui permette de quantifier les effets d'une déformation anisotrope d'un élément quelle que soit sa forme géométrique. La définition du même critère sur tous les types d'éléments permettra de concevoir un algorithme d'adaptation applicable aux maillages hybrides, centré sur l'optimisation de ce critère de qualité.

### 1.3 Objectifs de recherche

Dans le cadre de ce projet, il a été établi que la prédiction des polluants émis par les équipements de combustion industrielle représente un problème important. La qualité de ces prédictions est dépendante de la précision des résultats de simulations numériques des écoulements dans les composantes des systèmes de combustion. Ces écoulements représentent des problèmes multi-échelles très complexes combinés avec des effets de turbulence et de quasi-discontinuité dans les zones de réactions, rendant les simulations coûteuses. Comme ces simulations doivent être généralement faites dans un cycle de design court avec peu de puissance de calcul, l'optimisation du maillage est très avantageuse. Au cours de ce projet, il a été convenu que les maillages utilisés dans les simulations de combustion industrielle étaient hybrides, ceci étant dû à une utilisation de modèles de turbulence avec lois de parois. Dans le cadre de la combustion numérique, le présent ouvrage tient aussi pour acquis l'utilisation du modèle numérique d'équilibre chimique, qui ne tient pas compte des taux de réactions

et ne transporte que la fraction de mélange. De manière à augmenter la précision de ces simulations en minimisant les coûts de calcul, ce projet propose de développer une méthode d'adaptation de maillage anisotrope s'appliquant aux maillages hybrides. Cette méthode utilise un concept d'équidistribution de l'interpolation du maillage afin d'augmenter la précision de la solution, en supposant que la discrétisation est composée d'éléments linéaires générant une solution numérique linéaire par morceaux et donc que l'erreur d'interpolation est majorée par les dérivées secondes de la solution numérique. En résumé, les objectifs à atteindre par ce projet de recherche sont les suivants :

- Élaborer une mesure de qualité des éléments qui doit être cohérente sur tous les éléments simpliciaux et non simpliciaux et qui permet la quantification de la distorsion anisotrope en taille, étirement et orientation par rapport à une spécification requise de ces quantités.
- Concevoir un algorithme d'adaptation de maillages hybrides basé sur l'optimisation de la mesure de qualité précédemment élaborée, en utilisant des opérations topologiques et géométriques sur le maillage de façon à en réduire l'erreur d'interpolation.
- Appliquer l'algorithme d'adaptation de maillage à des simulations numériques de combustion industrielle de façon à augmenter la précision des solutions des variables utilisées pour la prédiction des polluants, tout en minimisant le nombre de degrés de liberté afin de réduire les coûts de calculs.

Lors de l'élaboration de ces objectifs, il était convenu que la validation de l'application de l'algorithme d'adaptation pour des simulations d'équipements de combustion serait effectuée sur des cas en deux et trois dimensions. Pour atteindre cet objectif, il est nécessaire d'avoir accès à un algorithme d'intersection des métriques robuste dans tous les cas. Comme la robustesse de l'algorithme utilisé en trois dimensions était insuffisante lors de la réalisation de ces travaux, l'étude de la validation de l'approche d'adaptation aux cas de combustion se limitera aux simulations en deux dimensions.

## 1.4 Plan de la thèse

Cette thèse est présentée sous forme d'une thèse par articles. Une revue de la littérature sera tout d'abord présentée au chapitre 2 de façon à mettre en contexte les éléments de recherche proposés et développés au cours de ce projet de recherche. Cette

revue sera suivie par un chapitre de synthèse résumant les contributions et les principaux résultats apportés dans chacun des articles scientifiques publiés par le candidat. Une discussion générale suivra au chapitre 4 afin de mettre en perspective l'ensemble des travaux jusqu'ici séparés en trois articles distincts. Un chapitre présentant les conclusions et les recommandations découlant de ce projet de recherche. Pour références, les trois articles scientifiques publiés dans le cadre de ce projet de thèse sont inclus en annexe dans le format de publication pour les deux premiers articles et tel que soumis pour le troisième article.

## Chapitre 2

### REVUE DE LITTÉRATURE

Ce chapitre présente un état de l'art et de la science en lien avec le sujet de cette thèse. Le chapitre passera en revue les travaux faits en parallèle à nos recherches et démontrera comment nous avons su profiter des développements récents dans les sujets connexes. Il montrera aussi que même si ce projet de recherche de doctorat s'est échelonné sur plusieurs années et que les hypothèses et objectifs ont été fixés il y a longtemps, les objectifs ont évolué au rythme des avancées du domaine, et, de fait, les résultats obtenus restent totalement pertinents.

L'adaptation de maillage est un domaine qui prend de plus en plus d'importance dans la communauté des méthodes numériques. De plus en plus de gens font appel à cette discipline, qui montre des résultats très prometteurs, pour optimiser le processus de design en ingénierie. Les méthodes d'adaptation de maillage visent à améliorer la qualité de la solution obtenue sur un maillage par l'entremise d'opérations de raffinement et de déraffinement, et de modifications topologiques et géométriques du maillage ayant servi à calculer la solution de qualité insuffisante. Les modifications apportées à un maillage pour augmenter la qualité d'une solution, ou réduire l'erreur de celle-ci par rapport à la solution exacte, requièrent une façon de mesurer et de représenter cette erreur. De façon complémentaire, la qualité du maillage à adapter doit être évaluée selon une mesure de l'erreur, de manière à guider les modifications à apporter au maillage afin réduire la mesure de l'erreur. Dès lors, une optimisation du maillage est faite en utilisant différentes opérations, qui dépendent en général du type de maillage et de la forme géométrique des éléments.

Comme discuté dans le chapitre précédent, les objectifs de cette thèse sont de développer une méthode d'adaptation de maillages hybrides permettant d'augmenter la précision des résultats à un coût de calcul minimum. Dans le présent chapitre, nous

allons explorer les techniques associées aux différents thèmes reliés à cet objectif. Nous examinerons d'abord les différents types de contrôle de l'erreur d'une solution, pour ensuite étudier les types de mesures de qualité des maillages. Cette revue se conclura par une étude des différentes méthodes d'adaptation de maillage existantes et sur la façon d'appliquer certaines de ces méthodes aux écoulements réactifs.

## 2.1 Estimation de l'erreur d'une simulation numérique en mécanique des fluides

Beaucoup de progrès ont été faits au cours des dernières années dans le domaine de l'estimation de l'erreur d'une solution numérique. Comme dans la majorité des cas, la solution exacte est inconnue, l'erreur de la solution numérique doit être reconstruite à partir des données de la solution numérique et de la discrétisation spatiale disponible. Plusieurs techniques permettant d'estimer de façon anisotrope l'erreur d'une solution numérique sont disponibles. Celles-ci peuvent être regroupées en trois catégories : les méthodes de reconstruction de l'erreur résiduelle, les méthodes de résolution d'un problème dual et les méthodes d'estimation de l'erreur d'interpolation.

### 2.1.1 Reconstruction de l'erreur résiduelle

La première catégorie de méthodes de reconstruction de l'erreur d'une solution numérique englobe les méthodes de reconstruction de l'erreur résiduelle. Ces méthodes tentent d'évaluer le résidu des variables primitives des écoulements de manière à déterminer les endroits où le maillage serait inadéquat. Ces méthodes sont intimement liées aux équations qui sont résolues. Elles doivent donc être développées spécifiquement pour chaque système d'équations aux dérivées partielles. Par exemple, dans le cas des équations d'Euler, Bourgault *et al.* (2009) ont récemment démontré qu'en utilisant un indicateur d'erreur résiduelle basé sur les travaux de Picasso (2003) et Picasso (2006), il est possible de modifier le maillage et ainsi d'augmenter la qualité de la solution numérique. Cet indicateur est une fonction complexe qui nécessite l'évaluation du résidu de toutes les variables représentatives de l'écoulement et qui est aussi fonction de l'erreur de la solution numérique par rapport à la solution exacte qui doit être estimée. L'évaluation de cet indicateur d'erreur peut donc devenir très coûteuse, surtout dans les écoulements complexes.

Pour pallier ce problème, Bourgault *et al.* (2009) n'utilisent qu'une seule quantité qui combine la majorité des variables de l'écoulement, soit le nombre de Mach, afin de n'évaluer qu'un seul résidu. Dans le cas des écoulements réactifs, il serait impossible de faire de même, car aucune variable ou quantité combinant des variables ne permet de détecter tous les effets de turbulence, d'énergie, de changement d'espèces chimique, etc. Cette méthode n'est donc pas envisageable dans un contexte d'écoulements réactifs avec peu de ressources de calcul disponibles. Kunert (2000) et Kunert (2001) appliquent une technique similaire, mais cette fois à l'erreur résiduelle d'équations de type Poisson. À l'heure actuelle, il ne semble pas exister d'estimateur d'erreur anisotrope spécifiquement développé pour les équations de combustion, et le développement d'un tel estimateur pour les besoins de la combustion constituerait le sujet d'un doctorat en soi.

### 2.1.2 Résolution d'un problème dual

Le second type de techniques permettant l'évaluation de l'erreur d'une solution numérique passe par la résolution d'un problème dual afin d'évaluer les effets du maillage actuel sur la solution. Dans cette catégorie, on remarque particulièrement la méthode développée dans Venditti et Darmofal (2003), basée sur les travaux de Giles et Pierce (1999) et de Giles et Pierce (2001). L'idée derrière cette approche est que l'estimation de l'erreur ne devrait pas se faire sur la convergence numérique directe du schéma, mais en évaluant l'erreur sur une fonctionnelle importante dans l'analyse du problème. Dans les cas aérodynamiques par exemple, des fonctionnelles telles que la force de traînée, la force de portance ou le moment de flexion d'une aile pourraient être utilisées. Il s'agit de trouver une fonctionnelle exprimant une quantité de design directement liée aux motivations justifiant la résolution numérique du problème.

Une relation entre les résidus des équations primaires ayant généré la solution et la fonctionnelle choisie, exprimée sur le maillage, peut être trouvée par l'entremise du problème adjoint. Connaissant cette relation, une estimation de l'erreur sur la fonctionnelle est calculée en fonction des résidus de la solution numérique des équations primaires et du problème adjoint. L'indicateur peut ainsi être utilisé dans une méthode d'adaptation de maillage visant à distribuer cette erreur sur le maillage. De très bons résultats peuvent être obtenus grâce à ce type de méthodes, comme le démontrent les travaux de Balasubramanian et Newman III (2006) et de Fang *et al.* (2009).



On pourrait inclure dans cette catégorie les travaux de Becker et Rannacher (1996) et de Formaggia *et al.* (2004), qui présentent une méthode d'analyse de l'erreur résiduelle, mais pondérée par le problème dual construit à l'aide des variables importantes issues de l'analyse de la solution. Récemment, une extension de cette technique aux équations non linéaires a été proposée par Loseille *et al.* (2010).

Cette catégorie de méthodes présente deux désavantages majeurs par rapport aux objectifs fixés dans la présente étude. Tout d'abord, l'évaluation du problème adjoint ou dual est coûteuse, car elle nécessite la résolution numérique d'un autre système d'équations sur le maillage devant être adapté. Le principal désavantage reste le manque de généralité de la méthode. En effet, celle-ci est encore une fois directement liée aux équations résolues et à l'objectif de la simulation.

### 2.1.3 Estimation de l'erreur d'interpolation

La dernière catégorie de méthodes comprend celles qui tentent d'estimer l'erreur d'interpolation d'une solution sur un maillage. Pour une solution obtenue sur maillage composé d'éléments linéaires, un développement en série de Taylor de l'erreur de la solution est majoré par la dérivée seconde de la solution calculée. L'estimation de l'erreur d'interpolation passe donc directement par la reconstruction de la matrice hessienne de la solution numérique.

Plusieurs techniques d'estimation de ce type d'erreur sont disponibles. Frey et Alauzet (2005), Huang (2005), Huang *et al.* (2010) et Agouzal *et al.* (2010), décrivent plusieurs méthodes de reconstruction, pour la plupart reliées aux travaux de Zienkiewicz et Zhu (1987). Ces méthodes utilisent généralement l'échantillonnage de la solution numérique d'une variable sélectionnée sur le voisinage d'un sommet. Les valeurs récupérées sont ensuite utilisées pour construire des fonctions polynomiales qui décrivent cette solution sur le voisinage en question. Les dérivées premières et secondes de la solution numérique peuvent ensuite être reconstruites par dérivation de ces fonctions polynomiales. Par ailleurs, Naga et Zhang (2005) ont proposé une technique de reconstruction des dérivées, encore une fois basée sur un estimateur de type Zienkiewicz et Zhu (1987), pour laquelle il a été démontré dans Vallet *et al.* (2007) que la précision obtenue était indépendante de la valence du voisinage et de l'étirement des éléments.

Les travaux de Castro-Díaz *et al.* (1997), Habashi *et al.* (2000) et Dompierre *et al.* (2002) ont aussi montré qu'il est possible de contrôler un maillage de façon anisotrope

en utilisant une métrique riemannienne construite à partir de la matrice hessienne de la solution numérique. Cette approche est simple, peu coûteuse à calculer et permet facilement d'exprimer l'anisotropie.

#### **2.1.4 Choix de l'approche d'estimation de l'erreur**

L'un des objectifs principaux de cette thèse étant d'appliquer l'optimisation de maillage par adaptation à une solution à des cas de combustion industrielle, il importe de faire un choix de technique d'estimation de l'erreur dans le but de satisfaire cet objectif. Dans le domaine des simulations de combustion industrielle, nous devons tenir compte du fait que beaucoup de choses peuvent varier d'une simulation à l'autre. Pour les techniques de minimisation de l'erreur résiduelle et de résolution du problème dual, chaque changement de modèle numérique, ajout d'équation de transport ou changement des espèces en présence, requiert une nouvelle définition du système d'équations résiduelles et du problème dual. Ces deux techniques n'offrent donc pas la généralité désirée dans le cadre de ce projet, sans compter qu'elles sont généralement très gourmandes. La technique par estimation de l'erreur d'interpolation apparaît comme la plus avantageuse par rapport aux objectifs de ce projet, puisque qu'elle ne dépend pas des équations, mais seulement de l'estimation de l'erreur sur la solution, tout en étant robuste et peu coûteuse. Dans tous les cas présentés dans cet ouvrage qui utilisent une estimation sur une solution numérique, celle-ci sera donc faite en utilisant un estimateur de type Zhu-Zienkiewicz, qui offre les meilleurs résultats, développé dans Naga et Zhang (2005).

## **2.2 Mesure et contrôle de qualité d'un maillage**

Plusieurs mesures de qualité seront d'abord discutées afin de permettre de comprendre ce qu'est un bon maillage. Ceci nous amènera à expliquer le concept de contrôle du maillage. Par contrôle, on entend ici décrire une méthode permettant de spécifier localement sur le maillage les caractéristiques désirées des éléments afin d'en maximiser la qualité. Ce contrôle sera effectué au moyen d'une métrique construite à partir de l'estimation de l'erreur de la solution ou autre type de fonction. Une mesure de qualité basée sur le concept de métrique riemannienne sera ensuite discutée.

### 2.2.1 Mesures de qualité

Depuis les débuts de la génération de maillage, avant même l'adaptation de maillage, la mesure de la qualité a toujours été une question importante. À l'origine, lors de la génération de maillages structurés de façon manuelle, des mesures de forme furent utilisées pour vérifier que les topologies de blocs choisies ne généraient pas des éléments invalides. Dans le cas des maillages non structurés, la génération est faite de façon automatique et des mesures de qualité sont généralement utilisées pour garantir une régularité de forme et de taille lors de l'insertion de sommets. Habituellement, la qualité de taille d'un élément est tout simplement mesurée en comparant la longueur de ses arêtes à une valeur moyenne ou en comparant le volume de l'élément à une valeur choisie. Dans le cas de la qualité de forme, plusieurs auteurs se sont penchés sur la question et en sont venus à établir quelques critères sur les simplexes.

En sachant que pour tout simplexe  $K$  il existe une transformation linéaire entre celui-ci et un élément de référence, usuellement le simplexe équilatéral unitaire, on définit la métrique de cette transformation élémentaire comme étant :

$$\mathcal{M}_K = \mathcal{J}^T \mathcal{J} \quad (2.1)$$

où  $\mathcal{J}$  est la matrice jacobienne de la transformation. Cette métrique peut ensuite être diagonalisée pour obtenir

$$\mathcal{M}_K = \mathcal{R}^T \Lambda \mathcal{R} \quad (2.2)$$

où  $\Lambda$  est la matrice diagonale contenant les valeurs propres de la métrique décomposée et  $\mathcal{R}$  les vecteurs propres qui leur sont associés.

La plus connue des mesures basées sur cette transformation linéaire est celle du facteur de forme de Liu et Joe (1994) défini par :

$$\eta = \frac{\left(\prod_{i=1}^d \lambda_i\right)^{\frac{1}{d}}}{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \lambda_i} \quad (2.3)$$

où  $\lambda_i$  sont les valeurs propres de la métrique de l'élément et  $d$  la dimension du problème. Apparenté à ce facteur, on retrouve le facteur d'étirement de Formaggia et Perotto (2000), qui est simplement un ratio de la plus grande valeur propre de l'élément à la plus petite. Similairement, Knupp (2000) et Freitag et Knupp (2002) présentent une mesure de forme des éléments basée sur le conditionnement de la ma-

trice jacobienne de la transformation du simplexe vers l'élément de référence éléments finis.

Dompierre *et al.* (2005) présentent une revue exhaustive de plusieurs techniques, telles que la mesure de l'angle dièdre, des angles solides et du rapport des longueurs des arêtes. Mais dans tous les cas, ces mesures sont très simples et permettent de caractériser seulement la forme ou la taille d'un élément. Dans le cas de l'adaptation de maillage, on désire optimiser la taille, la forme et l'orientation de chaque élément, par rapport à une spécification de ces caractéristiques, à l'aide d'une seule mesure. Une mesure comportant toutes ces caractéristiques, ainsi que le moyen de les comparer à une spécification, doit donc être développée, et ce, pour tous les types d'éléments et non pas seulement pour les simplexes, comme dans les exemples présentés ici.

### 2.2.2 Contrôle du maillage par métrique riemannienne

Pour effectuer de l'adaptation de maillage anisotrope, il faut se munir d'une manière de décrire les caractéristiques de chaque élément pour en évaluer la qualité et spécifier un objectif. Durant les dernières années, l'utilisation de métriques riemanniennes pour décrire ces caractéristiques a énormément gagné en popularité. Cette technique fut originalement élaborée par Vallet (1992). Plus récemment, les travaux de George et Borouchaki (1997) et de Frey et George (1999) ont démontré que l'utilisation d'une métrique riemannienne comme spécification pour l'adaptation permet le contrôle de toutes les caractéristiques des éléments, soit leur taille, étirement et orientation, en n'utilisant qu'une seule entité.

#### Définition de la métrique

La métrique riemannienne est un tenseur symétrique défini positif représentant une transformation linéaire de l'espace au point où ce tenseur est défini. On peut utiliser ce type de tenseur pour décrire la transformation d'un élément vers un élément de référence et aussi pour spécifier quelle devrait être cette transformation pour que l'élément soit de grande qualité. On voit ici apparaître la notion de métrique courante  $\mathcal{M}_K$ , utilisée par exemple dans Formaggia et Perotto (2000) et celle de métrique spécifiée  $\mathcal{M}_s$ , proposée par Vallet (1992).

L'équation de décomposition 2.2 s'applique à toute métrique  $\mathcal{M}$ . Cette décomposition permet de décrire toutes les caractéristiques anisotropes des éléments. Chaque

valeur propre est directement liée à la longueur de l'élément dans la direction du vecteur propre associé par :

$$\lambda_i = \frac{1}{h_i^2} \quad (2.4)$$

où  $\lambda_i$  est la  $i$ ème valeur propre et  $h_i$  la longueur élémentaire qui lui est associée. L'étirement se définit comme le rapport de la plus grande sur la plus petite des longueurs  $h_i$ , et l'orientation de l'élément est décrite par l'orientation des vecteurs propres dans l'espace.

### La métrique spécifiée et sa construction

La métrique riemannienne devient donc un bon véhicule pour spécifier les caractéristiques désirées du maillage. La métrique spécifiée  $\mathcal{M}_s$  est un champ tensoriel défini sur le maillage avant adaptation. Cette métrique peut provenir de plusieurs sources. On pourrait par exemple vouloir adapter un maillage à des caractéristiques de la géométrie en utilisant la courbure du domaine ou tout simplement des fonctions analytiques si l'utilisateur possède une connaissance *a priori* de la solution exacte. Comme discuté à la section 2.1.3, les travaux de cette thèse visent à réduire l'erreur d'interpolation causée par une mauvaise résolution du maillage pour une solution exacte inconnue. Pour ce faire, une solution numérique sur une ou plusieurs variables primitives permettront de calculer une métrique dite *a posteriori* qui deviendra spécification des caractéristiques désirées des éléments lors de l'adaptation.

Dans le cas où la solution est linéaire par morceau, c'est à dire construite sur un maillage composé d'éléments linéaires, il a été établi que l'erreur d'interpolation est majorée par la dérivée seconde de la solution numérique. Celle-ci doit être estimée à l'aide d'une méthode telle que celle décrite dans Naga et Zhang (2005). Selon Vallet (1992), la matrice hessienne des dérivées secondes estimées peut être directement utilisée pour construire la métrique spécifiée. En satisfaisant ce champ métrique, l'erreur d'interpolation sera équidistribuée sur le maillage et la qualité de la solution sera ainsi améliorée. Comme la matrice hessienne n'est pas nécessairement définie positive, on doit y appliquer certaines modifications pour la rendre métrique. Pour ce faire, selon Joubarne (2008), la matrice hessienne est décomposée selon l'équation 2.2 et les

valeurs propres obtenues sont ensuite forcées positives pour obtenir :

$$\Lambda = \begin{pmatrix} |\lambda_1| & 0 & 0 \\ 0 & |\lambda_2| & 0 \\ 0 & 0 & |\lambda_3| \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

À partir de ce moment, la recombinaison des trois matrices produit une métrique riemannienne spécifiée  $\mathcal{M}_s$ .

### Traitements apportés aux métriques spécifiées

L'utilisation directe de telles métriques pourrait engendrer des résultats non désirés lors de l'adaptation. Il est entre autres nécessaire de limiter la taille des éléments afin d'obtenir partout des éléments d'une taille raisonnable. Sachant que la taille des éléments est liée à la métrique par l'équation 2.4, la limitation de taille est faite selon Dompierre *et al.* (2005) :

$$\lambda_i = \min \left( \max \left( \lambda_i, \frac{1}{h_{max}^2} \right), \frac{1}{h_{min}^2} \right) \quad (2.6)$$

où  $h_{max}$  and  $h_{min}$  sont choisies par l'utilisateur en fonction du problème étudié.

Une métrique peut aussi être lissée pour réduire les variations trop accentuées entre les tailles et les orientation désirées pour des points adjacents. Plusieurs méthodes, telles que le lissage directionnel proposé par Borouchaki *et al.* (1998), le lissage des volumes de Joubarne (2008) et le lissage de taille et de direction de Li *et al.* (2004), peuvent être citées. Joubarne (2008) a comparé ces trois méthodes et mentionne que le lissage de taille et de forme permet d'obtenir les meilleurs résultats, tout en étant la seule méthode qui considère à la fois la taille et la forme des éléments. Cette méthode consiste, pour deux métriques adjacentes, à mesurer le rayon des ellipsoïdes définis par les deux métriques selon l'axe reliant le centre des deux ellipsoïdes et, si le ratio des deux rayons est trop grand, à réduire le plus grand rayon afin de respecter le ratio maximum. Les volumes des deux ellipsoïdes sont ensuite comparés, et, encore une fois, le plus grand volume est réduit pour respecter le ratio maximum. Cette technique sera utilisée dans ce travail afin d'empêcher les variations trop importantes de la métrique spécifiée au travers des discontinuités de l'écoulement tels les chocs ou les fronts de flamme.

Le dernier traitement appliqué est celui de la mise à l'échelle d'une métrique. Cette technique, développée par Joubarne (2008), permet à l'utilisateur de spécifier un nombre d'éléments désiré dans le maillage résultant. Ainsi, la mise à l'échelle modifie la métrique de la façon suivante :

$$\mathcal{M}_s = \left( \frac{\text{Nombre d'éléments désiré}}{\text{Estimation du nombre d'éléments à créer}} \right)^{\frac{2}{3}} \mathcal{M}_s. \quad (2.7)$$

Cette technique permet de limiter l'augmentation du nombre d'éléments lors des étapes d'adaptation et ainsi de ne pas dépasser les limites de temps et de ressources de calculs disponibles. Comme l'un des objectifs du présent travail est de démontrer l'efficacité de l'adaptation pour un nombre minimum de degrés de liberté, ce traitement sera appliqué aux différentes métriques utilisées afin de conserver un nombre d'éléments le plus bas possible.

### 2.2.3 Mesures de qualité dans l'espace de la métrique

En utilisant une méthode de contrôle basée sur les métriques riemanniennes, il est maintenant possible d'exprimer les mesures de qualité discutées plus haut en utilisant les notions de distance et d'angle mesurés dans un espace métrique. Selon Dompierre *et al.* (2005), toutes les mesures de qualité basées sur des quantités géométriques peuvent être exprimées dans l'espace de la métrique spécifiée et ainsi permettre de vérifier quelles améliorations au maillages sont requises. Cependant, la majorité de ces mesures ne s'applique qu'aux simplexes, et quand ces mesures s'appliquent à d'autres types d'éléments, elles ne s'appliquent pas nécessairement de façon similaire sur des éléments de types différents, les rendant inutilisables pour de l'adaptation sur des maillages hybrides. De plus, ces mesures sont souvent capables de quantifier les distorsions associées uniquement soit à la forme, soit à la taille des éléments. Un processus d'adaptation de maillage anisotrope devra donc utiliser plusieurs des ces mesures simultanément. Sachant que la métrique riemannienne regroupe en une seule entité toutes les informations nécessaires pour contrôler l'adaptation anisotrope, il devient intéressant d'étudier une mesure de qualité directement associée à celle-ci.

### 2.2.4 Non-conformité à une métrique riemannienne

Comme discuté précédemment, une mesure de qualité basée sur la notion de métrique riemannienne est désirée. Plusieurs méthodes de mesure ont été évaluées par Bottasso (2004), mais la plus intéressante est sûrement la mesure de non-conformité à une métrique riemannienne élaborée par Labbé *et al.* (2004).

Cette mesure stipule qu'un élément de parfaite qualité est celui qui satisfait exactement une métrique riemannienne spécifiée. Pour ce faire, on doit comparer la métrique courante, celle qui transforme l'élément en son élément de référence, et la métrique spécifiée au même endroit. Un élément de qualité doit satisfaire l'égalité suivante :

$$\mathcal{M}_K = \mathcal{M}_s. \quad (2.8)$$

Deux résidus peuvent être obtenus à partir de cette égalité :

$$\mathcal{M}_K \mathcal{M}_s^{-1} - I = 0 \quad (2.9)$$

et

$$\mathcal{M}_s \mathcal{M}_K^{-1} - I = 0. \quad (2.10)$$

En les additionnant, on obtient le tenseur de non-conformité, qui est en quelque sorte une mesure de distance tensorielle entre la métrique courante et la métrique spécifiée pour un élément donné :

$$T_{NC} = \mathcal{M}_s^{-1} \mathcal{M}_K + \mathcal{M}_K^{-1} \mathcal{M}_s - 2I. \quad (2.11)$$

Ensuite, la norme de Frobenius est appliquée sur le tenseur de non-conformité pour obtenir une valeur unique du coefficient de non-conformité de l'élément  $K$  :

$$\varepsilon_K = ||T_{NC}|| = \sqrt{\text{tr}(T_{NC}^T T_{NC})}. \quad (2.12)$$

La valeur obtenue est nulle pour un élément satisfaisant la métrique spécifiée et tend vers l'infini quand l'élément s'éloigne de l'état parfait.

### Non-conformité d'un simplexe

Labbé *et al.* (2004) appliquent directement la mesure de non-conformité aux sim-



plexes. Usuellement, la métrique spécifiée provient d'une solution numérique et est disponible aux sommets du maillage. La métrique varie donc sur l'élément. Pour évaluer la non-conformité sur un simplexe, le tenseur métrique spécifié moyen est utilisé, et l'égalité 2.8 devient :

$$\mathcal{M}_K = \overline{\mathcal{M}_s} \quad (2.13)$$

où  $\overline{\mathcal{M}_s}$ , la métrique spécifiée moyenne sur l'élément  $K$ , est calculée ainsi :

$$\overline{\mathcal{M}_s} = \int_K \mathcal{M}_s(\vec{x}) dK / \int_K dK \quad (2.14)$$

pour obtenir le tenseur de non-conformité suivant :

$$T_{NC} = \overline{\mathcal{M}_s}^{-1} \mathcal{M}_K + \mathcal{M}_K^{-1} \overline{\mathcal{M}_s} - 2I. \quad (2.15)$$

Labbé *et al.* (2004) présentent des résultats convaincants pour les simplexes. En effet, la notation tensorielle de cette mesure permet de détecter toutes les distorsions d'un élément par rapport à la spécification des caractéristiques désirées. Cette technique sera donc directement utilisée pour mesurer la qualité des simplexes tout au long de cet ouvrage.

### Non-conformité d'un non simplexe

Pour être complètement utilisable sur des maillages hybrides, la mesure de non-conformité doit offrir un comportement similaire sur les éléments non simpliciaux. Labbé *et al.* (2004) suggèrent une extension mathématique de sa mesure de non-conformité, sans toutefois l'avoir implantée ou validée. Dans le cas des éléments non simpliciaux, on sait que la métrique courante varie aussi sur l'élément. L'égalité 2.8 devient :

$$\mathcal{M}_K(\vec{x}) = \mathcal{M}_s(\vec{x}) \quad (2.16)$$

et le tenseur de non-conformité proposé est :

$$T_{NC} = \int_K (\mathcal{M}_s^{-1}(\vec{x}) \mathcal{M}_K(\vec{x}) + \mathcal{M}_K^{-1}(\vec{x}) \mathcal{M}_s(\vec{x}) - 2I) dK / \int_K dK. \quad (2.17)$$

Comme aucune validation sur cette mesure n'est disponible, une section du chapitre 3 sera consacrée à la validation d'une extension de la mesure de non-conformité aux

éléments non simpliciaux.

## 2.3 Techniques d'adaptation de maillage

Après avoir passé en revue les différentes techniques d'estimation de l'erreur d'une solution numérique et les différentes manières de les intégrer dans une technique de contrôle des caractéristiques des éléments du maillage, il est temps de jeter un coup d'oeil aux différentes façons d'adapter le maillage. Par techniques d'adaptation de maillage, on entend ici les différentes façons de modifier un maillage existant ou d'en générer un nouveau de manière à satisfaire un ou des critères spécifiques locaux. Par exemple, un simple lissage de Laplace (Knupp et Steinberg (1994)), qui déplace chacun des sommets du maillage en les positionnant au centre géométrique de ses voisins, où l'objectif est d'obtenir des éléments de la forme la plus régulière possible, pourrait donc être considéré comme une méthode d'adaptation de maillage. On peut mentionner d'autres techniques de génération de maillage qui peuvent être considérées comme des méthodes d'adaptation de maillage. La plus connue est certainement la méthode utilisant le générateur elliptique de Thompson *et al.* (1985), qui lisse un maillage initial structuré, usuellement généré par interpolation transfinie des frontières, en résolvant les équations de Laplace dans le domaine paramétrique du maillage. Cette technique est reconnue pour toujours générer des maillages de quadrilatères valides et très lisses.

Dans le contexte des travaux de recherche présentés dans ce document, nous considérerons particulièrement les techniques d'adaptation de maillage qui permettent l'imposition d'une spécification quelconque choisie par l'utilisateur. Ceci permettra de choisir les fonctions coûts, les poids, ou toutes autres valeurs afin de modifier le maillage de manière à minimiser l'erreur de discrétisation et ainsi augmenter la qualité de la solution numérique. Nous verrons dans cette section comment différentes techniques s'appliquent aux maillages structurés, non structurés ou hybrides. Cette nomenclature des techniques permettra ainsi de positionner l'algorithme d'adaptation développé au cours de ce projet par rapport à ce qui se fait dans le domaine.

### 2.3.1 Application aux maillages structurés

Les maillages structurés constituent une catégorie de maillages très restrictive. Leur structure logique intrinsèque permet certainement de très bonnes performances

lors de la résolution, mais la topologie fixe de ces maillages peut devenir restrictive dans le cas de la génération et de l'adaptation de maillage. En effet, les opérations les plus efficaces servant à modifier la densité des sommets dans une région donnée sont sûrement les opérations de raffinement et de déraffinement du maillage. Dans un maillage structuré, il est possible de raffiner, mais l'ajout d'un sommet doit être répété dans toutes les directions logiques par l'ajout de plusieurs autres sommets de manière à générer une nouvelle structure implicitement valide. Ceci peut devenir trop coûteux dans un maillage où le nombre de sommets est élevé selon chaque direction. Pour cette raison, la plupart des méthodes d'adaptation proposées pour les maillages structurés sont des méthodes de lissage qui consistent à déplacer les sommets existant dans le maillage en conservant la connectivité implicite des éléments et le nombre de degrés de liberté fixe.

### 2.3.2 Méthodes de lissage

Comme le lissage est la technique la plus utilisée et la plus efficace pour modifier la qualité d'un maillage structuré, tout en étant généralement applicable aux maillages non structurés, l'algorithme d'adaptation proposé dans ce travail sera une méthode de lissage qui pourra aussi s'appliquer aux régions structurées d'un maillage hybride. Il est donc important de faire une étude plus approfondie des techniques de lissage des maillages développées en particulier pour l'adaptation *a posteriori*.

#### Lissage elliptique

Sans doute la méthode la plus utilisée sur des maillages uniquement structurés, la méthode de lissage elliptique de Thompson *et al.* (1985), où les équations de Laplace dans chaque direction du domaine paramétrique régissent les mailles, est reconnue pour garantir des maillages très lisses et toujours valides. Pour contrôler le lissage, l'équation de déplacement des mailles devient l'équation de Poisson dans le domaine paramétrique, contrairement à l'équation de Laplace lors du simple lissage. L'équation de Poisson s'écrit :

$$\nabla^2 \xi^i = P^i \quad (2.18)$$

où les  $\xi^i$  sont les coordonnées paramétriques et les  $P^i$  sont les termes sources. Pour obtenir la position de chaque sommet dans l'espace euclidien, on inverse l'équation de Poisson pour définir la position des sommets en fonction du domaine paramétrique

et ainsi obtenir :

$$g^{ij} \frac{\partial^2 x^p}{\partial \xi^i \partial \xi^j} + g^{kk} P_k \frac{\partial x^p}{\partial \xi^i \partial \xi^j} = 0 \quad (2.19)$$

en utilisant la notation d'Einstein pour les sommations sur  $i$ ,  $j$  et  $k$ . Chaque terme de la métrique contravariante  $g$  se définit en 2D comme étant :

$$g^{ij} = \sum_{p=1}^d \frac{\partial^2 x^p}{\partial \xi^i \partial \xi^j}. \quad (2.20)$$

Le terme source  $P_k$  de l'équation 2.19 est ensuite utilisé pour spécifier des lois de concentrations ou pour faire l'adaptation selon des quantités spécifiques. Cette technique est généralement utilisée sur des maillages structurés. On peut tout de même mentionner que Knupp (1999) a démontré que le lissage elliptique peut aussi être appliqué sur des maillages non structurés en deux dimensions. Les développements sont toutefois embryonnaires et reposent sur des hypothèses très restrictives.

À l'origine, ces fonctions de poids ont été conçues par Eiseman (1983) pour exprimer des fonctions de concentrations prescrites lors de la génération maillage. Il faut remarquer que l'addition du terme source comme fonction de contrôle fait perdre la propriété de l'équation de Laplace qui garantissait la non-inversion de mailles lors du lissage. Il faut donc faire un choix judicieux de fonction de contrôle ou contraindre le lissage à conserver des éléments valides.

Plus tard, Eiseman (1987) a publié une version généralisée des fonctions de poids elliptiques pouvant être utilisées pour de l'adaptation. Ces fonctions s'écrivent :

$$P_i = \frac{g^{ij} \frac{\partial W_i}{\partial \xi^i}}{g^{ii} W_i}. \quad (2.21)$$

Dans Soni *et al.* (2000) et McRae (2000), cette technique est utilisée pour adapter un maillage à une solution. Les poids  $W_i$  sont construits à partir des gradients des variables de la solution numérique initiale. Dans le cas de la méthode de Soni *et al.* (2000), les auteurs mentionnent que les tests ont démontré que ces fonctions de poids ont tendance à être instables dans les régions de forts gradients, là où les poids deviennent trop grands. Cette instabilité rend son utilisation inadéquate dans le cadre de la combustion, où le front de flamme est une région de l'écoulement qui comprend de très forts gradients de plusieurs variables.

On peut aussi mentionner les travaux de Spekrijse *et al.* (1996), qui utilisent

une approche quelque peu différente. La solution du maillage initial est utilisée pour construire une surface en trois dimensions dont la base est de la même dimension que le domaine paramétrique et la hauteur donnée par les valeurs de la solution. En projetant la paramétrisation de la surface 3D sur le domaine paramétrique en deux dimensions de l'équation de Laplace, le maillage de celle-ci devient anisotrope en fonction du gradient de la solution et le maillage final est reconstruit en respectant l'équation de Laplace. La combinaison de ces deux étapes conduit à en une équation de Poisson, mais avec des fonctions coûts beaucoup plus stables. Quoi qu'il en soit, le lissage elliptique reste toujours fortement lié à une structure en bloc de la géométrie, qui peut être très difficile à générer dans les géométries très complexes comme les chaudières à vapeur.

### **Lissage par analyse variationnelle**

Une autre approche de lissage qui vaut la peine d'être mentionnée est l'approche par analyse variationnelle. Cette méthode est en fait une généralisation de la génération d'équations de mailles comme le lissage elliptique de Thompson. Comme décrit dans Knupp et Steinberg (1994), cette technique consiste à imposer une fonctionnelle, ou une combinaison de fonctionnelles avec ou sans contraintes qui représentent les caractéristiques désirées du maillage. Les équations d'Euler-Lagrange sont ensuite appliquées pour obtenir le système d'équations minimisant la fonctionnelle choisie. Un schéma par différences finies et usuellement utilisé pour résoudre ces équations dans le cas des maillages structurés, mais la résolution par éléments finis doit être envisagée dans le cas des maillages non structurés. Cependant, il va de soit qu'une telle approche peut rendre l'optimisation d'un maillage très coûteuse.

On peut noter les travaux de Cabello (1990), qui utilise une fonctionnelle décrivant l'énergie de déformation de chaque maille en la comparant à une membrane élastique en étirement par rapport à son état d'équilibre. Branets et Carey (2005) utilisent une formulation variationnelle composée de fonctionnelles elliptiques et démontrent que la fonctionnelle de Winslow permet d'obtenir les équations de mailles elliptiques de Thompson *et al.* (1985) lorsqu'elles sont minimisées. Ils définissent aussi d'autres méthodes isotropes en quantifiant la déformation des éléments, un peu comme Cabello. Jiao *et al.* (2008) ont récemment démontré que l'utilisation de l'énergie de déformation pouvait être inscrite dans une méthode générale de lissage variationnelle où la déformation est mesurée par rapport à une énergie choisie, le tout sur des

maillages structurés et non structurés

Quoique très générales, les méthodes variationnelles imposent des contraintes mathématiques, et non géométriques, qui sont difficiles à contrôler. Pour cette raison, ces méthodes sont généralement peu utilisées lors de l'adaptation anisotrope où une spécification des propriétés géométriques des éléments doit être faite. Le temps de calcul nécessaire pour optimiser les maillages non structurés, en étant forcé de résoudre les équations de mailles par une méthode d'éléments finis, peut également restreindre les possibilités d'application de ces techniques.

### **Lissage par optimisation de fonction coût**

Cette catégorie de méthodes est certainement la plus utilisée de nos jours. Elle consiste à choisir une fonction coût quelconque et à en faire la minimisation sur chaque sommet ou élément. Cette fonction coût peut être liée à la forme de l'élément, à sa taille ou à toute autre mesure de qualité sur le sommet ou l'élément comme l'ont démontré Amenta *et al.* (1997, 1999). Les méthodes les plus efficaces dans un domaine euclidien sont les méthodes de Laplace intelligentes de Freitag (1997) et de Freitag et Plassmann (2000), plus récemment reprises dans les travaux de Escobar *et al.* (2003) et de Montenegro *et al.* (2005). La méthode de Laplace intelligente utilise un lissage de Laplace, qui positionne le sommet au centre géométrique de ses voisins en mesurant la qualité de l'élément obtenu selon un critère d'angle minimum. Lorsque le lissage de Laplace détériore les éléments, une optimisation est faite sur une fonction coût qui maximise l'angle minimum autour du sommet en mouvement. Cette astuce permet de n'utiliser la méthode coûteuse d'optimisation que dans les endroits nécessaires, rendant le lissage très rapide et très efficace lors de la génération d'un maillage initial. Cependant, une telle approche est inutile lors de l'adaptation *a posteriori*, qui nécessite que le déplacement des sommets soit fait selon la même fonction coût, et non pas par deux techniques différentes, pour s'assurer d'une satisfaction uniforme du critère choisi.

Il existe aussi une série de méthodes basées sur des analogies physiques. Parmi celles-ci, on peut nommer l'analogie des ressorts de Habashi *et al.* (2000) et de Ait-Ali-Yahia *et al.* (2002), l'analogie des ressorts de torsion de Zhou et Shimada (2000) et l'analogie des particules de Bossen (1996). Ces méthodes fonctionnent toutes selon le principe de la minimisation d'un type d'énergie potentielle autour d'un sommet. Dans le cas de l'analogie des ressorts, la position du sommet est trouvée au point

d'équilibre d'un réseau de ressorts représentés par chacune des arêtes connectées au sommet. Les ressorts de torsion, quant à eux, sont reliés aux angles entre les arêtes. Pour l'analogie des particules, chaque arête représente un lien chimique pondéré par un potentiel chimique. Ces méthodes sont facilement utilisables dans un contexte d'adaptation en définissant les potentiels ou les constantes des ressorts en fonction des longueurs des arêtes ou d'autres quantités mesurées dans l'espace de la métrique riemannienne. Sirois *et al.* (2002) ont cependant démontré que les méthodes basées sur les longueurs des arêtes ne donnent aucune garantie sur la validité du maillage résultant ni sur la qualité de forme de éléments.

Il est aussi possible d'implanter des techniques par optimisation de propriétés matricielles des éléments, tel, le nombre de conditionnement de la matrice jacobienne utilisé par Freitag et Knupp (2002) et Knupp (2003). Dompierre *et al.* (2005) ont montré que ce critère de forme élémentaire peut effectivement être exprimé dans l'espace de la métrique spécifiée afin d'optimiser la forme des éléments anisotropes adaptés. Vu la simplicité de l'implantation et de l'utilisation des méthodes par optimisation pour l'adaptation, il devient intéressant de développer une méthode de ce type pour optimiser la non-conformité à une métrique riemannienne.

### 2.3.3 Application aux maillages non structurés

L'adaptation des maillages non structurés est, quant à elle, beaucoup moins restrictive. La spécificité des maillages non structurés réside dans le fait que la connectivité à chaque sommet est variable et stockée de façon explicite contrairement aux maillages structurés. Ceci permet de modifier facilement la connectivité initiale en raffinant ou en déraffinant les éléments, ou en modifiant la topologie des éléments en renversant des arêtes ou des faces pour en améliorer la forme. Li *et al.* (2005) proposent de classer les méthodes d'adaptation des maillages non structurés en trois catégories soit la régénération adaptative, la subdivision élémentaire et la combinaison de plusieurs types de modifications locales.

#### Regénération adaptative

Les méthodes de régénération adaptative, comme leur nom l'indique, régénèrent un nouveau maillage à chaque étape d'adaptation en fonction de la solution obtenue sur le maillage précédent. On retrouve majoritairement dans cette catégorie les al-

algorithmes développés dans George et Borouchaki (1998), Borouchaki et Frey (1998) et Borouchaki *et al.* (2005), basés sur la mesure du noyau de Delaunay dans l'espace de la métrique riemannienne spécifiée. Le noyau, une fois transformé dans l'espace euclidien, devient une ellipse ou un ellipsoïde. Le maillage est ensuite généré en utilisant le critère de Delaunay. Ce critère dicte qu'aucun sommet du maillage ne doit se retrouver dans le noyau d'un élément dont il ne fait partie. Le résultat est un maillage anisotrope adapté à la métrique spécifiée satisfaisant le critère de Delaunay dans l'espace de la métrique spécifiée.

### Subdivision élémentaire

La deuxième catégorie de méthodes considère les méthodes d'adaptation par subdivision des éléments. On peut citer parmi ces techniques les travaux de Liu et Joe (1994) et de Rivara (1999). En général, ces techniques subdivisent les éléments en fonction d'un critère de taille. Le résultat est souvent isotrope et, généralement, le déraffinement n'est pas possible, sauf dans les régions déjà raffinées par rapport au maillage initial. Cette approche adaptative n'est pas optimale et est généralement combinée avec d'autres méthodes pour améliorer le résultat et ainsi obtenir une méthode de la troisième catégorie.

### Combinaison de plusieurs types de modifications locales

La dernière catégorie de méthodes d'adaptation de maillages non structurés consiste à combiner dans un ordre fixe des opérations de raffinement, de déraffinement, de modifications topologiques et géométriques. Généralement, les méthodes de raffinement et de déraffinement sont tout d'abord utilisées pour optimiser la densité des sommets spécifiée par la métrique ou par un autre type de spécification. La forme des éléments est ensuite optimisée par des modifications topologiques, tel le renversement de faces et d'arêtes. On termine par un lissage géométrique qui déplace les sommets pour permettre d'augmenter au maximum la qualité du maillage. Les travaux de Buscaglia et Dari (1997), de Castro-Díaz *et al.* (1997) et de Dompierre *et al.* (2002) ont démontré que ces techniques permettent d'obtenir d'excellents résultats en des temps de calcul raisonnables. Les résultats obtenus sont comparables en termes de qualité à ceux des méthodes de régénération adaptative.

La bibliothèque d'adaptation de maillage *OORT* (*Object-Oriented Remeshing*



*Toolkit*) développée au Laboratoire de recherche en maillage et géométrie numérique (MAGNU) de l'École Polytechnique de Montréal s'inscrit dans cette catégorie. Cette bibliothèque implémente différents algorithmes d'adaptation de maillage dans un canevas orienté-objet, qui permet de modifier ces algorithmes ou de les remplacer facilement. Il sera facile d'utiliser ce canevas de travail C++ pour y intégrer l'algorithme de lissage géométrique développé pour ce projet et ainsi bénéficier des algorithmes de raffinement, de déraffinement et de modifications topologiques déjà utilisés dans cette bibliothèque, en plus des avantages d'une procédure d'adaptation globale validée.

#### **2.3.4 Application aux maillages hybrides**

Avec les générateurs de maillages automatiques des récents résolveurs, les maillages hybrides sont devenues monnaie courante dans les simulations en industrie. Cependant, très peu de méthodes d'adaptation de ces maillages sont disponibles à ce jour. On note les travaux de Kallinderis et Kavouklis (2005), de Mavriplis (2000) et de Muller (2002), qui documentent des méthodes d'adaptation par subdivision des éléments comme, dans le cas des maillages non structurés, mais s'appliquant aux maillages hybrides. De la même façon, ces techniques ne sont pas optimales. Elles permettent d'augmenter ou de diminuer la densité des sommets dans les endroits critiques, mais il serait certainement possible d'atteindre un plus haut niveau de qualité si une technique de lissage était appliquée. La difficulté de l'application du lissage sur un maillage hybride consiste à optimiser une fonction coût consistante d'un type d'élément à l'autre, une fonction coût qui optimise chaque forme d'élément sans donner plus de poids à un type d'élément plutôt qu'à un autre. C'est précisément ce que nous avons tenté d'obtenir par le développement de la minimisation de la mesure de non-conformité proposée dans ce travail.

### **2.4 Adaptation de maillage appliquée à la simulation d'écoulements réactifs**

Présentement, l'approche la plus commune pour l'adaptation de maillage dans les écoulements réactifs est celle par subdivision des éléments. Généralement, cette approche utilise des méthodes de raffinement et de déraffinement isotropes sur des maillages de quadrilatères ou d'hexaèdres non structurés. Haldenwang et Pignol (2002)

emploient une méthode heuristique pour capturer le front de flamme dans une simulation transitoire. Le critère de raffinement dépend de la position du front de flamme au pas de temps précédent et ultimement de la connaissance de sa position initiale. Dans notre cas, l'étude est en régime stationnaire, et la détection du front flamme sans connaissance au préalable de sa position fait partie des objectifs, rendant cette approche inutilisable.

Bennett et Smooke (1998, 1999) et Bennett (2007) ont, quant à eux, développé des méthodes de raffinement basées sur des fonctions de poids construites à partir du gradient d'une variable de l'écoulement. On peut aussi citer Gao et Groth (2006), Northrup et Groth (2005) et Sachdev *et al.* (2005) qui utilisent aussi des fonctions de poids construites à partir des gradients de variables de l'écoulement ; mais au lieu de définir les fonctions sur tous le domaine et de faire l'optimisation sur tous les éléments, ces auteurs adaptent les éléments uniquement quand le gradient est plus haut ou plus bas qu'une valeur prédéterminée. Gao et Groth (2010) mentionnent que les méthodes basées sur les gradients ne sont pas optimales puisqu'elles ne minimisent pas directement l'erreur générée par une mauvaise discrétisation, même si, par expérience, les résultats obtenus sont jugés satisfaisants. Des techniques de minimisation de l'erreur ont été utilisées pour contrôler la subdivision des éléments dans les travaux de Rendleman *et al.* (2001).

Pour les maillages structurés, on peut mentionner les travaux de Yuan et Tang (2007), qui utilisent du lissage anisotrope pour résoudre avec précision le front de flamme à l'aide des fonctions de poids dans les équations de Poisson. Comme mentionné précédemment, ces fonctions sont difficiles à construire et leur application aux maillages non structurés paraît incertaine.

En général, les techniques de raffinement isotropes, quoique très rapides, ont tendance à trop raffiner près des phénomènes anisotropes des écoulements, ce qui peut induire des coûts de calcul supplémentaires lors de la résolution. La troisième approche à l'adaptation de maillage non structurées, consistant à combiner les différents types de modifications aux maillages en terminant par le lissage des zones structurées et non structurées, semble pouvoir être une solution à ces problèmes.

#### 2.4.1 Choix des variables d'adaptation

Le choix des variables devant être utilisées pour contrôler l'adaptation est extrêmement important. Plus les modèles numériques choisis sont complexes, plus le choix

est difficile. Il est primordial que le champ scalaire choisi représente les phénomènes importants de l'écoulement. Dans le cas des écoulements réactifs, il n'y a aucune variable ou fonction de variables qui prenne tout en compte. Brais (1993) et plus récemment Berzins (1999) ont proposé une combinaison de variables pour adapter les maillages servant à la résolution des écoulements réactifs. Cette combinaison comprend la quantité de mouvement dans chaque direction, la température ainsi que les champs de concentration de chaque espèce chimique de l'écoulement. La quantité de mouvement ( $\rho u, \rho v$  en 2D) tient compte des effets de l'écoulement, comme les couches limites, les recirculations, les points de stagnation et les points de rattachement. La température aide à capturer le front de flamme où la majorité de l'énergie de la réaction est libérée dans l'écoulement. La création ou la destruction des espèces chimiques doit aussi être prise en compte puisque les réactions ne se produisent pas toutes près du front de flamme, et que la prédiction des polluants est fortement dépendante d'une bonne résolution des champs d'espèces.

Ce choix peut devenir très complexe quand les modèles choisis transportent plusieurs espèces. Dans le cas qui nous intéresse, le modèle d'équilibre chimique est utilisé, voir section 3.3.2. Avec ce modèle, toutes les concentrations des espèces sont dépendantes d'une seule variable transportée, la fraction de mélange  $f$ . Celle-ci est donc directement utilisée pour l'adaptation, au lieu de chaque espèce séparément.

Comme il n'existe aucune fonction des variables choisies, nous devons avoir recours à une autre technique pour combiner ces variables et obtenir la métrique spécifiée. La métrique spécifiée pour les écoulements réactifs peut être construite à partir de l'intersection des métriques spécifiées de chacune des variables choisies. Les travaux de Frey et Alauzet (2005) proposent une technique purement algébrique d'intersection des tenseurs métriques. Plus récemment, McKenzie *et al.* (2009) ont proposé une façon d'intersecter les métriques en utilisant l'intersection géométrique de ces tenseurs par l'intermédiaire de l'intersection de leur représentation sous forme d'ellipse ou d'ellipsoïde. Par opposition à la technique de Frey et Alauzet (2005), celle de McKenzie *et al.* (2009) est robuste dans tous les cas de figure, et est prouvée commutative et associative. Bélanger (2010) a montré que l'opération d'intersection des métriques riemanniennes sur les composantes d'un champ vectoriel donnait de meilleurs résultats lors de l'adaptation que l'utilisant de la norme du vecteur. Conscients de ces résultats, nous avons obtenu la métrique spécifiée de la façon suivante en utilisant la technique

proposée par McKenzie *et al.* (2009) :

$$\mathcal{M}_s = (\mathcal{M}_{\rho u} \cap \mathcal{M}_{\rho v}) \cap (\mathcal{M}_T \cap \mathcal{M}_f) . \quad (2.22)$$

Ce choix de variables et de méthode d'intersection sera utilisé lors de la résolution et de l'adaptation d'un maillage pour un écoulement en combustion industrielle présenté au chapitre suivant.

## Chapitre 3

### SYNTHÈSE DES TRAVAUX

Ce chapitre présente une synthèse des thèmes de recherche étudiés au cours de ce projet de doctorat et qui ont été publiés sous forme d'articles scientifiques. Chacun des trois articles placés en annexe représente un aspect de la recherche lié à l'atteinte de l'un des objectifs établis à la section 1.3. Les résultats de la recherche sont donc présentés selon trois thèmes, chacun directement lié à un article et à un objectif du projet de recherche. La première section vise ainsi le développement d'une mesure de qualité d'un maillage qui utilise un tenseur métrique riemannien comme carte de spécification. Cette mesure sera ensuite utilisée dans la construction d'une fonction coût au centre d'un algorithme d'adaptation de maillage. Par la suite, les résultats de l'application de cet algorithme à un cas de simulation d'écoulement réactif sera présenté.

#### 3.1 Extension de la mesure de non-conformité aux éléments non simpliciaux

La première observation qui ressort de la revue de littérature présentée au chapitre 2, est qu'une façon de décrire les caractéristiques désirées d'un maillage consiste à utiliser un tenseur métrique riemannien comme carte de spécification. Cette technique permet de décrire élégamment toutes les propriétés anisotropes d'un élément grâce à une seule entité. Suivant cette logique, un élément jugé de qualité est un élément qui satisfait entièrement sa spécification sous forme métrique. Pour cette raison, l'utilisation de la mesure de non-conformité à une métrique riemannienne présentée par Labbé *et al.* (2004) et discutée à la section 2.2.4 est tout indiquée. Cependant, son application à des éléments non simpliciaux doit être développée et étudiée de façon à

ce qu'elle puisse être employée sur des maillages hybrides. Cette section présente une synthèse de l'étude publiée dans Sirois *et al.* (2005), qui vise à développer et à étudier le comportement de la mesure de non-conformité à une métrique riemannienne dans les cas des éléments non simpliciaux.

### 3.1.1 Extension par la valeur moyenne

Nous savons que pour un simplexe, la mesure de non-conformité permet la détection de la dégénérescence par l'évaluation de la métrique de l'élément. En effet, pour un simplexe, le jacobien de la transformation non inversée est nul dans un cas dégénéré. Pour un élément non simplicial, le même principe s'applique, mais de façon ponctuelle. Comme la transformation de l'élément vers son élément de référence n'est pas constante, le jacobien varie sur tout l'élément. Un élément est jugé dégénéré lorsque le jacobien est nul en au moins un point de l'élément.

Bien que Labbé *et al.* (2004) aient élaboré une stratégie d'extension de la mesure de non-conformité aux éléments non simpliciaux, celle-ci implique l'évaluation de l'intégrale du tenseur de non-conformité selon l'équation 2.17. Une autre approche consisterait à évaluer la non-conformité de façon moyenne sur l'élément, ce qui permettrait d'exprimer l'égalité 2.8 ainsi :

$$\overline{\mathcal{M}_K} = \overline{\mathcal{M}_s} \quad (3.1)$$

pour obtenir le tenseur de non-conformité :

$$\overline{T_{NC}} = \overline{\mathcal{M}_s^{-1} \mathcal{M}_K} + \overline{\mathcal{M}_K^{-1} \mathcal{M}_s} - 2I. \quad (3.2)$$

Peu importe si on emploie la méthode proposée par Labbé *et al.* (2004) ou la méthode de la métrique moyennée des équations 3.1 et 3.2, l'intégration numérique nécessite l'évaluation de la métrique courante aux différents points de la quadrature de Gauss utilisée.

Comme discuté plus haut, l'intégration de cette métrique doit permettre la détection des dégénérescences. La figure 3.1 montre un quadrilatère dégénéré dont deux des quatre sommets sont au même endroit. Ce quadrilatère possède ainsi une arête de longueur nulle. Le jacobien de la transformation non inversée vers son élément de référence, le carré unitaire, varie sur tout le domaine et est nul uniquement au point

de dégénérescence. On remarque également que la fonction varie rapidement près du point de dégénérescence, ce qui engendre une zone très localisée de non-conformité élevée.

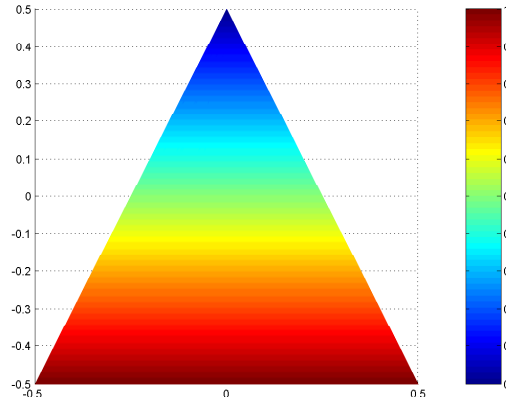


FIGURE 3.1 Déterminant de la matrice jacobienne de la transformation non inversée d'un quadrilatère dégénéré.

L'expérience a montré que l'utilisation des quadratures de Gauss pour l'évaluation d'une métrique moyenne ne permet pas de capturer de façon précise la zone de non-conformité élevée ni de détecter la dégénérescence. L'utilisation d'une métrique moyenne  $\overline{\mathcal{M}_K}$  détectera les changements de taille et d'orientation de l'élément, puisque ceux-ci affectent l'élément en entier, mais elle atténuera les effets d'une distorsion de forme par moyennage et échouera à la détection de dégénérescence si aucun point de la quadrature utilisée n'est positionné exactement là où le jacobien de la transformation est nul.

### 3.1.2 Méthode des sous-triangles de coin

Pour pallier ce problème, une nouvelle approche à l'intégration de la métrique d'un élément non simplicial est proposée. Il s'agit de diviser tout non-simplexe en une combinaison de simplexes de même dimension, sur lesquels la non-conformité sera calculée. Comme la métrique courante de tout simplexe est constante, cela élimine le recours à l'intégration numérique et les imprécisions qui y sont associées.

Cependant, la division en sous-simplexes ne doit pas être faite de façon arbitraire. On pourrait croire que couvrir le domaine totalement en décomposant l'élément serait la meilleure façon de faire, mais ce n'est pas le cas. Prenons par exemple le quadrilatère

dégénéré de la figure 3.2. Ce quadrilatère possède un angle de  $180^\circ$  au sommet 3, ce qui constitue une dégénérescence. Si le quadrilatère est divisé en deux triangles par une arête imaginaire entre les sommets 1 et 3, les deux triangles obtenus, même s'ils couvrent entièrement le domaine, ne sont pas dégénérés. Si la division avait été faite dans l'autre direction, le triangle de volume nul composé des sommets 2-3-4 aurait par contre permis de détecter cette dégénérescence.

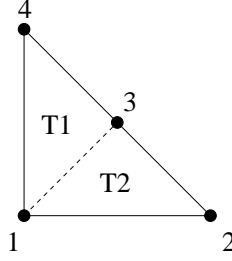


FIGURE 3.2 Quadrilatère dégénéré décomposé en deux sous-triangles.

Pour un quadrilatère, le calcul de la non-conformité sur les quatre sous-triangles détectera toutes les configurations dégénérées, sauf l'inversion (aire négative) et la torsion (aire partiellement négative). Ces problèmes peuvent être facilement réglés par l'implantation de tests booléens supplémentaires lors de l'évaluation de la qualité d'un élément. La même approche de décomposition s'applique pour tous les autres types d'éléments non simpliciaux où, en trois dimensions, la non-conformité est calculée sur les sous-tétraèdres de coin.

Un autre avantage de cette méthode est que, puisque les sous-simplexes sont traités comme des éléments indépendants de leur non-simplexe d'origine, l'intégration de la métrique spécifiée pour obtenir  $\overline{\mathcal{M}}_s$  sera effectuée sur chaque sous-simplexe. Cette décomposition sur un plus petit domaine augmente la précision de l'intégration et permet une meilleure différentiation des variations de formes imposées.

Finalement, une valeur unique du coefficient de non-conformité d'un non-simplexe peut être obtenue en sommant les coefficients de non-conformité obtenus pour les sous-simplexes :

$$\varepsilon_K = \sum_{\tau_i \in K} \varepsilon_{\tau_i} \quad (3.3)$$

où  $\tau_i$  est le coefficient de non-conformité du  $i$ ème sous-simplexe de l'élément  $K$ .



## Éléments de référence des sous-simplexes de coin

Pour calculer la métrique de chaque type d'élément, un élément de référence pour la définition de la transformation doit être choisi. L'adaptation de maillage avec une carte de taille spécifiée sous forme de métriques riemanniennes vise à construire des éléments isotropes et de même taille dans l'espace de la métrique spécifiée. Dans le cas des simplexes, les formes idéales sont le triangle équilatéral et le tétraèdre équilatéral de dimension unitaire. Suivant cette logique, on obtient le carré unitaire pour les quadrilatères, l'hexaèdre unitaire à angles droits, le prisme unitaire à base triangulaire équilatérale avec angles droits, etc. Il est important de noter que lors de l'utilisation de la méthode des sous-simplexes de coin, leur transformation doit être définie en fonction de l'élément de référence du non-simplexe. Par exemple, dans le cas du carré unitaire, chaque sous-triangle de coin doit utiliser la transformation vers le triangle rectangle isocèle où les arêtes adjacentes à l'angle droit sont de longueur unitaire.

### 3.1.3 Étude du comportement de la mesure

Dans cette section, on présente l'étude de comportement de la mesure de non-conformité appliquée aux éléments non simpliciaux par la méthode des sous-simplexes de coin. Pour être jugée valable, la mesure doit posséder les propriétés suivantes :

- Atteindre sa valeur minimale quand l'élément est égal à l'élément de référence dans l'espace de la métrique ;
- Augmenter de façon continue en s'éloignant de l'état de référence dans la métrique, pour tout type de déformation ;
- Tendre vers l'infini pour un élément comportant une dégénérescence.

L'étude est basée sur le comportement de la mesure pour quatre types de déformations isotropes et anisotropes soit : la mise à l'échelle, l'étirement, l'orientation et la déformation de forme. Le comportement de la mesure de non-conformité sera étudié pour des éléments non simpliciaux généralement utilisés en CFD, soit les quadrilatères, les hexaèdres, les prismes et les pyramides. Un exemple de chacun de ces types d'éléments est montré à la figure 3.3.

### Mise à l'échelle

Le premier type de déformation étudié, la mise à l'échelle, vise à observer le comportement de la mesure de non-conformité d'éléments non simpliciaux soumis à

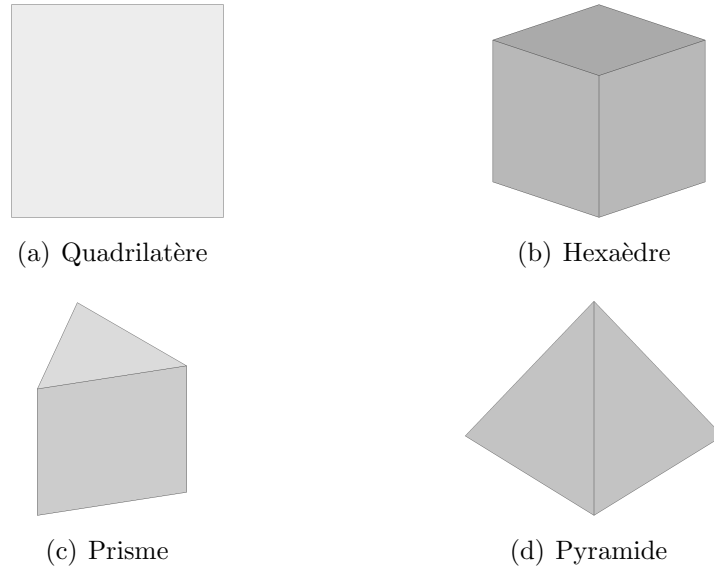


FIGURE 3.3 Éléments non simpliciaux utilisés pour l'étude de comportement de la mesure de non-conformité.

une déformation de taille isotrope par rapport à la spécification. Un exemple de mise à l'échelle pour un élément en deux et en trois dimensions est montré aux figures 3.4 et 3.5.

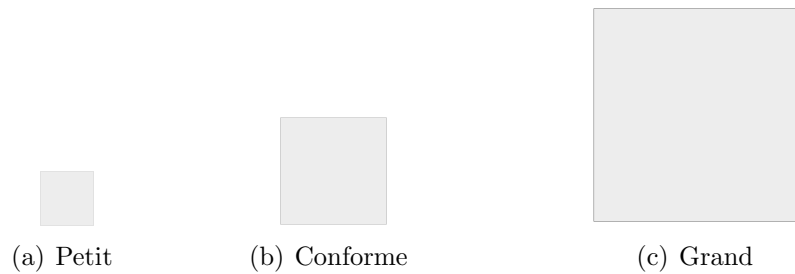


FIGURE 3.4 Mise à l'échelle d'un quadrilatère.

Pour l'étude de la mise à l'échelle, la métrique spécifiée est tout simplement la métrique euclidienne, ou identité. Les courbes présentées à la figure 3.6 montrent comment la mesure se comporte quand la longueur de toutes les arêtes sont modifiées par un facteur d'échelle par rapport à l'élément idéal de côté unitaire. Puisque la métrique spécifiée est la métrique euclidienne, l'élément idéal est le même que l'élément de référence. On remarque que, lorsque les arêtes sont unitaires, les éléments sont par-

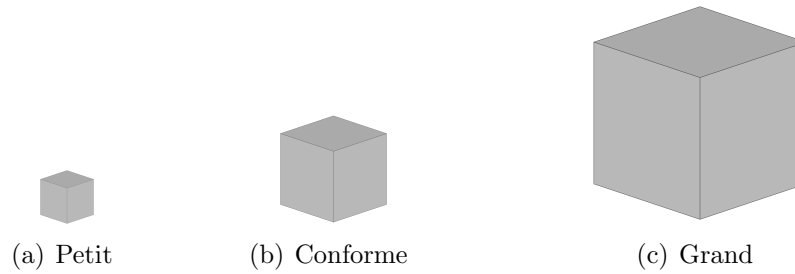


FIGURE 3.5 Mise à l'échelle d'un hexaèdre.

faits et la mesure, dans tous les cas, atteint son minimum à zéro. La mesure augmente de façon continue et exponentielle à mesure que la taille des éléments augmente ou diminue pour tendre vers l'infini pour des éléments très grands ou très petits. Il est important de noter la symétrie des courbes de part et d'autre du minimum. Cette symétrie indique, par exemple, qu'un élément deux fois trop grand possède le même coefficient de non-conformité qu'un élément deux fois trop petits.

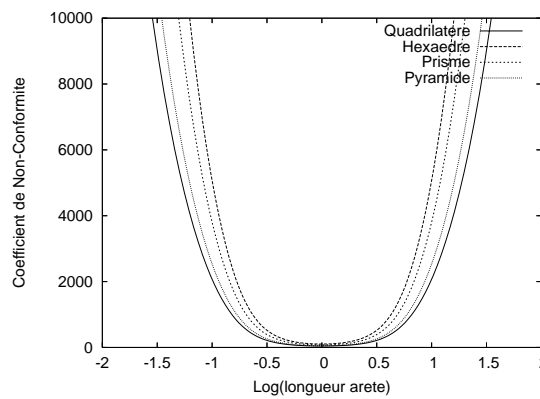


FIGURE 3.6 Effets de la mise à l'échelle sur la non-conformité.

## Étirement

L'étirement est une déformation anisotrope de la taille d'un élément. Il s'agit d'une déformation plus complexe, qui ajoute une déformation de forme à la déformation de taille étudiée plus haut. Encore un fois, la métrique spécifiée est euclidienne. Les figures 3.7 et 3.8 montrent comment l'étirement est appliqué aux différents éléments.

Les courbes de la figure 3.9 atteignent leur minimum à zéro quand  $L = 1$  et tendent vers l'infini pour des valeurs de  $L$  très grandes ou très petites avec, encore

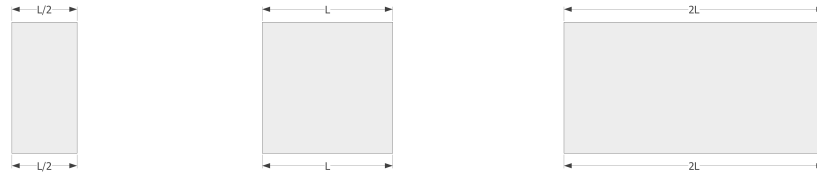


FIGURE 3.7 Étirement d'un quadrilatère.

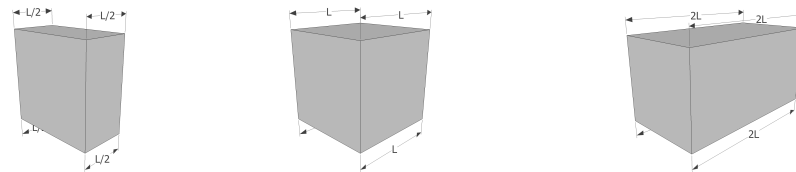


FIGURE 3.8 Étirement d'un hexaèdre.

une fois, une symétrie de part et d'autre du minimum. On peut conclure que la mesure de non-conformité se comporte de façon continue et similaire pour les différents types d'éléments lorsqu'une déformation par étirement est détectée.

### Orientation

Puisque la mesure de non-conformité est basée sur la spécification d'un tenseur métrique, elle permet aussi de détecter les changements d'orientation d'un élément. La figure 3.11 montre l'effet d'une rotation de  $180^\circ$  autour de l'axe  $y$  et la figure 3.10 montre comment cette axe est positionné sur chacun des éléments.

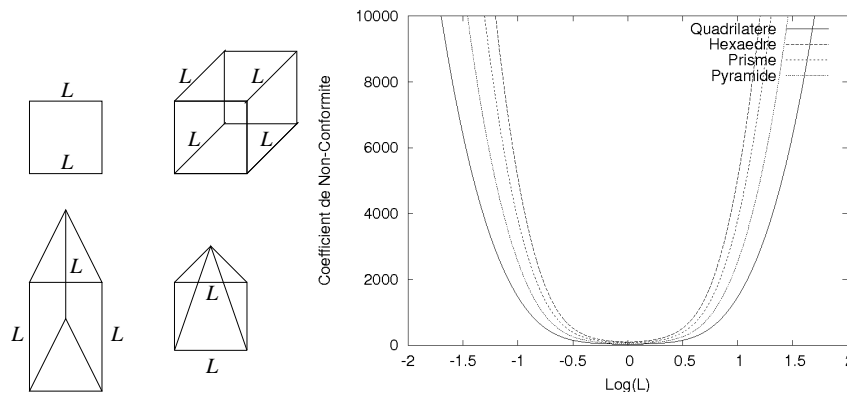


FIGURE 3.9 Effets de l'étirement sur la non-conformité.

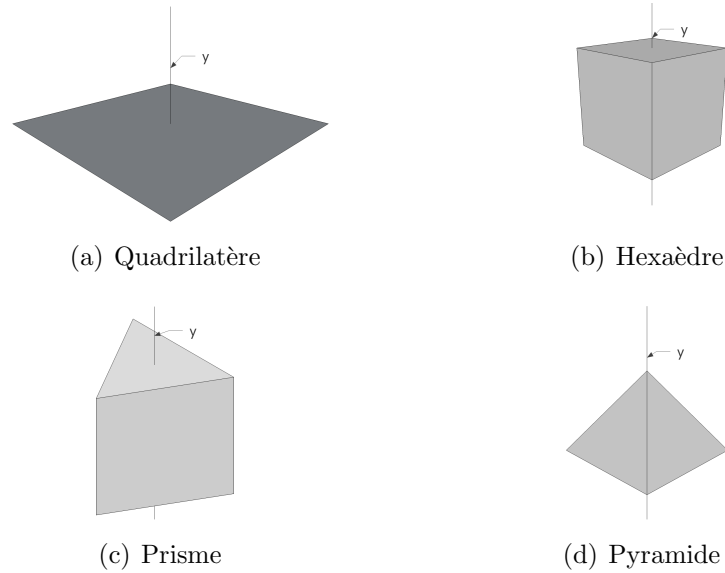


FIGURE 3.10 Positionnement de l'axe  $y$  pour chaque type d'élément étudié.

Dans ce cas particulier, la métrique spécifiée doit être anisotrope, de façon à rendre la mesure dépendante de la direction. Si un tenseur identité avait été spécifié, la diagonalisation de la métrique spécifiée suivant l'équation 2.2 aurait donné des valeurs propres identiques dans toutes les directions, rendant la mesure insensible à la direction. Donc, pour distinguer les variations d'orientation, la métrique spécifiée

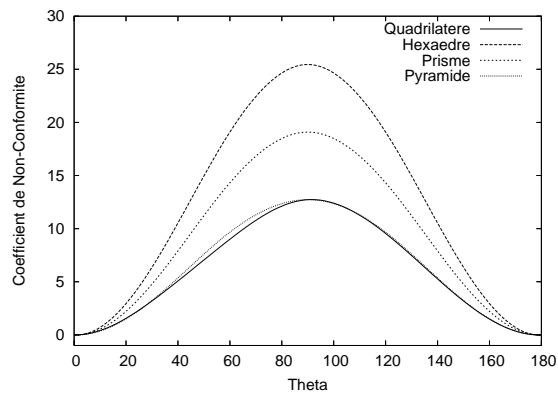


FIGURE 3.11 Effets de l'orientation sur la non-conformité.

est la suivante :

$$\mathcal{M}_s = \begin{pmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ en 2D, et } \mathcal{M}_s = \begin{pmatrix} 0.25 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ en 3D.} \quad (3.4)$$

En se rappelant l'équation 2.4, on comprend que cette métrique nécessite un élément étiré selon l'axe des  $x$  avec des arêtes de longueurs 2 selon cet axe et 1 dans les autres directions. L'élément soumis à la rotation est celui qui satisfait cette métrique pour un angle de  $0^\circ$ . Donc, on remarque, dans la figure 3.11, que la non-conformité est nulle pour tous les types d'éléments lorsque l'élément satisfait la métrique. La mesure est encore une fois continue, et elle atteint son maximum pour tous les types d'éléments lorsqu'ils sont tournés de  $90^\circ$ , soit quand ils sont deux fois trop courts en  $x$  et deux fois trop longs en  $y$ .

### Dégénérescence de forme

Lorsque des déformations de base, soit l'orientation, la mise à l'échelle et l'étirement, sont combinées, cela peut engendrer d'autres types de distorsion que nous appellerons dégénérescences de forme. Un élément non simplicial est considéré dégénéré quand il devient non convexe ou de volume nul. Dans cette section, nous observerons le comportement de la mesure pour trois dégénérescences canoniques, soit l'arête de longueur nulle, les grands angles internes et les petits angles internes.

La figure 3.14 montre la non-conformité d'un élément idéal soumis à une métrique euclidienne lorsqu'une de ses arêtes est raccourcie jusqu'à atteindre une longueur nulle. Un exemple pour un élément en deux et un autre pour un élément en trois dimensions sont présentés aux figures 3.12 et 3.13 ; ces exemples montrent comment ce type de déformation est appliqué sur les éléments. Les valeurs du coefficient de non-conformité pour ces déformations peuvent directement être lues sur la figure 3.14. Encore une fois, dans tous les types d'éléments, la mesure possède le comportement désiré.

La figure 3.17 montre, quant à elle, la variation du coefficient de non-conformité lorsque  $L$  est réduite de manière à générer de grands angles internes dans les éléments. Des exemples d'application de ce type de dégénérescence en deux et en trois dimensions sont présentés aux figures 3.15 et 3.16. On peut de nouveau remarquer le com-

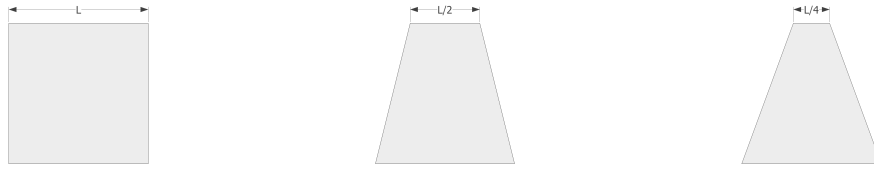


FIGURE 3.12 Dégénérescence par arête nulle pour un quadrilatère.

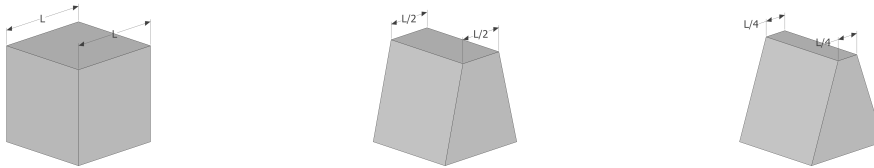


FIGURE 3.13 Dégénérescence par arête nulle pour un hexaédre.

portement exponentiel de la mesure, qui tend vers l'infini alors que l'angle interne approche le point de dégénérescence pour une valeur de  $180^\circ$ . Le même comportement est observé lorsqu'un angle interne est réduit jusqu'à zéro, comme le montre la figure 3.20 pour les déformations illustrées aux figures 3.18 et 3.19.

### 3.1.4 Analyse de la mesure sur des maillages adaptés

Plusieurs méthodes de déplacement de sommets ont été présentées par Sirois *et al.* (2002). Dans cette étude, la qualité des maillages était déterminée par inspection visuelle. Maintenant équipés d'une mesure de qualité, il nous est possible de comparer des maillages de façon quantitative quand la spécification de l'élément désiré est fournie par une métrique riemannienne. Cette section présente quelques maillages obtenus par différentes méthodes de déplacement de sommet, et leur qualité est discutée par rapport à la mesure de non-conformité.

#### Maillage de Riemann adapté avec différentes méthodes

La cas présenté ici est celui de l'adaptation d'un maillage cartésien à une métrique riemannienne anisotrope avec deux méthodes différentes de déplacement de sommets. La métrique est construite à l'aide du hessien de la variation de l'échelle de gris sur une image du mathématicien Riemann. Dans ce cas, l'échelle de gris représente la solution d'une variable. La figure 3.21 montre comment la photo du mathématicien

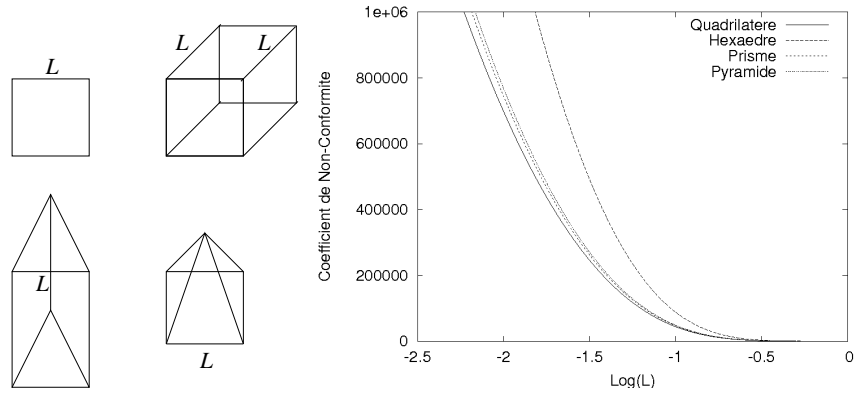


FIGURE 3.14 Effets de la dégénérescence par arête nulle sur la non-conformité.

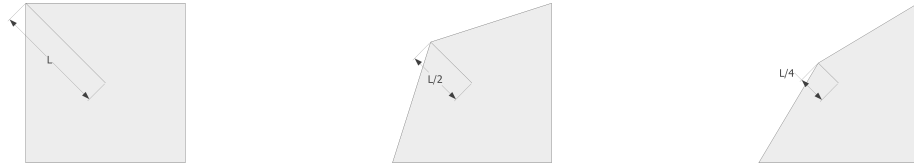


FIGURE 3.15 Dégénérescence par grand angle pour un quadrilatère.

est représentée comme une surface solution.

Le hessien de cette solution est similaire à l'estimation d'erreur d'interpolation *a posteriori* et permet de générer la métrique spécifiée. Les figures 3.22, 3.23 et 3.24 montrent une représentation des trois termes de la métrique spécifiée sur le domaine de la solution. Les termes  $M_{11}$  et  $M_{22}$  représentent l'inverse du carré de la longueur demandée à l'élément dans les directions  $x$  et  $y$ , alors que  $M_{12}$  est une indication de la rotation et de l'étirement requis.

Le maillage initial et la non-conformité élémentaire par rapport à la métrique sont montrés à la figure 3.25. Il est très intéressant de voir le visage du mathématicien

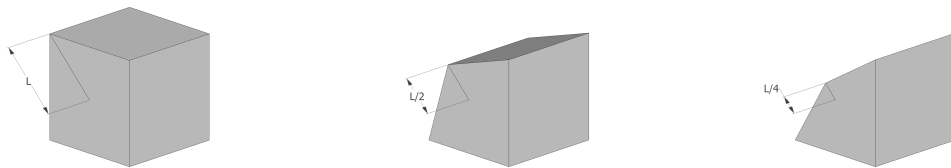


FIGURE 3.16 Dégénérescence par grand angle pour un hexaèdre.



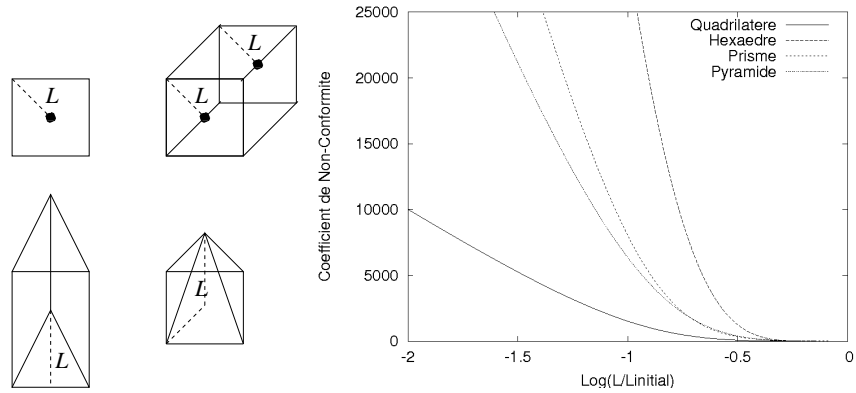


FIGURE 3.17 Effets de la dégénérescence par grands angles internes sur la non-conformité.



FIGURE 3.18 Dégénérescence par petit angle pour un quadrilatère.

apparaître lorsque l'on représente la valeur du coefficient de non-conformité sur chaque élément, ce qui démontre que les éléments actuels ne satisfont pas la métrique spécifiée dans les endroits de variation de couleur sur l'image. Globalement, ce maillage obtient un coefficient de non-conformité de 11.33 pour des valeurs s'étalant entre 0.04 et 58 environ.

Le maillage est ensuite adapté avec une méthode d'analogie des ressorts comme celle discutée à la section 2.3.2. Cette fois, on peut voir le visage de Riemann apparaître dans le maillage et s'estomper dans le champ de non-conformité, tel qu'il

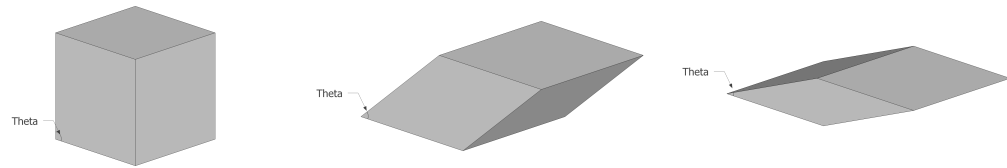


FIGURE 3.19 Dégénérescence par petit angle pour un hexaèdre.

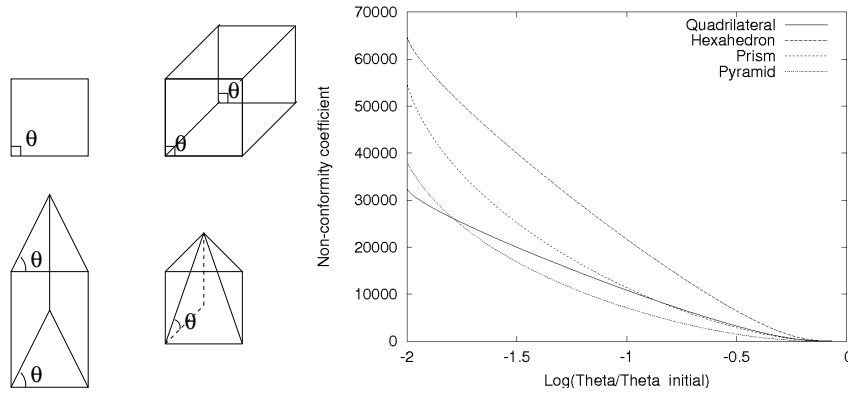


FIGURE 3.20 Effets de la dégénérescence par petits angles internes sur la non-conformité.

lustré à la figure 3.26. L'apparition de l'image dans le maillage est un signe visuel que la qualité du maillage, par rapport à la métrique spécifiée, a augmenté, comme en témoigne la valeur moyenne du coefficient de non-conformité, qui vaut maintenant 5.16. La non-conformité a donc été diminuée dans les endroits de grande variation de la solution. On peut aussi remarquer que plus d'éléments possèdent des valeurs basses de non-conformité, mais que la valeur maximale a augmenté à près de 80. Il faut garder en tête que l'algorithme d'adaptation tente d'améliorer la qualité moyenne du maillage, tout en restant limité par le nombre de sommets du maillage, et surtout que la non-conformité n'est pas directement la quantité optimisée par cet algorithme de lissage.

La figure 3.27 montre un maillage adapté utilisant une méthode empirique combinant l'équidistribution des arêtes, de l'aire des éléments et l'analogie des ressorts. Le résultat est similaire à l'analogie des ressorts, mais cette fois, le coefficient de non-conformité moyen est de  $\varepsilon = 4.79$ , nous démontrant une plus grande efficacité de cette approche à satisfaire la métrique spécifiée.

Les résultats présentés jusqu'ici démontrent comment la mesure de non-conformité correspond à nos attentes visuelles construites par l'expérience de la génération et de l'utilisation des maillages. C'est-à-dire qu'un maillage bien adapté est en soi une représentation de la solution ; par conséquent, lorsque la solution devient apparente dans le maillage, la non-conformité, elle, diminue.

De manière à obtenir une meilleure idée du comportement local de la mesure, nous allons étudier son évolution le long d'une coupe selon l'axe des  $x$  dans le maillage de la

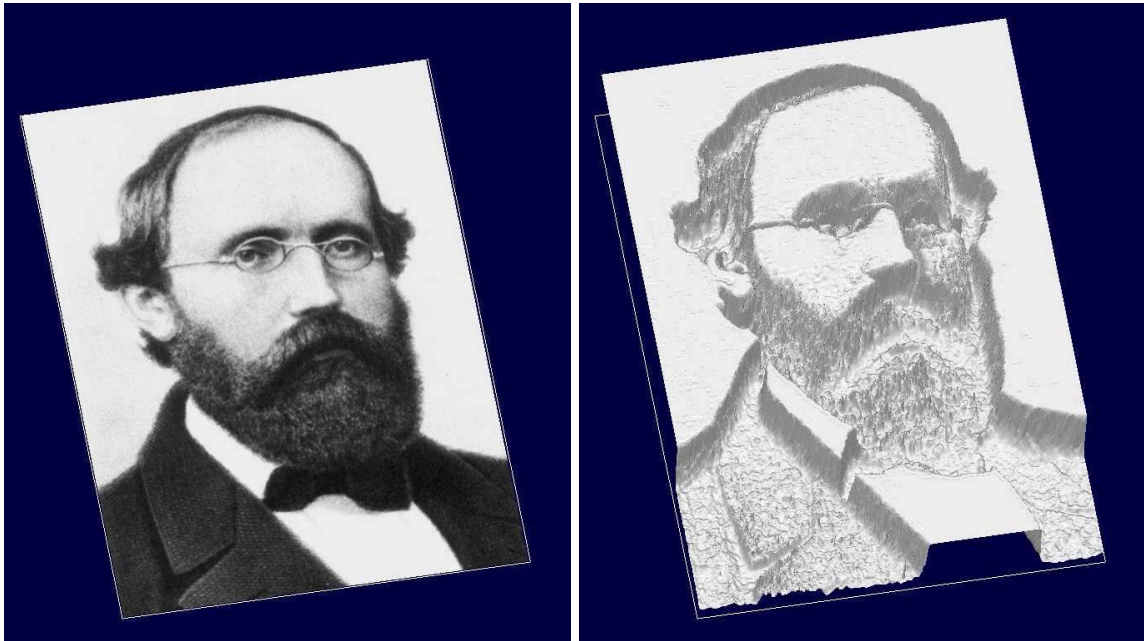


FIGURE 3.21 Image de Riemann sous forme de surface solution

figure 3.27, à l'endroit indiqué par le trait noir. Pour cette étude, la non-conformité le long de la coupe est comparée à des coefficients de distorsion selon la taille, l'étirement et l'orientation. Pour la taille, on utilise :

$$C_h = \left| \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{M}_K|}} - \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{M}_s|}} \right| \quad (3.5)$$

puisque l'inverse du déterminant d'une métrique est proportionnel à l'aire de l'élément. On utilise le facteur d'étirement  $\kappa$  de Formaggia et Perotto (2000) :

$$\kappa = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \quad (3.6)$$

et le coefficient d'étirement devient :

$$C_\kappa = |\kappa_K - \kappa_s|. \quad (3.7)$$

Dans le cas de l'orientation, l'angle  $\alpha$  d'une métrique est simplement l'angle du vecteur propre associé à la valeur propre la plus élevée de la métrique en question. Cependant, la différence relative entre les angles des métriques courante et spécifiée  $|\alpha_K - \alpha_s|$

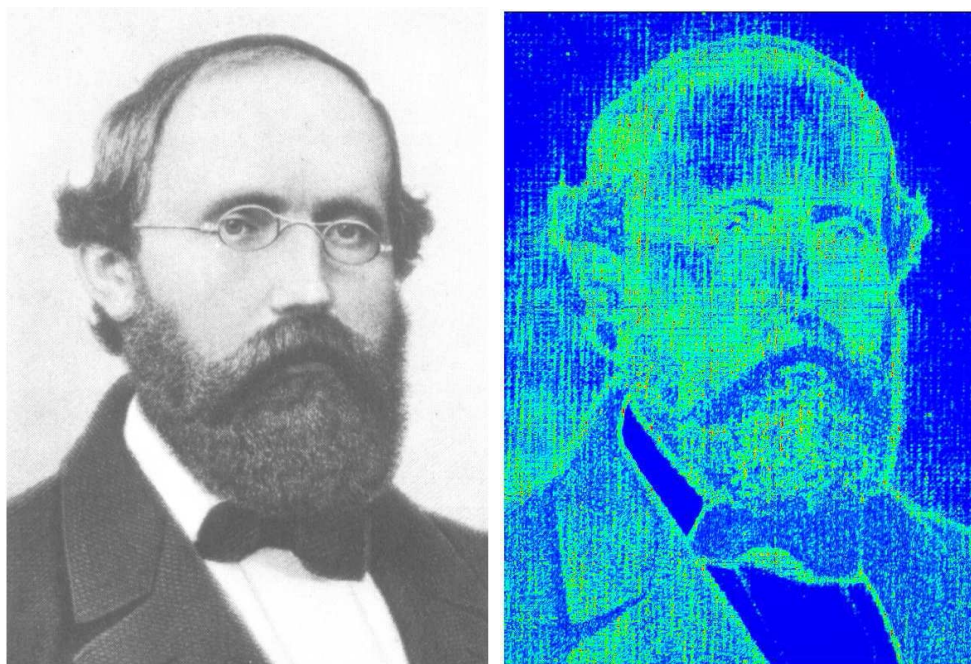


FIGURE 3.22 Représentation du terme  $M_{11}$  de la métrique spécifiée.

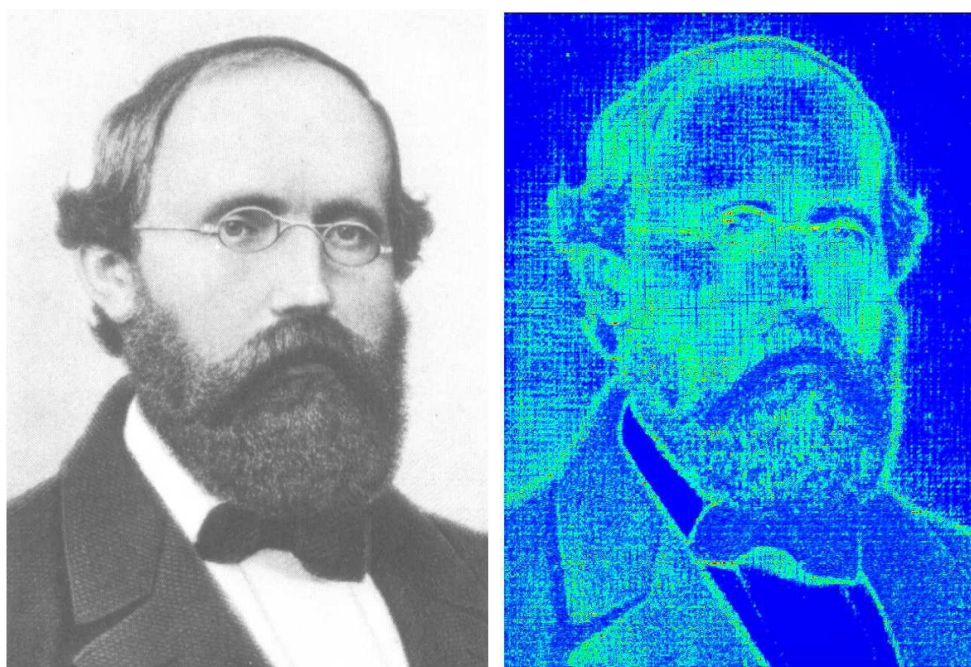


FIGURE 3.23 Représentation du terme  $M_{22}$  de la métrique spécifiée.

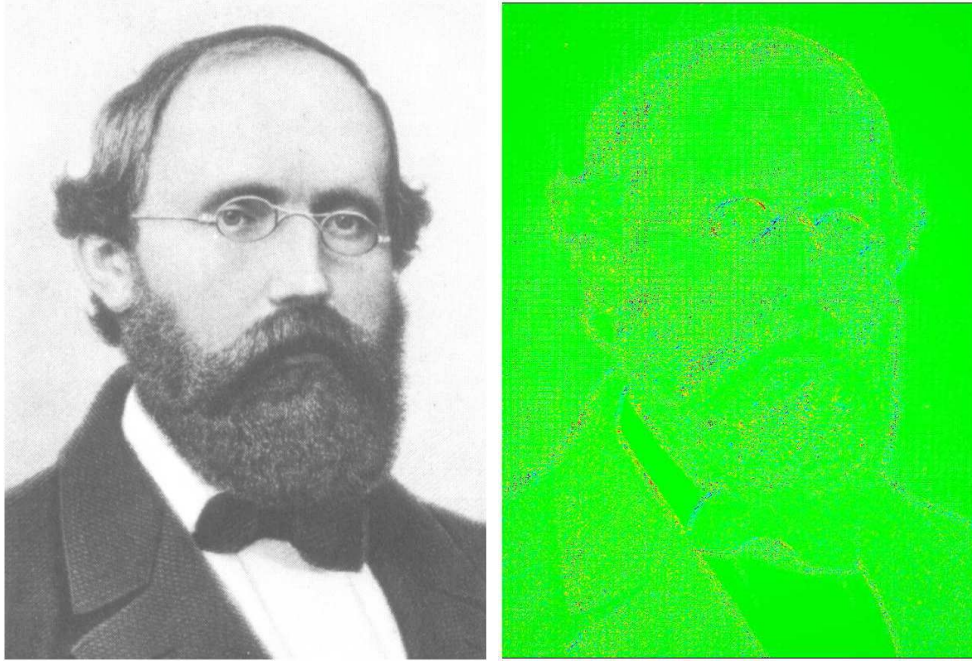


FIGURE 3.24 Représentation du terme  $M_{12}$  de la métrique spécifiée.

doit être pondérée par les facteurs d'étirement afin d'en faire abstraction lorsqu'une métrique est isotrope. On obtient donc :

$$C_\alpha = (1 - \kappa_s)(1 - \kappa_K) \min(|\alpha_K - \alpha_s|, \pi - |\alpha_K - \alpha_s|). \quad (3.8)$$

Les résultats des calculs de ces coefficients et la non-conformité le long de la coupe sont présentés à la figure 3.28. Il faut noter dans cette figure qu'un coefficient de  $-0.2$  a été appliqué à la mesure de non-conformité pour des raisons visuelles. La courbe résultante permet ainsi de mieux comparer les effets des autres coefficients par rapport à la non-conformité.

On peut remarquer que deux régions en particulier sont identifiées comme possédant des distorsions de taille, étirement et/ou orientation importantes. Ces régions correspondent au début du veston du Riemann et à son collet de chemise. Si on regarde le coefficient de non-conformité, on remarque qu'il est sensible aux déformations dans ces régions. De plus, quand plusieurs types de déformations sont présents au même endroit, la mesure de non-conformité augmente, démontrant une sensibilité à la somme des distorsions de l'élément.



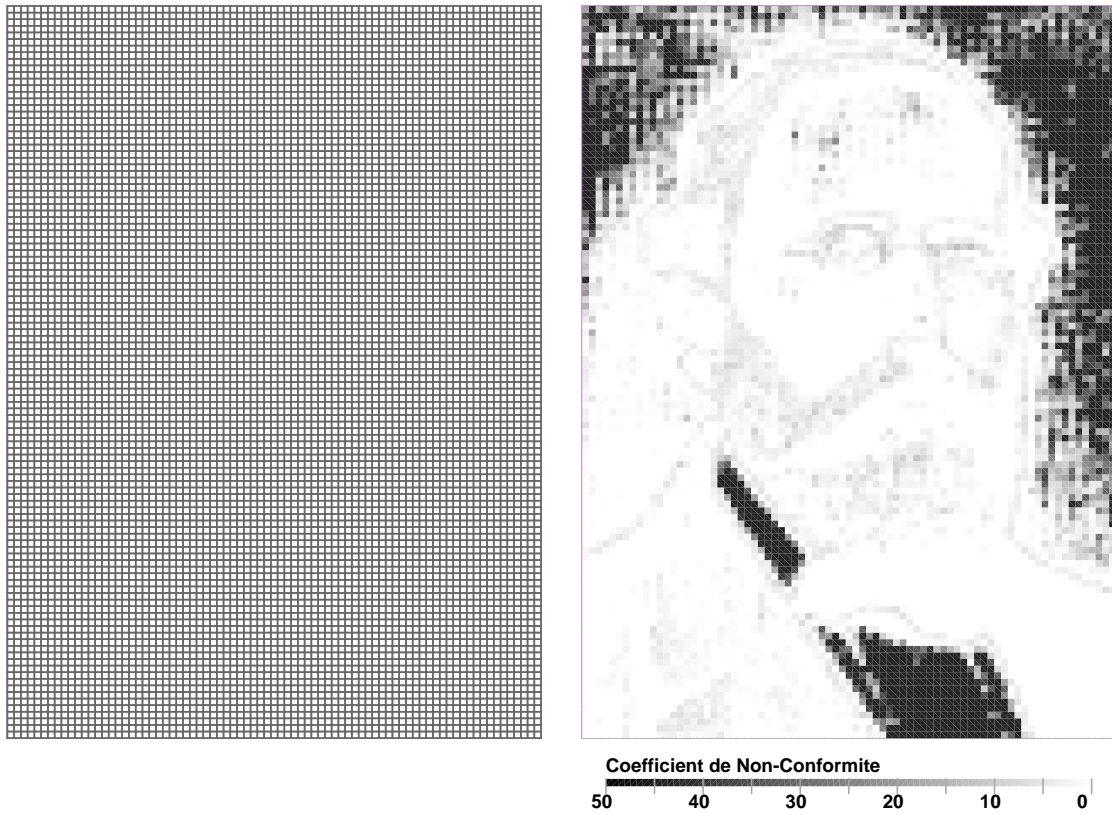


FIGURE 3.25 Maillage initial de Riemann,  $\varepsilon = 11.33$

### 3.2 Adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité

Maintenant que nous nous sommes dotés d'une mesure de qualité permettant de quantifier grâce à une seule valeur les distorsions de taille, d'étirement et d'orientation par rapport à une métrique riemannienne spécifiée pour tout type d'éléments, celle-ci peut-être utilisée comme fondement pour développer une méthode d'adaptation de maillage. Il a été discuté, à la section 2.3, que l'une des façons d'obtenir un bon maillage adapté est de combiner de façon locale du raffinement, du déraffinement, des opérations topologiques et géométriques du maillage. En effet, des opérations comme le raffinement et le déraffinement, suivis de renversement d'arêtes ou de faces, permettent d'obtenir une densité de sommets et des éléments bien formés et orientés. L'application d'une méthode de lissage permet ensuite d'obtenir la qualité maximale.

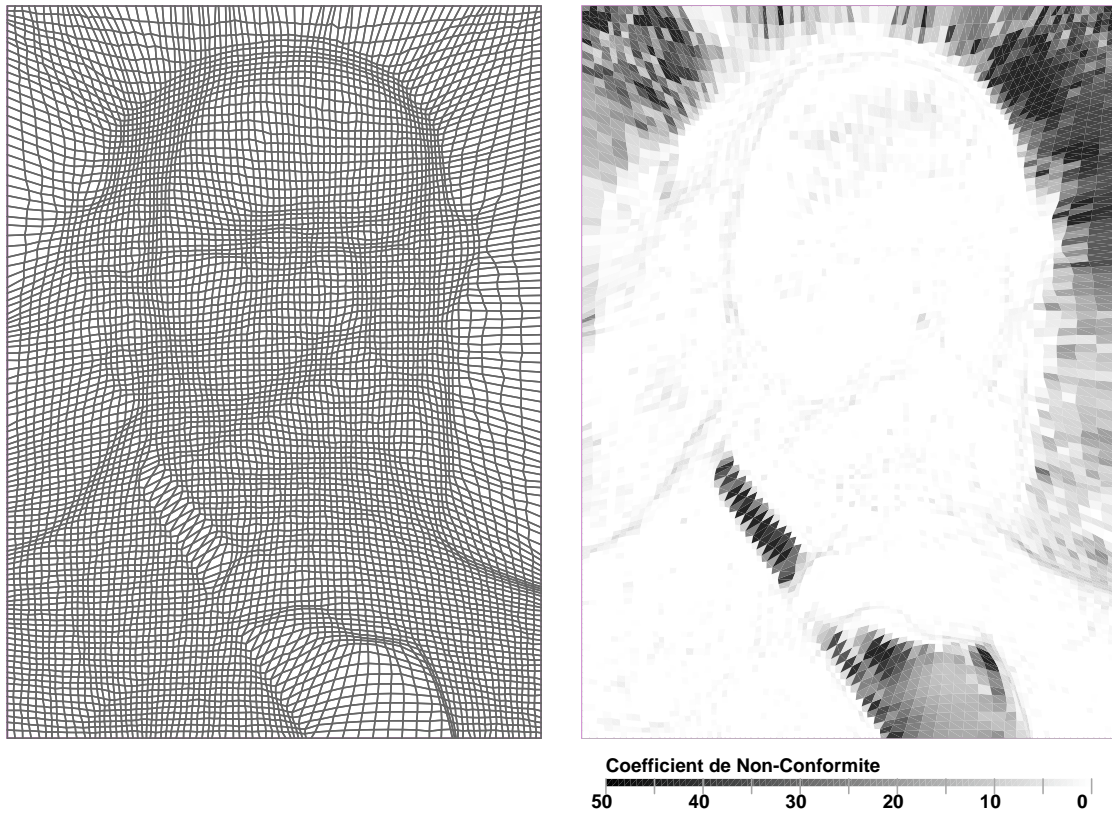


FIGURE 3.26 Adaptation de Riemann par l'analogie des ressorts,  $\varepsilon = 5.16$ .

Cette approche est celle qui est préconisée dans le cadre de cette étude. Pour ce faire, la bibliothèque d'adaptation de maillage *OORT* présentée à la section 2.3 est utilisée. Cette bibliothèque contient déjà toutes les opérations topologiques nécessaires qui permettent d'obtenir une bonne densité de sommets et une bonne connectivité des éléments lors de l'adaptation de simplexes, mais elle contient aussi des méthodes de lissage optimisant tous les types d'éléments. La présente étude vise à développer une méthode de lissage s'inscrivant dans le cadre de la bibliothèque *OORT*, afin de minimiser la non-conformité à une métrique riemannienne spécifiée indépendamment du type d'éléments contenus dans le voisinage du sommet déplacé. Cette section constitue une synthèse du deuxième article associé à ce projet de recherche (voir Sirois *et al.* (2010a) en annexe).

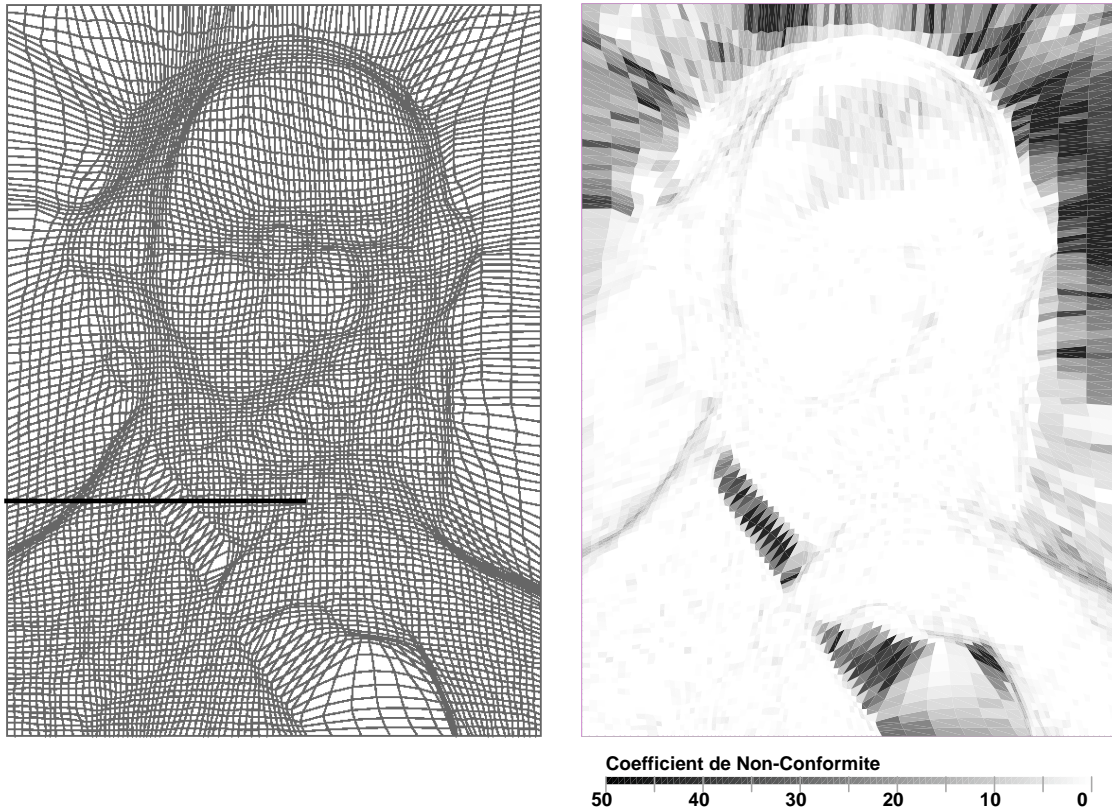


FIGURE 3.27 Adaptation de Riemann par la méthode combinée,  $\varepsilon = 4.79$ .

### 3.2.1 Choix de la fonction coût

Plusieurs fonctions coûts peuvent être construites à partir du coefficient de non-conformité élémentaire. Il est important de noter que la fonction coût sélectionnée est complètement indépendante de l'algorithme de déplacement élaboré. Cette caractéristique a permis d'évaluer facilement plusieurs fonctions coûts et de déterminer que la fonction suivante satisfait les besoins de cette étude :

$$f = \sum_{K_i \in \mathcal{T}} \varepsilon_{K_i}^2. \quad (3.9)$$

Sachant que le coefficient de non-conformité est nul pour un élément qui satisfait sa métrique spécifiée et qu'il augmente de façon exponentielle à mesure que l'élément s'éloigne de l'état prescrit par la métrique, on peut comprendre que cette fonction



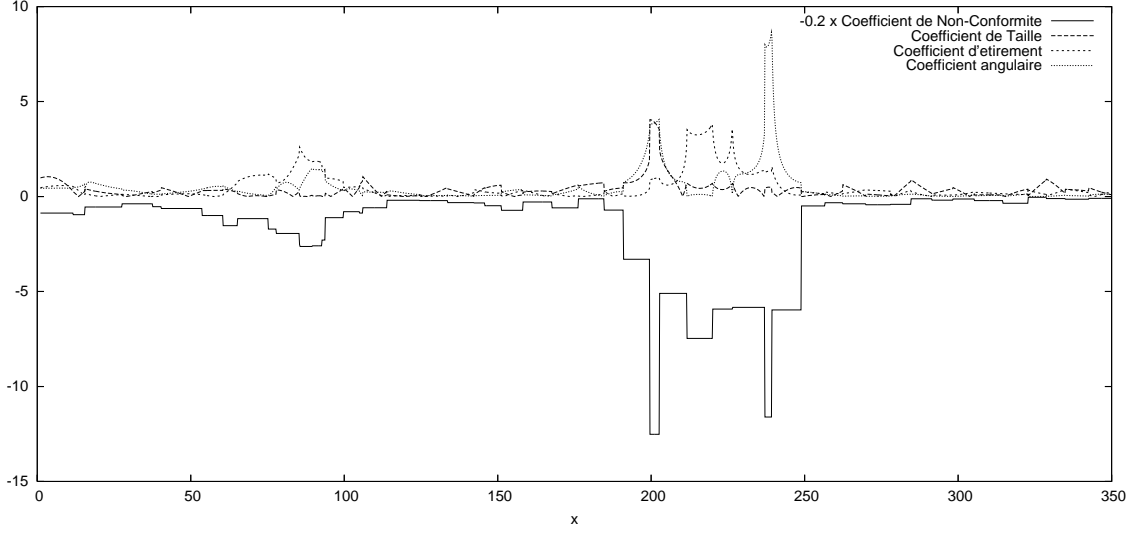


FIGURE 3.28 Différence entre la mesure de non-conformité et des mesures de taille, d'étirement et d'orientation.

coût met l'accent sur les éléments de mauvaise qualité, en comparaison avec une moyenne algébrique. Les résultats obtenus avec cette fonction coût ont été comparés avec ceux de la simple sommation du coefficient de non-conformité élémentaire. En général, l'équation 3.9 génère de meilleurs résultats dans les régions où la mesure de non-conformité est semblable pour des éléments avoisinants, puisque la fonction carrée augmente la distance entre la valeur de non-conformité pour ces éléments très semblables. La minimisation de la fonction présentée à l'équation 3.9 priorise donc la réduction de la non-conformité pour les pires éléments du voisinage.

L'algorithme de lissage utilise des itérations de Gauss-Seidel pour déterminer les positions optimales des sommets du maillage à adapter. Assumant une position fixe pour tous les sommets du maillage sauf un, la position optimale du sommet  $V$  est la position qui minimise la fonction coût  $f$ . Le déplacement du sommet  $V$  influence seulement la non-conformité des éléments du voisinage  $N(V)$  composé des éléments  $K_i$  auxquels le sommet  $V$  appartient. La position optimale  $(x_V, y_V, z_V)$  de  $V$  est donc celle minimisant la contribution  $f_V$  des éléments du voisinage  $N(V)$  à la fonction coût  $f$  :

$$f_V = \sum_{K_i \in N(V)} \varepsilon_{K_i}^2. \quad (3.10)$$

De façon générale, une méthode de lissage de sommets tente de déplacer chaque

sommet de façon à équilibrer un système de forces choisi. Il a été démontré à la section 3.1.3 que, dans un même état de distorsion, plusieurs éléments du même type auront le même coefficient de non-conformité. Donc, des éléments du même type appartenant au voisinage  $N(V)$  affecteront l'état d'équilibre de  $V$  de la même façon, ce qui n'est cependant pas le cas pour des éléments de types différents.

Il est nécessaire, pour un sommet appartenant à des éléments de différentes topologies, que les coefficients de non-conformité de ces éléments soient sensiblement égaux lorsqu'ils sont soumis aux mêmes déformations avec la même métrique spécifiée. Ceci est requis pour s'assurer que tous les éléments du voisinage aient la même influence sur la position optimale de  $V$  afin de rendre l'algorithme indépendant du type d'éléments en présence.

En utilisant les valeurs de non-conformité obtenues lors de l'étude de comportement présentée à la section 3.1.3, il a été possible de déterminer, que si le coefficient de non-conformité d'un élément non simplicial est divisé par le nombre de sous-triangles de coin utilisés dans son calcul, la nouvelle valeur de non-conformité se comporte de la même façon que celle du simplexe soumis à la même métrique spécifiée aux mêmes déformations. Ceci a été vérifié par une étude de comportement de la mesure de non-conformité utilisant la moyenne des coefficients des sous-simplexes de coin pour les déformations étudiées à la section 3.1.3. Les tests montrent que pour les éléments assujettis à des métriques spécifiées constantes et à des déformations simples, soit la mise à l'échelle, l'étirement et la rotation, le coefficient de non-conformité moyenné pour un élément non simplicial est exactement le même que pour le simplexe. Cependant, même si le comportement du coefficient est semblable pour les autres types de déformation, la valeur de celui-ci varie légèrement d'un type d'élément à l'autre. Mais cette approche par moyennage du coefficient de non-conformité des éléments non simpliciaux est tout de même jugée assez précise pour son utilisation dans le calcul des contributions des éléments à la fonction coût. D'autant plus qu'à convergence de l'algorithme, les éléments ne changent plus beaucoup et que la métrique devient linéaire sur ceux-ci, atténuant la différence entre les coefficients des éléments voisins de types différents.

### 3.2.2 Algorithme de lissage

Dans le but de minimiser la fonction coût présentée plus haut, un algorithme basé sur celui utilisé par Seveno (1998), qui constitue une modification à un algorithme de

Hooke-Jeeves, a été développé. L'approche générale de cet algorithme de minimisation de la fonction coût peut être qualifiée de "force brute" puisque la technique employée n'est aucunement basée sur l'évaluation de dérivées de la fonction coût.

À l'échelle globale du maillage, un schéma itératif de Gauss-Seidel est utilisé, où chaque sommet est déplacé dans un ordre arbitraire. Typiquement, cet ordre est simplement celui dans lequel les sommets sont stockés. Ce schéma modifie immédiatement la position du sommet déplacé de sorte que les sommets voisins peuvent être immédiatement influencés par la nouvelle position du sommet. La position optimale de chaque sommet est déterminée par échantillonnage de la fonction coût à plusieurs positions autour de la position actuelle du sommet et en choisissant celle obtenant la plus basse valeur selon l'équation 3.10. Avec cette approche, le coût de calcul global est directement lié au nombre d'évaluations de la fonction coût et donc au nombre de points d'échantillonnage autour de chaque sommet. Plusieurs essais ont été effectués pour augmenter l'efficacité de l'algorithme en réduisant le nombre de points d'échantillonnage au minimum durant chaque itération globale.

Ces tests ont permis de concevoir une approche d'optimisation de la position des sommets dans laquelle le plus de sommets possible sont déplacés le plus rapidement possible sans nécessairement tenter d'identifier d'emblée la position optimale de chaque sommet, puisque celle-ci sera ensuite modifiée par le déplacement des sommets voisins. Ces essais ont aussi permis d'observer que les sommets ont tendance à se déplacer en groupe et que, lorsqu'un des groupes commence à se déplacer dans une direction, ils tendent aussi à continuer à se déplacer dans la même direction pendant quelques itérations globales.

À la suite à ces observations, une méthode permettant de stocker l'historique de déplacement d'un sommet a été mise au point. Cette information distingue trois états possibles pour un sommet, soit : `PEUT_BOUGER`, `EN_MOUVEMENT(n)` et `CONVERGÉ`. L'approche globale de lissage est décrite dans l'algorithme 1. Il est important de mentionner que l'algorithme est ici montré pour le lissage d'un maillage en deux dimensions, mais son extension en trois dimensions est directe.

Initialement, tous les sommets sont identifiés avec l'état `PEUT_BOUGER`, qui indique que de nouvelles positions peuvent être échantillonnées dans toutes les directions. L'évaluation de la position optimale d'un sommet pouvant bouger est décrite dans l'algorithme 2. Quand une meilleure position pour un sommet est déterminée, son état est changé pour `EN_MOUVEMENT(nmax)`, et la direction du mouvement pour se

rendre de sa position initiale à sa nouvelle est stockée. L'état **EN\_MOUVEMENT**( $n$ ), avec  $1 \leq n \leq n_{\max}$ , indique que, pour ce sommet, seulement la position dans la direction stockée doit être évaluée durant les prochaines  $n$  itérations globales de la procédure de lissage. Ce choix réduit considérablement le nombre d'évaluations de la fonction coût, qui nécessite l'intégration de la métrique spécifiée en plusieurs points de Gauss qui doivent être localisés dans le maillage de fond initial sur lequel la métrique est définie. Le troisième état d'un sommet, **CONVERGÉ**, est obtenu lorsque l'algorithme 2 échoue dans sa recherche d'une meilleure position pour le sommet et que la fraction de déplacement est plus petite que la fraction de déplacement minimale  $\delta_{\min}$ .

Le nombre d'itérations globales maximum est spécifié par l'utilisateur de façon à terminer le calcul dans le cas où la convergence globale ne pourrait être atteinte. Durant une itération globale, tous les sommets dans des états autres que **CONVERGÉ** sont déplacés. La procédure est jugée globalement convergée quand tous les sommets sont dans l'état **CONVERGÉ**. Ce critère de convergence est très restrictif mais nécessaire dans les cas où quelques sommets doivent voyager de grandes distances avec de très petits déplacements à chaque itération alors que la majorité des sommets est dans l'état **CONVERGÉ**. L'utilisation d'un critère moins serré pourrait atteindre la convergence alors que plusieurs sommets sont encore loin de leur position optimale et qu'ils auraient probablement causé le déplacement de plusieurs sommets déjà **CONVERGÉ** en se rendant à leur position optimale.

Afin d'identifier la position optimale d'un sommet dans l'état **PEUT\_BOUGER**, un échantillonnage spatial des positions potentielles est effectué une fois par itération globale, comme décrit dans l'algorithme 2. Cette échantillonnage considère  $3^d - 1$  positions réparties de façon cartésienne autour du sommet. Cette grille est construite avec un pas uniforme selon chaque direction logique. Ce pas est calculé comme étant la fraction de déplacement  $\delta$  multipliée par  $L$ , la longueur euclidienne moyenne des arêtes connectées au sommet en mouvement. La fraction de déplacement est stockée par le sommet et elle est modifiée dynamiquement suivant les résultats de l'évaluation de la fonction coût. La valeur de la fonction coût à chaque échantillon ( $FC_{test}$ ) est comparée avec la valeur à la position initiale  $FC_{initial}$ . Si elle est plus petite, le sommet est déplacé à cette position et, pour anticiper les mouvements suivants, la fraction de déplacement  $\delta$  est augmentée d'un facteur  $c$  de la façon suivante :

$$\delta_{i+1} = c\delta_i \quad (3.11)$$

où  $i$  représente l'itération courante, la fraction de déplacement restant limitée supérieurement par une valeur fixée  $\delta_{max}$ . À l'opposé, si l'échantillonnage spatial ne réussit pas à déterminer une meilleure position, le sommet reste au même endroit et la fraction de déplacement est réduite de  $c$  de la façon suivante :

$$\delta_{i+1} = \frac{\delta_i}{c}, \quad (3.12)$$

sauf si elle tombe sous la valeur limite  $\delta_{min}$ . Si tel est le cas, l'état du sommet est fixé à **CONVERGÉ**. La diminution de la fraction de déplacement assure l'échantillonnage de positions plus près de la position actuelle, et permet ainsi de vérifier si la position optimale ne se situe pas entre la position actuelle et celles testées initialement. Les valeurs du tableau 3.1 ont été utilisées pour tous les exemples présentés.

Ce choix de valeurs consiste en une descente en deux itérations vers le minimum, ce qui constitue un bon compromis entre le temps de calculs et la précision des résultats. Trois étapes d'échantillonnage peuvent sembler insuffisantes, mais les différents tests ont démontré que déplacer les sommets de moins de 1% de la longueur moyenne des arêtes du voisinage affectera peu la qualité du maillage final, mais causera une augmentation radicale des coûts de calcul.

Le même type d'algorithme est appliqué aux sommets appartenant aux frontières. Dans ce cas, l'algorithme repose sur la construction paramétrique des entités géométriques constituant les frontières. Spécifiquement, la longueur  $L$  est définie en fonction de la paramétrisation de l'entité sous-jacente au lieu d'une distance euclidienne. Les positions sont donc échantillonnées sur l'entité géométrique à différentes positions paramétriques.

```

pour tous les sommets  $\in \mathcal{T}$  faire
|   Fixer sommet.état = PEUT_BOUGER;
|   Fixer sommet.δ =  $\delta_{max}$ ;
fin
pour iter = 1 à nombre d'itérations maximum faire
|   pour tous les sommets  $\in \mathcal{T}$  faire
|   |   si sommet.état = PEUT_BOUGER alors
|   |   |   Essayer de déplacer le sommet en utilisant Algorithme 2;
|   |   |   si sommet a été déplacé alors
|   |   |   |   Fixer sommet.état = EN_MOUVEMENT( $n_{max}$ );
|   |   |   fin
|   |   sinon
|   |   |   si sommet.état = EN_MOUVEMENT( $n$ ) alors
|   |   |   |   Essayer de déplacer le sommet en utilisant le vecteur de
|   |   |   |   déplacement stocké;
|   |   |   |   si sommet a été déplacé alors
|   |   |   |   |   Fixer sommet.état = EN_MOUVEMENT( $n-1$ )
|   |   |   |   sinon
|   |   |   |   |   Fixer sommet.état = PEUT_BOUGER;
|   |   |   |   |   Fixer sommet.δ =  $\delta_{max}$ ;
|   |   |   |   fin
|   |   |   fin
|   |   fin
|   |   si sommet a été déplacé alors
|   |   |   pour tous les sommet_voisin  $\in N(sommet)$  faire
|   |   |   |   si sommet_voisin.état = CONVERGÉ alors
|   |   |   |   |   Fixer sommet_voisin.état = PEUT_BOUGER;
|   |   |   |   |   Fixer sommet_voisin.δ =  $\delta_{max}$ ;
|   |   |   |   fin
|   |   |   fin
|   |   fin
|   fin
|   si Tous les sommet.état = CONVERGÉ alors
|   |   Fin des itérations globales
|   fin
fin

```

**Algorithme 1** : Procédure général de lissage.

Calculer  $FC_{initial}$  = fonction coût à la position actuelle;  
 Calculer  $L$  = longueur moyenne des arêtes autour de sommet;  
**pour**  $i = -1$  à  $1$  **faire**  
     **pour**  $j = -1$  à  $1$  **faire**  
         **si**  $(i, j) \neq (0, 0)$  **alors**  
             Tester la position =  $(x + i\delta L, y + j\delta L)$ ;  
             Calculer  $FC_{test}$  = fonction coût à la position testée;  
             **si**  $FC_{test} < FC_{meilleur}$  **alors**  
                 Fixer  $FC_{meilleur} = FC_{test}$ ;  
                 Fixer  $i_{meilleur} = i$  and  $j_{meilleur} = j$ ;  
             **fin**  
         **fin**  
     **fin**  
**fin**  
**si**  $FC_{meilleur} < FC_{initial}$  **alors**  
     Déplacer sommet à  $(x + i_{meilleur}\delta L, y + j_{meilleur}\delta L)$ ;  
     **si**  $\delta < \delta_{max}$  **alors**  
         Fixer  $\delta = c\delta$ ;  
     **fin**  
**sinon**  
     Fixer  $\delta = \delta/c$ ;  
**fin**  
**si**  $\delta < \delta_{min}$  **alors**  
     Fixer sommet.état = CONVERGÉ;  
**fin**  
**Algorithme 2** : Optimisation de la position d'un sommet (2D).

TABLEAU 3.1 Valeurs des constantes de déplacement

$\delta_{min}$	$\delta_{max}$	$c$
0.01	0.5	5

### 3.2.3 Exemples d'adaptation de maillages utilisant la minimisation de la non-conformité

#### Lissage d'un domaine concave

Lors de la conception d'un algorithme de lissage de sommets, un des principaux problèmes qui doit être enrayé est l'influence de la géométrie sur la distribution des sommets. Ici, la géométrie concave d'un tube en U est utilisée pour montrer comment la minimisation de la non-conformité réagit face à des tensions géométriques en comparaison avec d'autres méthodes.

Le premier test à effectuer sur une telle géométrie est le lissage avec métrique euclidienne spécifiée. Le maillage initial utilisé pour ce test est montré à la figure 3.29. Si ce maillage est lissé en euclidien avec des méthodes basées sur la longueur des arêtes, comme l'analogie des ressorts, les résultats sont désastreux. En effet, il a été démontré dans Sirois *et al.* (2002) que la concavité de la géométrie pouvait extraire les sommets hors du domaine pour atteindre l'état d'équilibre, donnant lieu à un maillage renversé dans le coude.

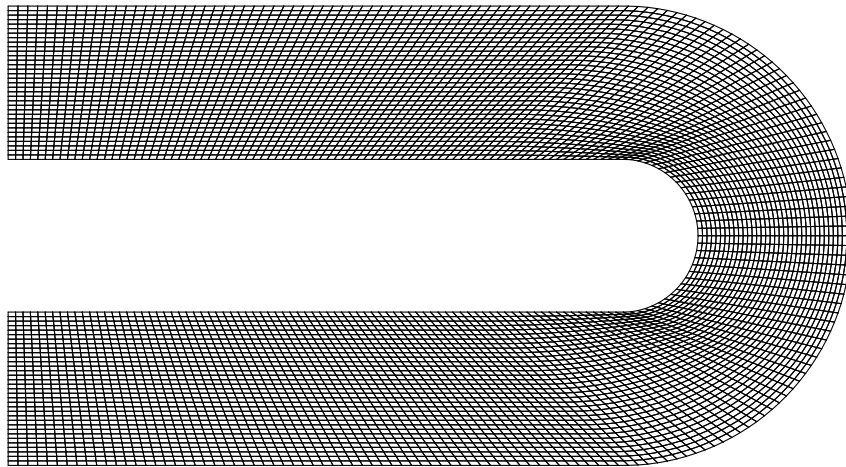


FIGURE 3.29 Maillage par interpolation transfinie du tube en U.

Lorsque le maillage de la figure 3.29 est adapté en minimisant la non-conformité et en utilisant une métrique spécifiée euclidienne, le maillage de la figure 3.30 est obtenu. Ce maillage ne montre aucun signe de concentrations non désirées près du coude de la conduite. Le maillage est lisse partout dans le domaine et selon toutes les directions. On peut aussi remarquer que le maillage est stable et symétrique dans les deux



branches de la conduite. En comparaison avec le maillage initial, qui a une mesure de non-conformité de  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 1.05$ , ce maillage obtient un coefficient considérablement réduit à  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 0.762$ , ce qui est excellent compte tenu de la topologie fixe du maillage. On peut aussi remarquer que l'optimisation est sensible à la forme et tend à générer des éléments orthogonaux près des parois. Cette caractéristique est souvent recherchée en CFD lors de l'utilisation de modèles de turbulence utilisant des lois de parois logarithmiques, mais n'est généralement pas inhérente aux méthodes de génération de maillages. L'orthogonalité aux parois doit souvent être spécifiée par contrainte, mais dans le cas de la minimisation de la non-conformité, celle-ci est directement liée à la forme de l'élément de référence.

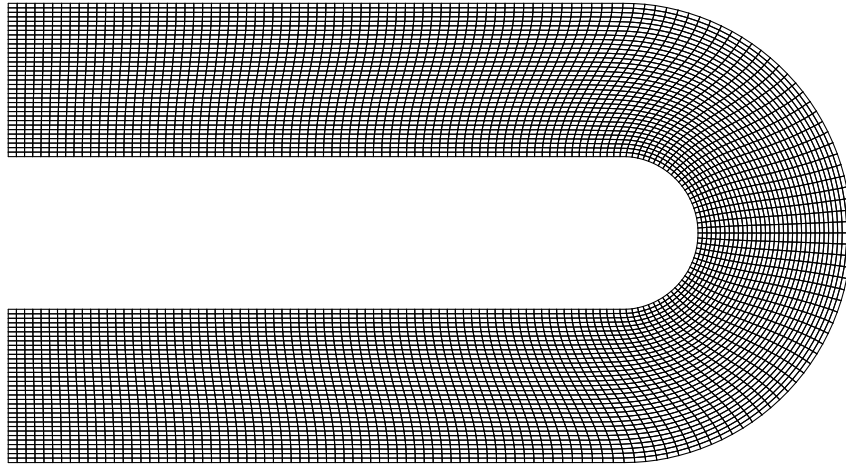


FIGURE 3.30 Maillage du tube en U lissé avec métrique euclidienne spécifiée.

### **Adaptation *a posteriori* du maillage hybride d'un profil RAE2822 avec choc**

Le prochain cas étudié est celui d'un profil RAE2822 soumis à des conditions d'écoulement transsonique. Ce profil est un cas de calibration reconnu dans le domaine de la CFD, car il contient plusieurs caractéristiques importantes des écoulements, telles que les chocs, les couches limites et les points de stagnation. Des données expérimentales sont aussi disponibles pour une panoplie de configurations et de conditions d'écoulement pour fins de comparaison. Du point de vue de l'adaptation de maillage, la présence du choc, anisotrope par définition, permet de valider l'approche

d'adaptation étudiée.

Cette fois, un processus d'adaptation complet est utilisé. Le processus global de résolution-adaptation utilisé pour ce cas de validation est celui présenté à la figure 1.1. La convergence globale de ce processus n'est pour le moment pas automatisée. Par conséquent, l'augmentation de la précision des résultats et la détermination de l'état de convergence de l'adaptation sont encore déterminées manuellement par l'utilisateur lors de l'analyse des résultats de chacune des itérations.

La méthode de lissage par minimisation de la non-conformité est implantée au sein de *OORT*. Cette bibliothèque, décrite au chapitre 2, permet d'utiliser des méthodes de modifications topologiques dans les régions de simplexes et de terminer l'adaptation de maillage par le lissage sur tous les types d'éléments.

Pour cette étude, le cas 9 présenté dans Thibert *et al.* (1979) a été choisi. Les conditions d'opération spécifiques à ce cas sont résumées dans le tableau 3.2. Ces conditions représentent celles utilisées pour l'expérimentation sur le profil dans un tunnel à vent entouré de murs. Il est bien connu que ces murs ont une influence sur l'écoulement et donc sur les résultats expérimentaux. Dans la simulation numérique, le champ de pression à l'infini est simulé en négligeant les effets des murs si la géométrie ayant servi à faire les expériences n'est pas connue. Il faut donc appliquer une correction aux conditions expérimentales de manière à obtenir des résultats de simulation correspondant à l'expérimentation.

TABLEAU 3.2 Conditions d'opération, RAE2822, Cas 9

$\alpha$	3.19°
$M_\infty$	0.730
$Re$	$6.5 \times 10^6$

Dans Martinelli et Jameson (1988), il est mentionné que l'angle d'attaque d'un profil aérodynamique en CFD doit être choisi de façon à ce que le coefficient de portance obtenu sur un bon maillage corresponde à celui obtenu lors des expérimentations. Selon le rapport de Thibert *et al.* (1979), le coefficient de portance pour ces conditions est de 0.803. Après une étude faite avec un maillage raffiné, il a été déterminé que pour le résolveur utilisé et ces conditions, le même coefficient de portance est atteint pour un angle d'attaque numérique de 3.04°. Pour ce test, le résolveur Navier-Stokes compressible couplé FLUENT avec un modèle de turbulence à une seule équation de

Spalart-Allmaras sont utilisés.

Le maillage initial généré pour l'étude d'adaptation de ce profil est montré à la figure 3.31. Il s'agit d'un maillage hybride composé de quadrilatères sur la frontière du profil et de triangles à l'intérieur du domaine. La région simulée correspond à 40 cordes de long sur 20 cordes haut. Sans adaptation, on peut déjà voir que le maillage initial ne possède pas une densité de sommets suffisante pour obtenir une solution satisfaisante, surtout dans les régions du choc sur l'extrados et dans la région du sillage.

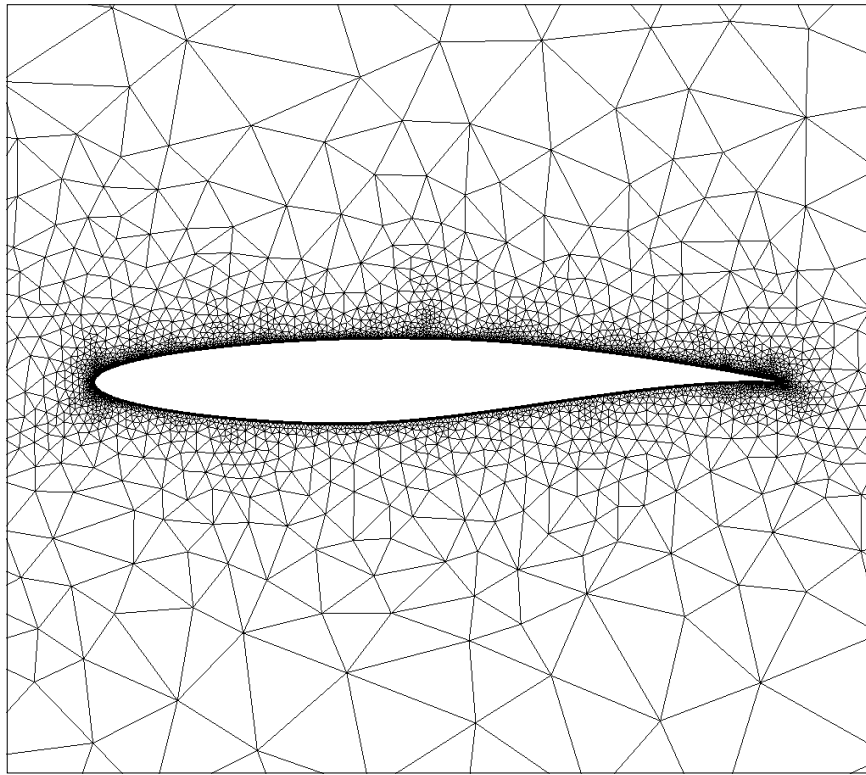


FIGURE 3.31 Maillage initial du profil RAE2822.

La solution du nombre de Mach sur le maillage est montrée à la figure 3.33. Comme prévu, ce maillage n'a pas généré de résultats très précis. En particulier, dans la région du choc, où l'on s'attend à un changement important de la pression et de la vitesse au travers d'une ligne extrêmement mince. Ici, le nombre de Mach diminue moins rapidement que désiré. On peut comparer le coefficient de pression de cette solution avec la courbe expérimentale, voir figure 3.34. Ce graphique montre que le choc détecté est mal positionné et que son amplitude est trop faible. Après l'obtention

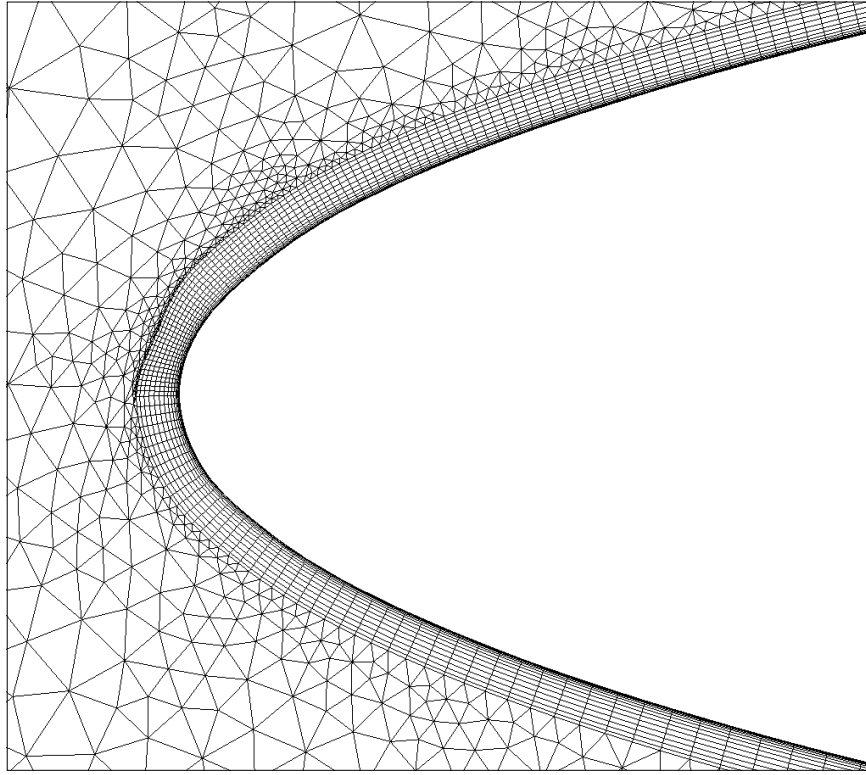


FIGURE 3.32 Maillage initial du profil RAE2822, bord d'attaque.

de ces résultats sur le maillage initial, l'adaptation est lancée en utilisant l'estimation de l'erreur d'interpolation sur le nombre de Mach pour construire la métrique spécifiée. Cette variable fonction de la vitesse, de la densité et de la température est très représentative de l'écoulement transsonique autour du profil et elle permettra à l'algorithme d'adaptation de détecter les endroits critiques pour la résolution dans ce domaine.

Les figures 3.36 et 3.35 montrent l'évolution de la non-conformité et du facteur de forme  $\eta$  défini à l'équation 2.3 durant l'itération 10 du processus global d'adaptation pour laquelle la qualité de la solution a été jugée suffisante pour arrêter le processus. On remarque que les deux critères ont une tendance générale inverse durant l'itération. Les discontinuités proviennent des moments où des modifications topologiques sont faites entre deux itérations de lissage. Puisque ces opérations ne minimisent pas directement la non-conformité, elles ont tendance à l'augmenter, pour mieux la redescendre quand le lissage recommence. Ces graphiques nous permettent de conclure que, même combiné, avec d'autres opérations, le lissage par minimisa-

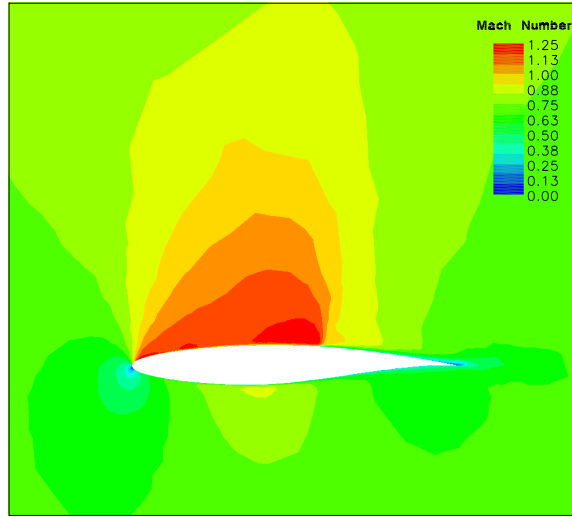


FIGURE 3.33 Solution initiale du profil RAE2822, nombre de Mach.

tion de la non-conformité réduit celle-ci de façon considérable. Cette augmentation de qualité en termes de non-conformité est aussi appuyée par l'augmentation du facteur de forme, une mesure de qualité reconnue dans le domaine. Après 10 itérations globales, le maillage final et sa solution sont montrées aux figures 3.37 et 3.38.

On remarque que l'adaptation de maillage a causé une augmentation marquée du nombre d'éléments dans les régions importantes, particulièrement dans la région du choc, où le maillage définit clairement la position du choc et sa nature anisotrope. La densité de sommets a aussi augmenté dans la région du point de stagnation au bord d'attaque, au bord de fuite et dans le sillage. Même dans la région anisotrope, les éléments près de la paroi tendent à conserver l'orthogonalité avec celle-ci. Le maillage adapté génère un coefficient de portance de 0.800, ce qui est très près de la valeur prédite de 0.803, en considérant que le maillage initial, lui, possède un coefficient de portance de 0.784. La courbe du coefficient de pression obtenue démontre aussi l'efficacité du maillage adapté pour capturer la position et l'intensité du choc. Les résultats obtenus sur ce maillage sont semblables à ceux montrés dans Martinelli et Jameson (1988), à l'exception de l'amplitude du choc, qui est très difficile à obtenir correctement tant de façon numérique qu'expérimentale.

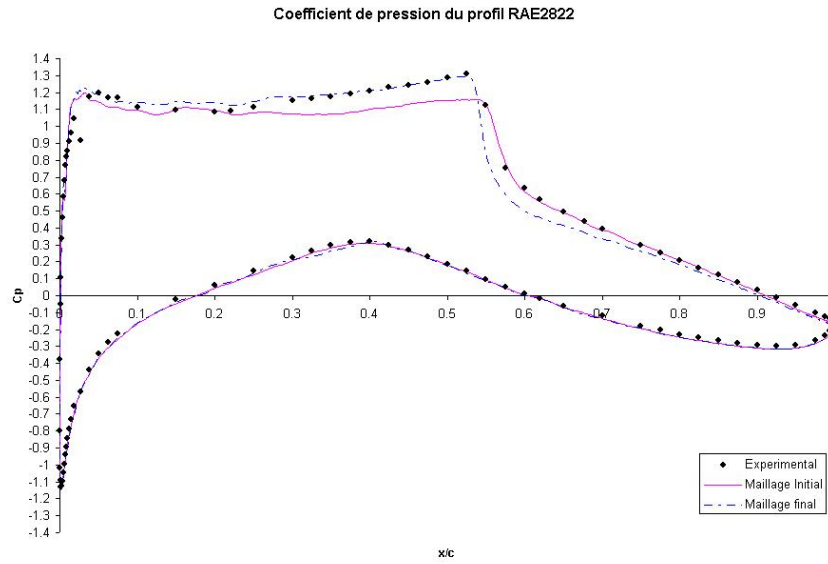


FIGURE 3.34 Coefficient de pression autour du profil RAE2822.

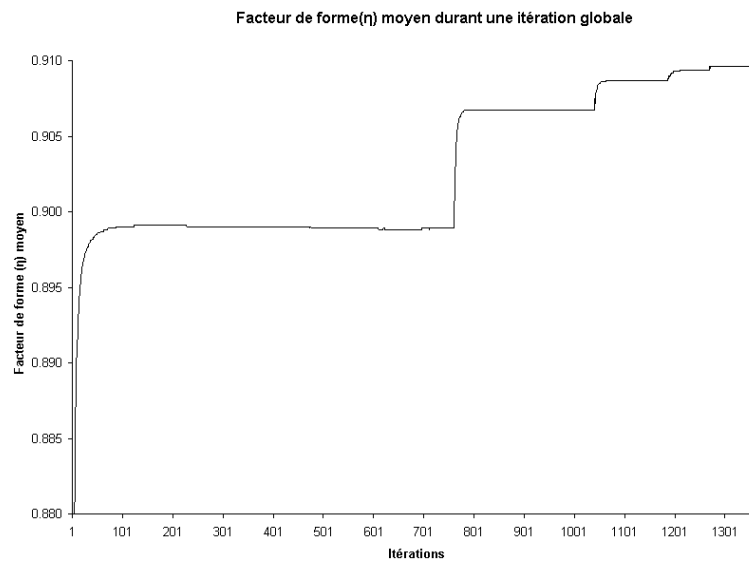


FIGURE 3.35 Évolution du facteur de forme ( $\eta$ ) au cours d'une itération globale.

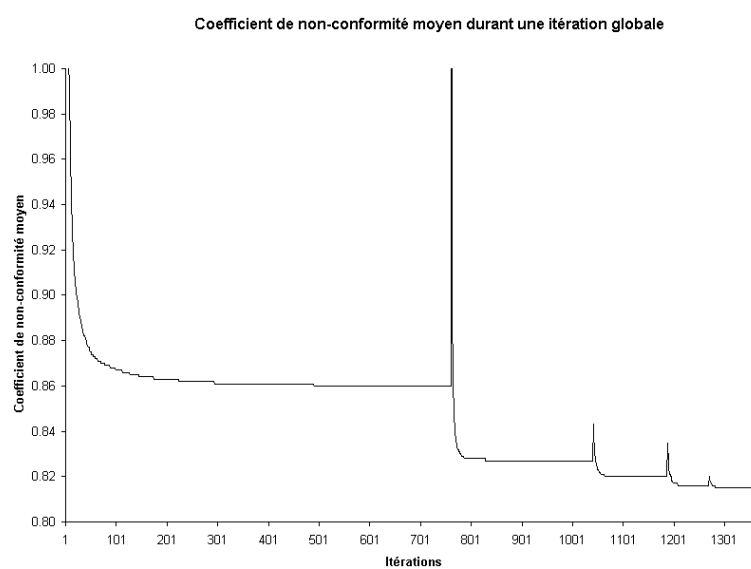


FIGURE 3.36 Évolution du coefficient de non-conformité au cours d'une itération globale.

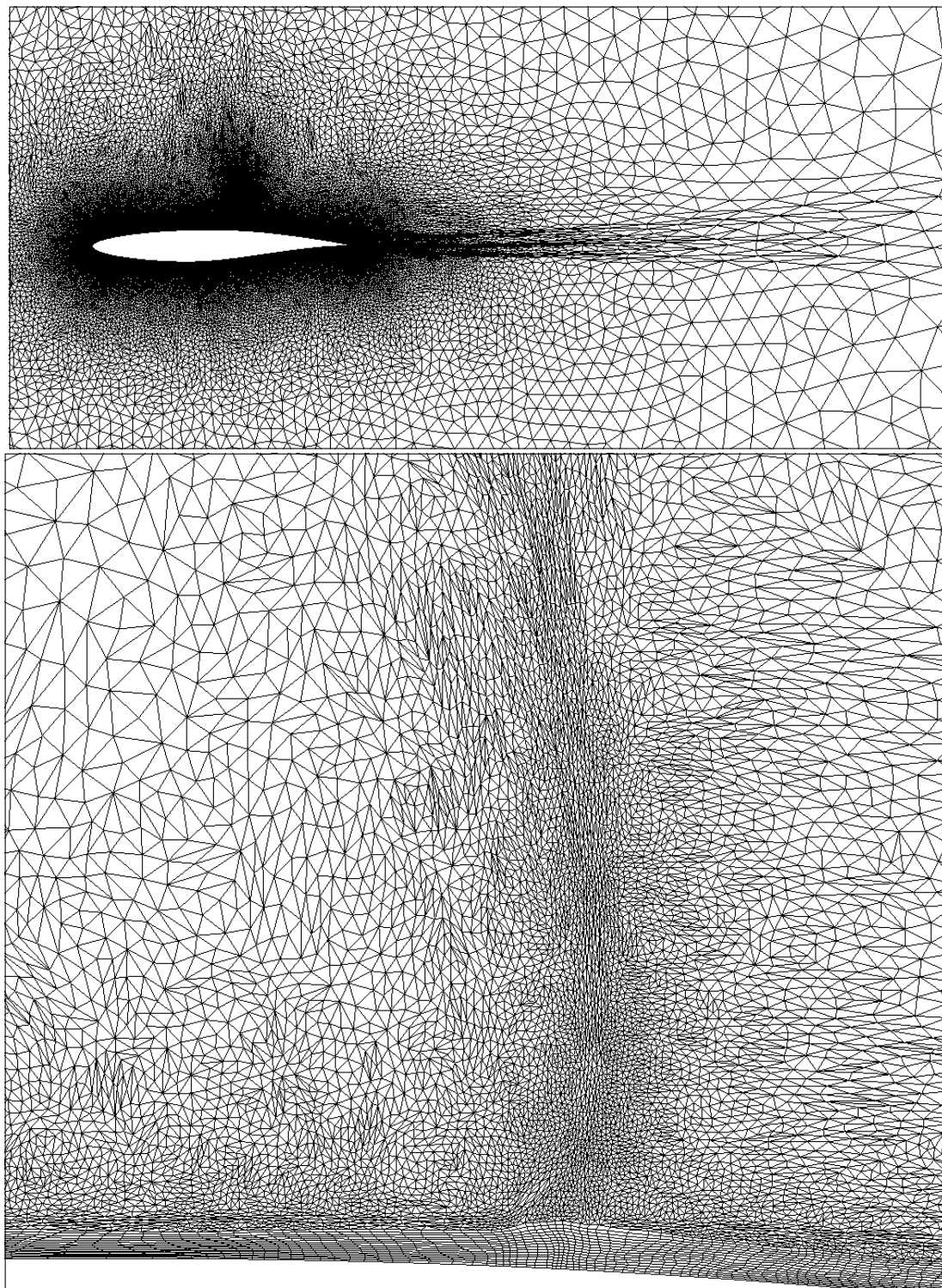


FIGURE 3.37 Maillage du profil RAE2822 après 10 itérations d'adaptation.



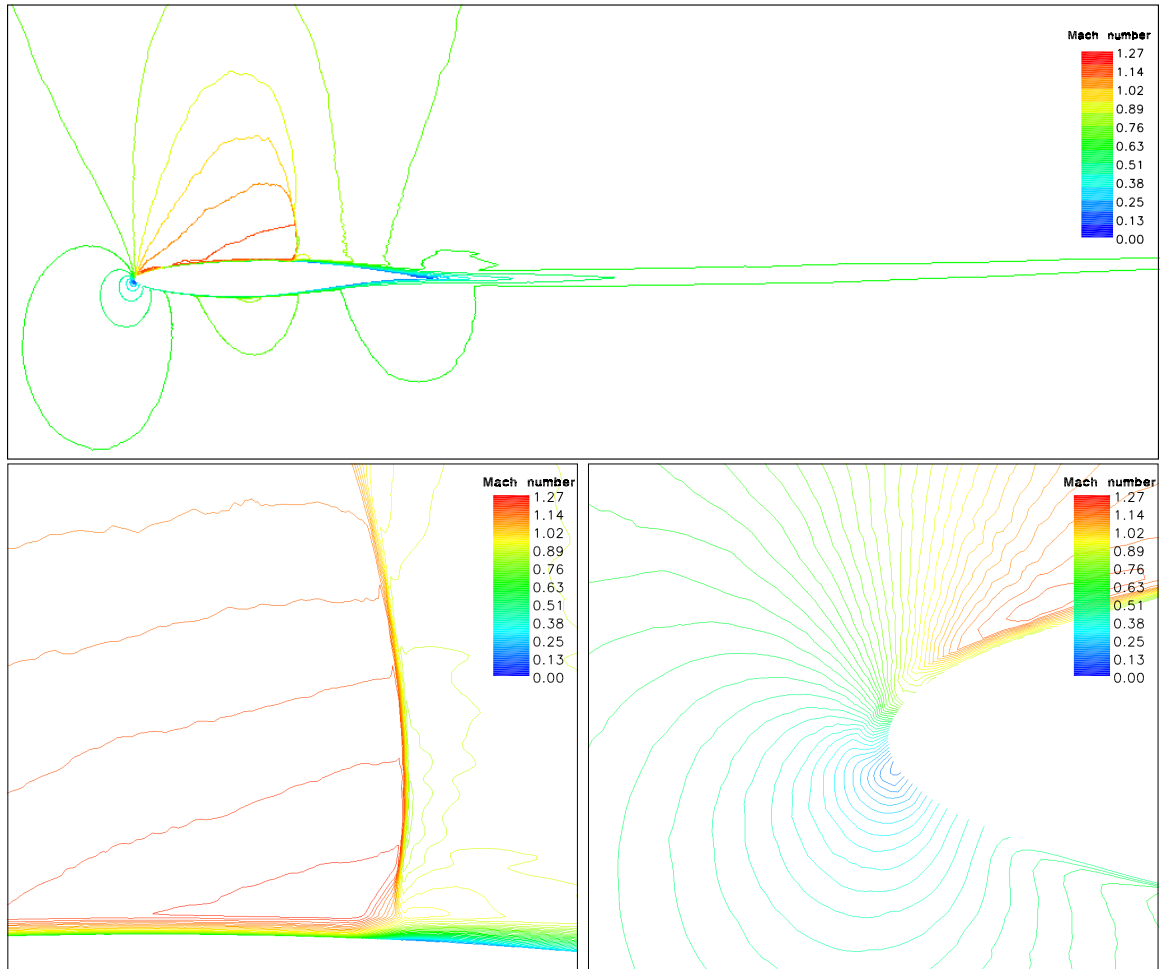


FIGURE 3.38 Solution du profil RAE2822 après 10 itérations d'adaptation.

### 3.3 Applications de l'approche développée à un cas de combustion

Ayant montré la validité de l'approche d'adaptation par minimisation de la non-conformité sur des cas académiques en deux dimensions et en trois dimensions à la section précédente et dans l'article Sirois *et al.* (2010a), nous pouvons maintenant l'appliquer à un cas d'écoulement réactif turbulent. Cette section présente une synthèse de l'analyse de l'adaptation de maillage faite sur une chambre de combustion réelle présentée dans le troisième article associé à ce projet de recherche, qui peut être consulté à l'annexe C.

#### 3.3.1 Présentation du cas étudié

Le cas choisi pour cette étude est celui d'une chambre de combustion expérimentale présentée dans Lewis et Smoot (1981). Il est vrai que ce type de géométrie ne représente pas directement un problème de l'échelle d'une chaudière industrielle, mais il présente néanmoins plusieurs des caractéristiques d'un problème de combustion dans une chaudière. En effet, ce problème peut être vu comme représentant une petite section d'un foyer de chaudière, la section faisant face à un brûleur où le front de flamme est présent. Ce cas a été spécifiquement choisi puisqu'il génère une flamme turbulente de diffusion sans pré-mélange, exactement du même type que celle de la majorité des équipements industriels de la taille des chaudières. Il existe aussi, pour ce cas, des résultats expérimentaux Lewis et Smoot (1981) et numériques Smith et Smoot (1981) qui faciliteront l'analyse des résultats.

La géométrie est celle d'une chambre de combustion axisymétrique. Le maillage et l'adaptation seront faits sur un plan en deux dimensions, mais les simulations seront exécutées en trois dimensions sur une tranche de cinq degrés, extrudée à partir du maillage en deux dimensions. La figure 3.3.1 montre une représentation non à l'échelle de la géométrie utilisée pour générer les maillages utilisés au cours de cette étude.

#### 3.3.2 Équations régissant l'écoulement et modèles numériques utilisés

Pour ce cas, l'accent est mis sur l'utilisation de la CFD comme outil de design pour les équipements de combustion industrielle, principalement pour les chaudières industrielles. De ce point de vue, le choix des modèles est fait dans l'objectif d'obtenir

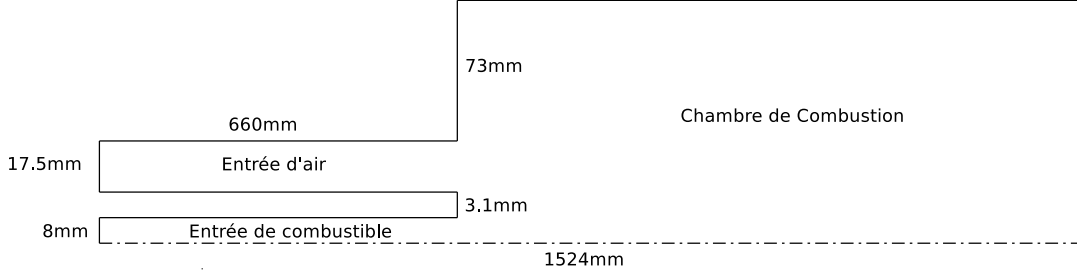


FIGURE 3.39 Géométrie non à l'échelle de la chambre de combustion.

des résultats considérés assez précis avec une puissance de calcul restreinte et de courts délais. Pour cette étude, le résolveur *Star-CD* de CD-Adapco est utilisé. Il permet de résoudre les équations standards de transport en utilisant une décomposition de Favre montrant les valeurs moyennes des quantités et l'effet des fluctuations turbulentes (voir Ferziger et Peric (1999)).

Pour modéliser l'écoulement, les équations de Navier-Stokes sont résolues en régime stationnaire. L'équation de la continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.13)$$

est couplée avec celle de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i \quad (3.14)$$

à l'aide du tenseur de contraintes  $\bar{\tau}_{ij}$  défini par :

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu_{\text{eff}} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}). \quad (3.15)$$

Le terme de viscosité  $\mu_{\text{eff}}$  se calcule ainsi :

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (3.16)$$

où  $\mu$  est la viscosité laminaire et  $\mu_t$  la viscosité turbulente qui dépend du modèle de turbulence sélectionné.

Pour cette étude, le modèle  $k$ - $\epsilon$  de Jones et Launder (1972) est utilisé pour

modéliser la turbulence. Il a été démontré que des résultats extrêmement précis peuvent être obtenus en simulation de la combustion avec des modèles tels que le "Direct Numerical Simulation" (DNS) ou le "Large Eddy Simulation" (LES). Mais ces méthodes demandent beaucoup de puissance de calcul et des maillages très denses pour donner des résultats valables, comme le démontrent Gao et Groth (2006) et Boudier *et al.* (2008). L'objectif étant de minimiser le temps et la puissance de calcul, l'utilisation du modèle  $k$ - $\epsilon$  demeure un bon choix, puisqu'il nécessite seulement deux équations de transport supplémentaires et qu'il permet d'obtenir des résultats jugés satisfaisants. Avec ce modèle, la viscosité turbulente s'écrit :

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.17)$$

et les tensions de Reynolds ( $\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}$ ) deviennent :

$$\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''} = -\mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \delta_{ij} k + \frac{2}{3} \bar{\rho} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}. \quad (3.18)$$

Les valeurs de  $k$  et de  $\epsilon$  sont calculées avec les équations de transport pour l'énergie cinétique de turbulence :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j k) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \bar{\rho} \epsilon \quad (3.19)$$

avec  $P_k$ , la production d'énergie cinétique de turbulence donnée par :

$$P_k = 2\mu_t d_{ij} d_{ij} \quad (3.20)$$

avec  $d_{ij}$  :

$$d_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.21)$$

et l'équation de transport du taux de dissipation de turbulence :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \epsilon) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \bar{\rho} \epsilon) \frac{\epsilon}{k} \quad (3.22)$$

avec les coefficients de fermeture donnés au tableau 3.3.

Dans les cas de combustion numérique, il est plus approprié de transporter l'é-

TABLEAU 3.3 Coefficients de fermeture du modèle de turbulence  $k - \epsilon$ 

$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\epsilon$	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$
0.09	1.0	1.22	1.44	1.92

nergie sous forme d'enthalpie plutôt que d'utiliser la formulation usuelle basée sur le transport de la température, puisque les changements locaux de concentrations des espèces dictent le changement de l'enthalpie de mélange grâce à laquelle la température locale peut être calculée. L'équation de transport de l'enthalpie est donc :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr}\right)\frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} = \tilde{S}_h \quad (3.23)$$

où  $\tilde{S}_h$  représente les échanges radiatifs avec le milieu ambiant. La température locale est calculée en utilisant la composition chimique locale et l'enthalpie suivant :

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left( \sum_{i=1}^N \tilde{c}_{P,i} \tilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^N h_{R_i} \tilde{m}_i \quad (3.24)$$

où  $\tilde{m}_i$  est la fraction massique de la  $i$ ème espèce et  $h_{R_i}$  son enthalpie de formation à la température de référence  $T_0$ . Toutes ces équations de transport sont ensuite résolues suivant un schéma par volumes finis et l'algorithme de résolution SIMPLE de Patankar (1980).

Il y a plusieurs options disponibles pour modéliser les écoulements réactifs. Le choix du modèle doit être fait en fonction de l'application étudiée. Ici, nous avons choisi un modèle d'équilibre chimique développé par McKenty (1992), basé sur Gordon et McBride (1971) et Jones et Whitelaw (1982). Ce modèle est spécifiquement conçu pour les écoulements turbulents avec flamme de diffusion sans prémélange du carburant et du comburant. En résumé, le modèle d'équilibre chimique calcule les concentrations locales des espèces en fonction de la fraction de mélange transportée en minimisant l'énergie libre de Gibbs. La fraction de mélange se définit comme suit :

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{\zeta} - \tilde{\zeta}_A}{\tilde{\zeta}_F - \tilde{\zeta}_A} \quad (3.25)$$

où  $\zeta$  représente la concentration massique de combustible, et les indices  $A$  et  $F$  les

conditions aux entrées de comburant et de carburant respectivement, sachant que :

$$\tilde{\zeta} = \tilde{m}_{fu} - \frac{\tilde{m}_{O_2}}{s} \quad (3.26)$$

avec  $s$ , le coefficient stœchiométrique de la réaction. La fraction de mélange  $\tilde{f}$  est transportée suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{Sc}\right)\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} = 0 \quad (3.27)$$

et résolue de la même façon que les autres équations de transport.

Une fonction de probabilité de densité présumée (PPDF), voir Khalil (1982), est utilisée pour inclure les effets des fluctuations turbulentes de la fraction de mélange sur la distribution des espèces. Ceci est fait par la résolution de l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange :

$$g = \left(f - \tilde{f}\right)^2. \quad (3.28)$$

Les valeurs de  $f$  et  $g$  sont utilisées pour déterminer la forme de la PPDF (c.-à-d. Bêta, Delta ou Dirac). Les concentrations des espèces en fonction de la fraction de mélange sont calculées et tabulées à l'avance en utilisant le modèle d'équilibre chimique. Cette opération rend le modèle d'équilibre chimique très rapide, puisque toutes les concentrations des espèces sont trouvées dans le tableau en utilisant la fraction de mélange locale et une table de la PPDF pré-intégrée. Ce type de modèle facilite aussi l'utilisation de différents comburants et carburants d'une simulation à l'autre en comparaison avec les modèles à taux de réaction fini, par exemple, qui nécessitent de définir toutes les réactions et sous-réactions pour chaque mélange de combustible.

Dans les problèmes de combustion industrielle, ayant de très grandes géométries et un pouvoir de calcul restreint, dans le but de prédire les concentrations de  $NO_X$  thermiques, nous convenons dès le départ que les éléments du maillage généré sont de volumes trop élevés pour capturer correctement les fluctuations de fraction de mélange dans le front de flamme, où les  $NO_X$  thermiques sont principalement générés, ceci pouvant engendrer de la sous-prédiction ou de la sur-prédiction du taux de production de  $NO_X$ . Donc, pour permettre de bien évaluer la capacité de l'algorithme d'adap-

tation proposé à identifier et à augmenter la qualité du maillages dans les endroits de forts gradients de température dans les géométries de tailles industrielles, il devient nécessaire d'empêcher le plus de lissage possible du champ de température. Pour cette raison, aucun moyennage par PPDF n'est utilisé pour la résolution du problème présenté ici.

### 3.3.3 Conditions frontières

Les tableaux 3.4 et 3.5 montrent les conditions frontières utilisées dans tous les essais sur la géométrie de la chambre de combustion. Ces conditions sont une interprétation de celles qui ont pu être tirées de Lewis et Smoot (1981); Smith et Smoot (1981). Quelques incohérences ont été trouvées dans ces données. En effet, les vitesses données par les auteurs ne correspondent pas aux débits fournis à la pression et température données. Pour cette raison, un choix entre conserver le vitesse aux entrées ou conserver le débit doit être effectué. Le problème a aussi été détecté dans McKenty (1992), qui a opté pour la conservation de la vitesse aux entrées. Le même principe est appliqué ici.

TABLEAU 3.4 Conditions frontières à l'entrée de combustible

Pression de référence (kPa)	93.4
Intensité de turbulence(%)	10.0
Température (K)	300.0
Vitesse (m/s)	21.3
Composition (% molaire)	
$CH_4$	85.8
$C_2H_6$	6.1
$Ar$	5.5
$N_2$	2.6

### 3.3.4 Étude de convergence du maillage

La première étape de cette étude numérique, ayant pour but de déterminer la précision des résultats obtenus avec des maillages adaptés anisotropes ainsi que le coût du processus, consiste à établir une ligne de comparaison en termes de précision des résultats et en temps de calcul. Pour ce faire, une analyse de convergence de

TABLEAU 3.5 Conditions frontières à l'entrée d'air

Pression de référence (kPa)	93.4
Intensité de turbulence (%)	10.0
Température (K)	589.0
Vitesse (m/s)	34.3
Composition (% molaire)	
$N_2$	79.05
$O_2$	21.95

maillage est utilisée. Des solutions de simulation de la chambre de combustion ont été obtenues pour plusieurs maillages hybrides isotropes avec un nombre croissant de sommets jusqu'à ce que les limites de la machine ou temporelles soient atteintes. Les résultats obtenus ont aussi été comparés aux résultats expérimentaux de manière à déterminer le niveau d'erreur introduit par les choix de modèles numériques et de conditions frontières discutés plus haut.

Les résultats en termes de nombre d'éléments de chaque maillage et de coûts de calculs sont résumés au tableau 3.6. On peut constater que pour obtenir une solution précise en combustion, un très grand nombre d'éléments est requis. L'étude a dû être arrêtée à 825 000 éléments, puisque c'était le maillage le plus fin qui pouvait être utilisé sur un seul poste de travail en des temps respectables. À partir de ce moment, il est établi que la solution obtenue sur ce maillage représente bien une solution de référence à laquelle les résultats d'adaptation seront comparés. Une analyse plus précise de ces résultats est disponible dans Sirois *et al.* (2010b) présenté à l'annexe C.

TABLEAU 3.6 Résultats de l'étude de convergence du maillage

Nombre d'éléments	Temps (1 proc.)
50 000	3.35h
75 000	5.80h
100 000	9.75h
125 000	18.2h
250 000	52.0h
500 000	197.1h
825 000	265.2h



### 3.3.5 Maillage et solution initiaux de la chambre de combustion

Le maillage initial a été volontairement choisi trop grossier afin de pouvoir générer des résultats adéquats pour en faire l'adaptation. Il est isotrope et aucune loi de concentrations à l'intérieur du domaine n'a été utilisée, comme si rien n'était connu de la solution au préalable, la seule exception étant dans les zones de peau près des murs. Le maillage initial est constitué de 8011 éléments, voir Sirois *et al.* (2010b).

Les petites cellules près des frontières ont été générées par anticipation du nombre d'éléments nécessaires dans les sections structurées après l'adaptation. Puisqu'aucune opération de raffinement ou de déraffinement n'est implantée à ce moment, trop peu de degrés de liberté sont présents initialement, ce qui empêche une bonne optimisation de la mesure, puisqu'il est impossible de satisfaire la demande de taille.

La solution obtenue sur maillage est présentée en détail dans Sirois *et al.* (2010b). On constate que le maillage manque de précision pour définir de champs scalaires adéquatement et capturer le front de flamme créé par la réaction chimique, ceci ayant pour effet de diffuser les crêtes de température. La recirculation suivant la marche inversée au-dessus de l'entrée d'air se rattache à 35 cm de l'entrée de la chambre, ce qui est loin du 42.5 cm mesuré sur la solution obtenue sur le maillage convergé.

### 3.3.6 Résultats de l'adaptation du maillage de la chambre de combustion

Le processus global de résolution-adaptation utilisé pour cette analyse est exactement le même que celui présenté pour le profil transsonique RAE2822 à la section 3.2.3. Encore une fois, la convergence du processus global est déterminée par l'analyse de la solution obtenue par l'utilisateur, et non de façon automatisée. Dans le cas de la chambre de combustion présentée ici, il a été déterminé que la solution a atteint un niveau de précision comparable à la solution de référence après cinq itérations globales.

Les maillages obtenus au cours de l'adaptation pour les itérations 2, 3 et 4 sont présentés à la figure 3.40, et le maillage final obtenu après ces cinq itérations globales est montré aux figures 3.41 et 3.42. Les solutions obtenues sur ces maillages sont montrées aux figures 3.43, 3.44, 3.45 et 3.46. Le maillage final est composé de seulement 16 450 éléments. On peut facilement voir sa nature anisotrope dans la région de cisaillement entre les jets de comburant et de combustible à l'entrée de la chambre de combustion. Beaucoup d'éléments sont générés dans cette zone en raison des change-

ments rapides de fraction de mélange et de température, qui, à leur tour, produisent des changements de densité et de vitesse de l'écoulement. La définition de la zone de recirculation de la marche est beaucoup plus claire que celle de la solution initiale. Le point de rattachement s'est déplacé à 42 cm, ce qui est beaucoup plus proche du résultat obtenu sur le maillage de 825 000 éléments qu'avec le maillage initial.

Les figures 3.47 et 3.48 montrent la zone de recirculation secondaire souvent présente dans les écoulements de type marche, au pied de celle-ci pour ce qui est des itérations 1 et 5. À l'itération 1, on voit que la recirculation est présente, mais qu'elle clairement limitée aux éléments structurés du maillage. Les éléments non structurés à cet endroit ne sont pas assez petits pour propager cette recirculation, comme l'aurait fait un maillage fin (voir figure 3.49). À l'itération 5, le résultat est différent. Avec moins d'éléments, l'adaptation anisotrope a permis aux éléments structurés de s'étirer et de s'orienter le long de cette recirculation. Celle-ci est beaucoup mieux définie que sur le maillage initial et se propage plus loin que la limite de la zone structurées. Ce résultat est comparable à celui obtenu sur le maillage raffiné.

Afin de mieux comparer d'une façon quantitative les résultats de chaque itération du processus adaptatif à ceux du maillage convergé, les mêmes courbes de la fraction de mélange sur l'axe central, de la fraction de mélange radiale et de la température radiale sont présentées pour chaque itération et pour le maillage convergé (figures 3.50, 3.51 et 3.52).

Ces courbes montrent que l'adaptation de maillage avec seulement 16 000 éléments anisotropes a augmenté le niveau de précision de la solution à un niveau similaire à celui obtenu avec 825 éléments isotropes. Il est certain que les courbes obtenues sur les maillages adaptés sont moins lisses que celles obtenues sur le maillage convergé, et ceci est directement lié au nombre d'éléments traversés par les points d'échantillonnage pour construire ces courbes. L'objectif du processus étant d'augmenter la précision de la solution utilisant un nombre limité de ressources, un sacrifice sur la précision a été fait en appliquant une mise à l'échelle sur la métrique spécifiée pour conserver le nombre de degrés de liberté à son minimum. On peut aussi être témoin de cette mise à l'échelle en regardant la différence entre les solutions aux itérations 4 et 5. La solution de l'itération 4 semble plus précise que celle de l'itération 5. Dans ce cas, la mise à l'échelle de la métrique est la cause de la génération d'éléments de volume trop élevés pour compenser la nécessité de concentrer les degrés de liberté dans le front de flamme. Ceci indique clairement que les traitements apportés aux métriques

doivent toujours être faits avec soin. Une meilleure solution aurait probablement pu être calculée en utilisant un facteur d'échelle plus élevé, mais au prix d'un nombre d'éléments plus grand dans les maillages adaptés.

Maintenant que l'augmentation du niveau de qualité en maintenant le nombre d'éléments anisotropes au minimum a été montrée, il demeure primordial de quantifier le gain de performance en coût de calcul de la procédure complète. Pour fins de comparaison, le maillage raffiné *a priori* a nécessité 265 heures de calculs pour atteindre la convergence de la solution. On peut comparer ce temps à celui obtenu pour 5 itérations d'adaptation et de calculs convergés de solution sur ces maillages, montré au tableau 3.7. Le temps total de calcul requis pour l'adaptation et la résolution des cinq itérations est d'environ 1.5 heures. Le processus d'adaptation a donc généré un résultat comparable à celui obtenu pour 825 000 éléments, et ce, en utilisant 0.5 % des ressources requises pour le maillage raffiné.

TABLEAU 3.7 Statistiques de l'adaptation de maillage de la chambre de combustion

Itération	Nb. éléments	Temps CFD (1 proc.)	Temps d'adaptation (1 proc.)
1	8 011	0.11h	0
2	10 393	0.23h	1min 20s
3	11 978	0.22h	1min 33s
4	13 958	0.33h	1min 35s
5	16 450	0.54h	1min 29s
Total		1.32h	5min 57s

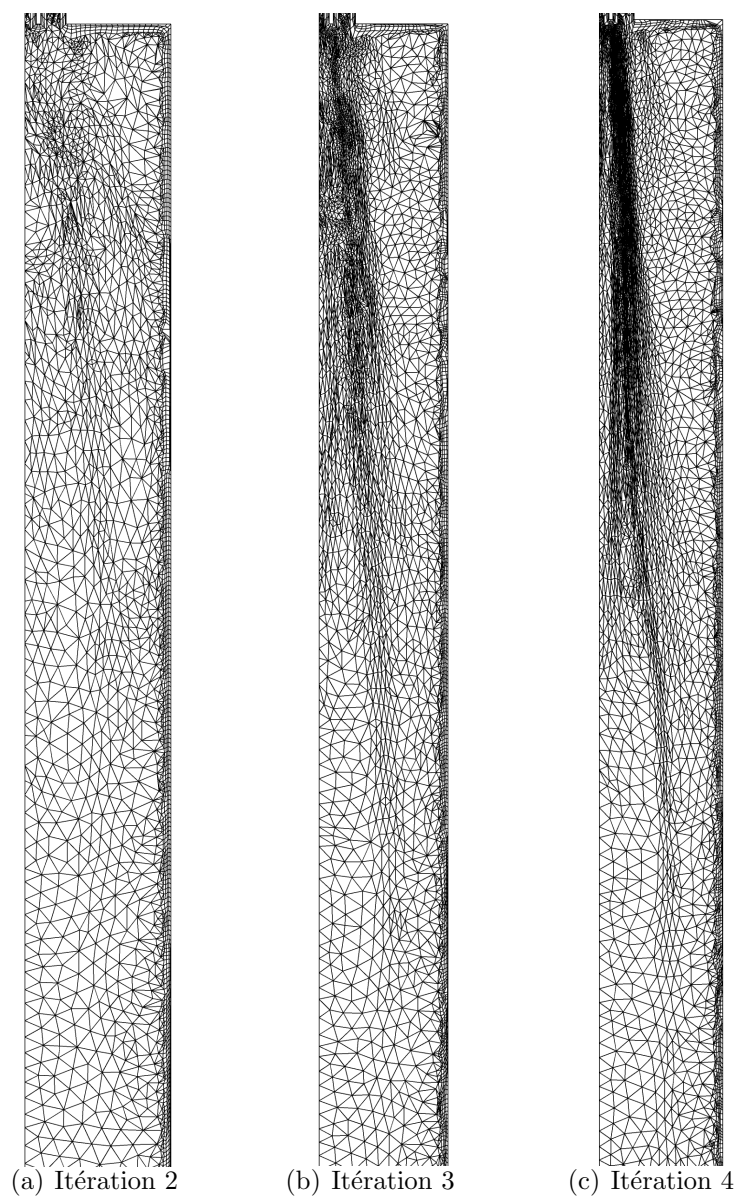


FIGURE 3.40 Maillages résultants de l'adaptation aux itérations 2, 3 et 4.

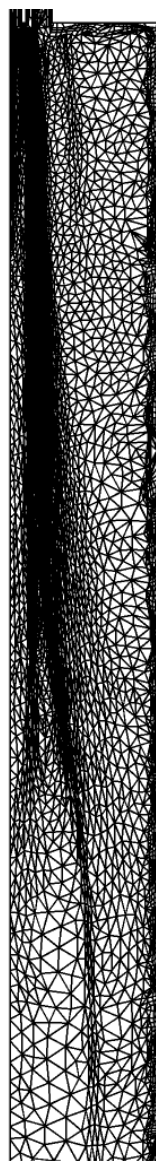


FIGURE 3.41 Maillage adapté de la chambre de combustion après 5 itérations, vue globale.

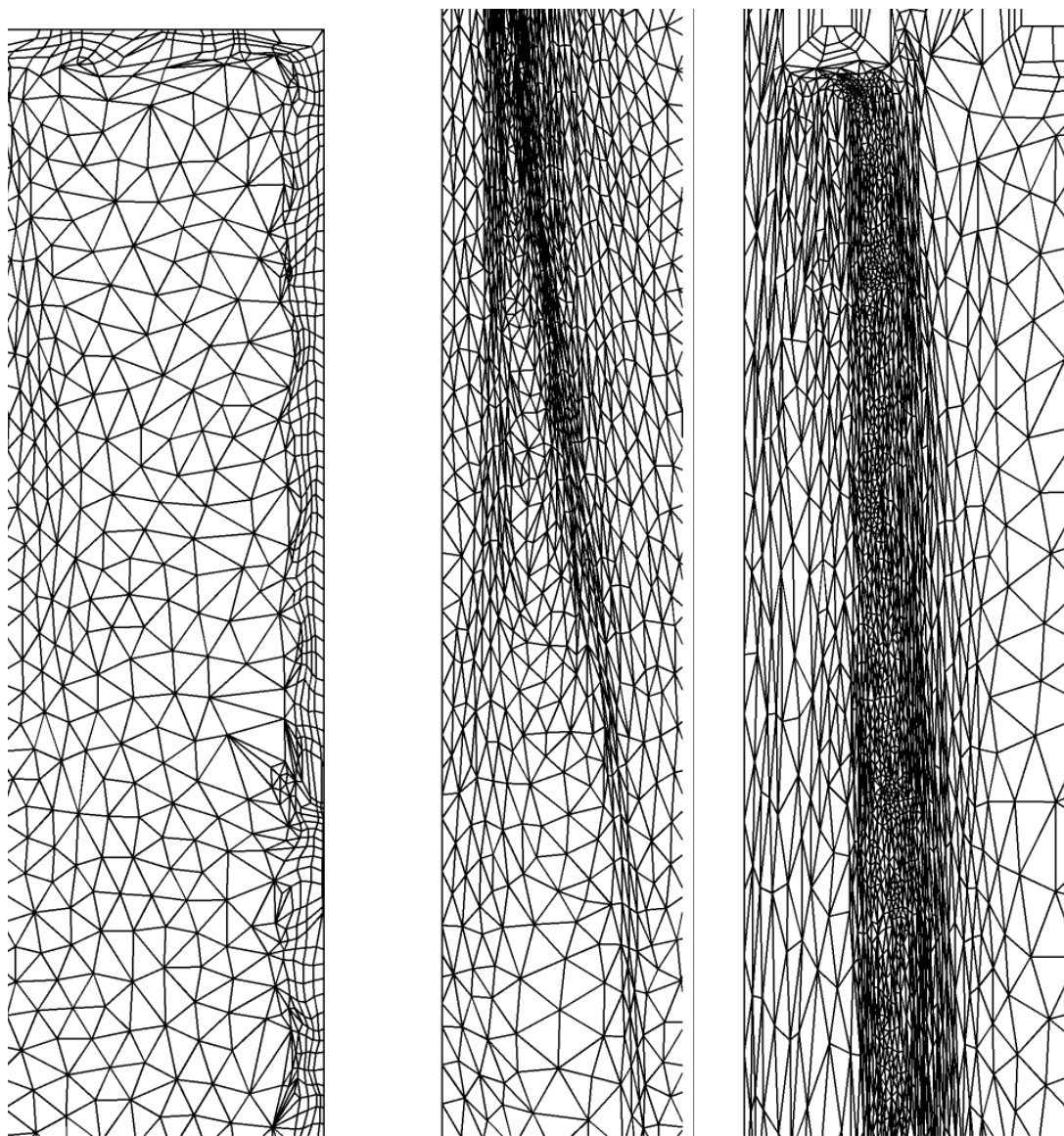


FIGURE 3.42 Maillage adapté de la chambre de combustion après 5 itérations, vues spécifiques.

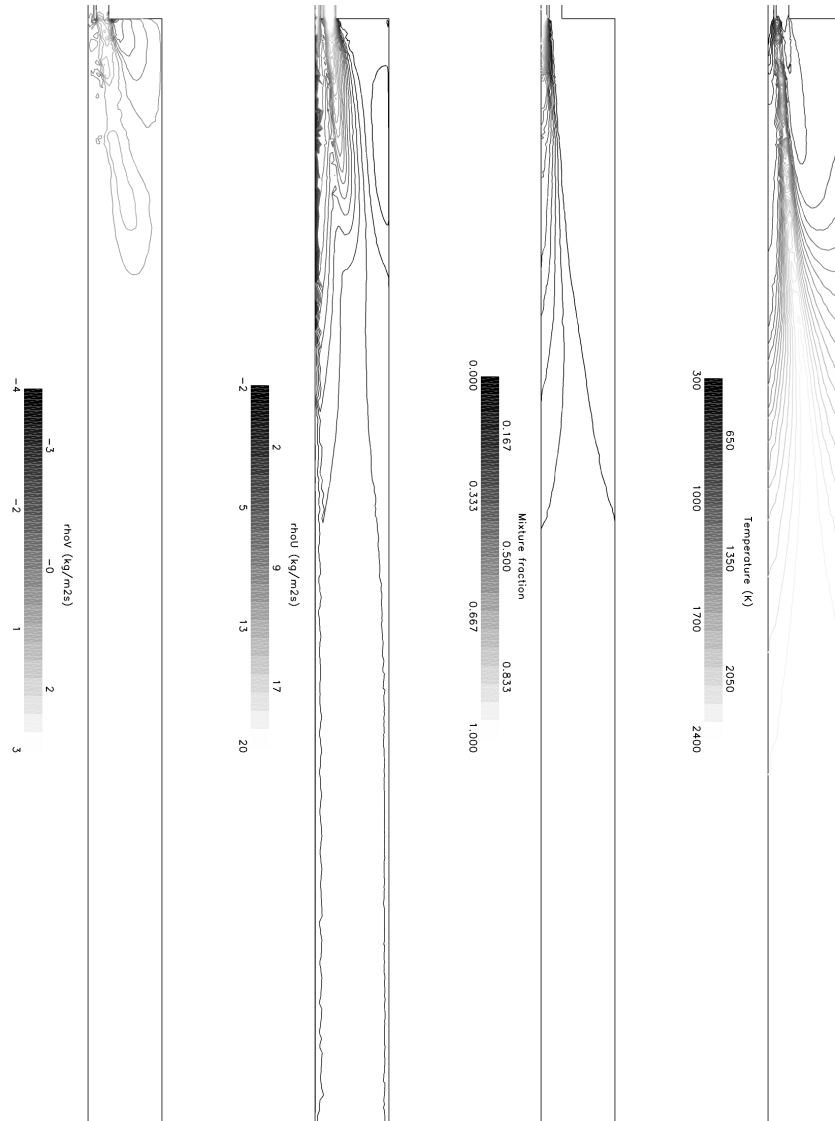


FIGURE 3.43 Solution sur le maillage de la chambre de combustion à l'itération 2.

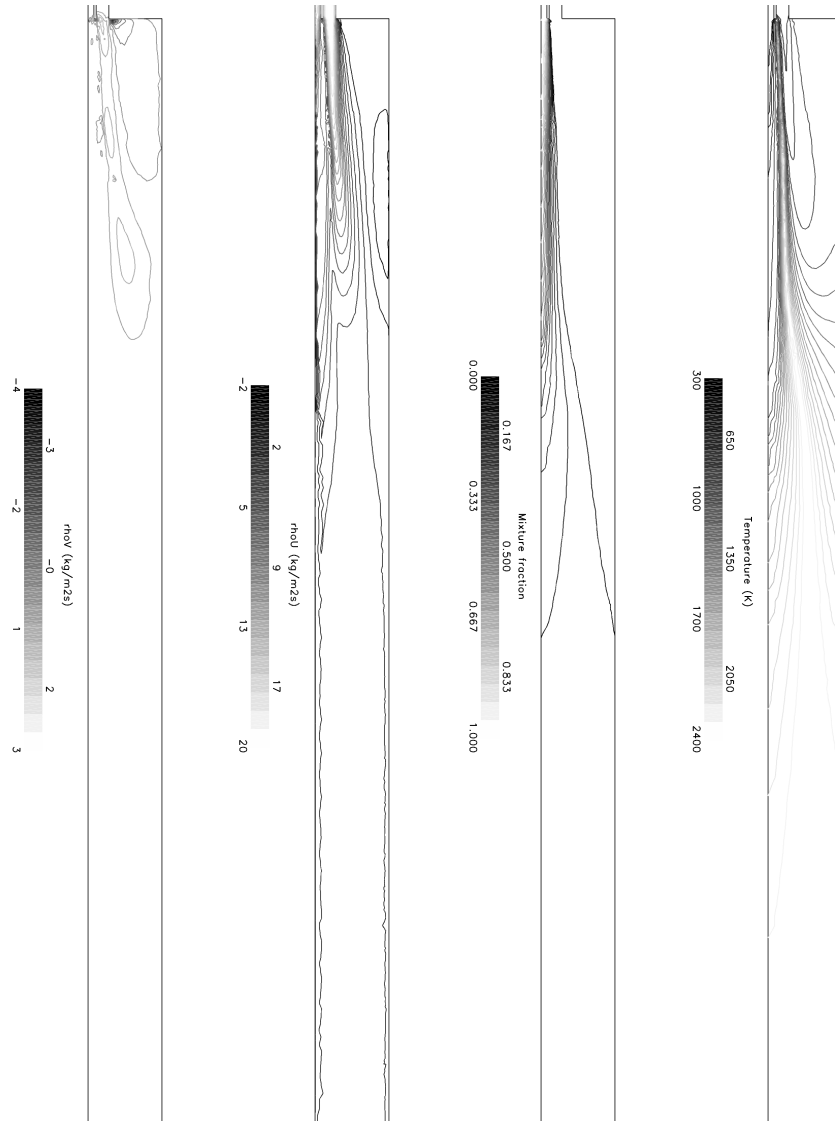


FIGURE 3.44 Solution sur le maillage de la chambre de combustion à l'itération 3.



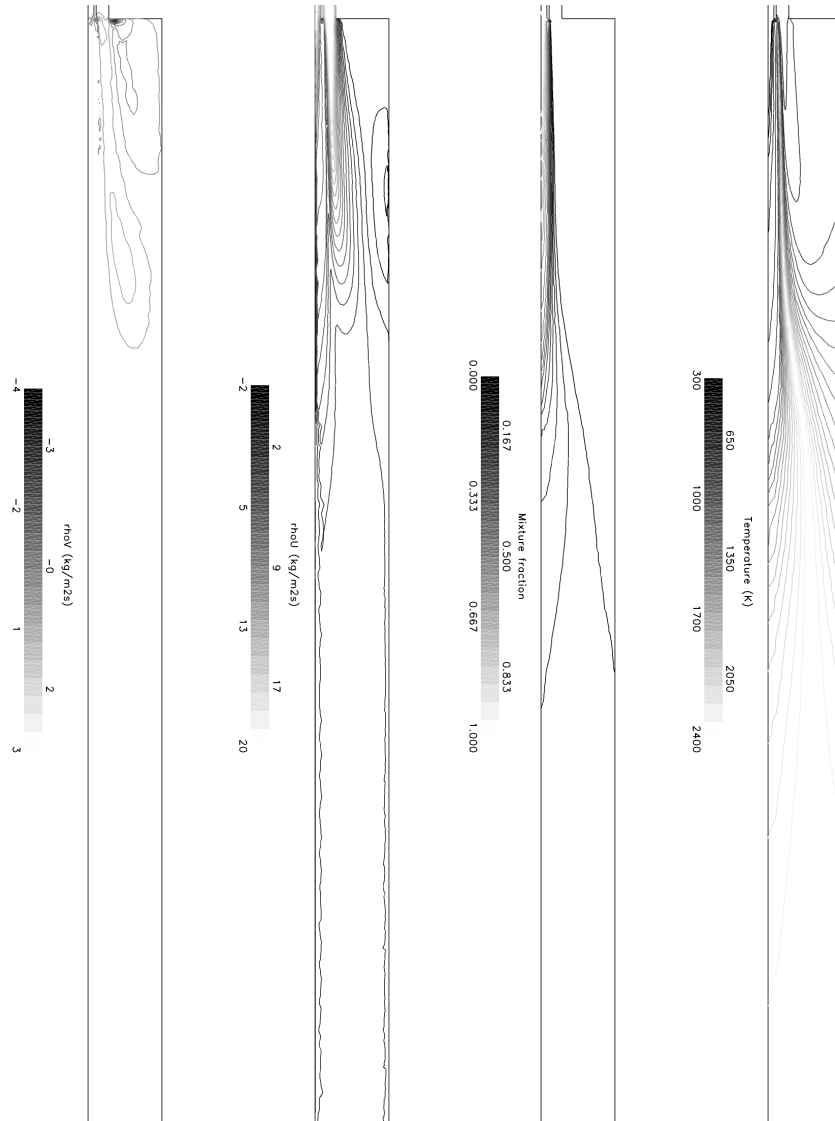


FIGURE 3.45 Solution sur le maillage de la chambre de combustion à l'itération 4.

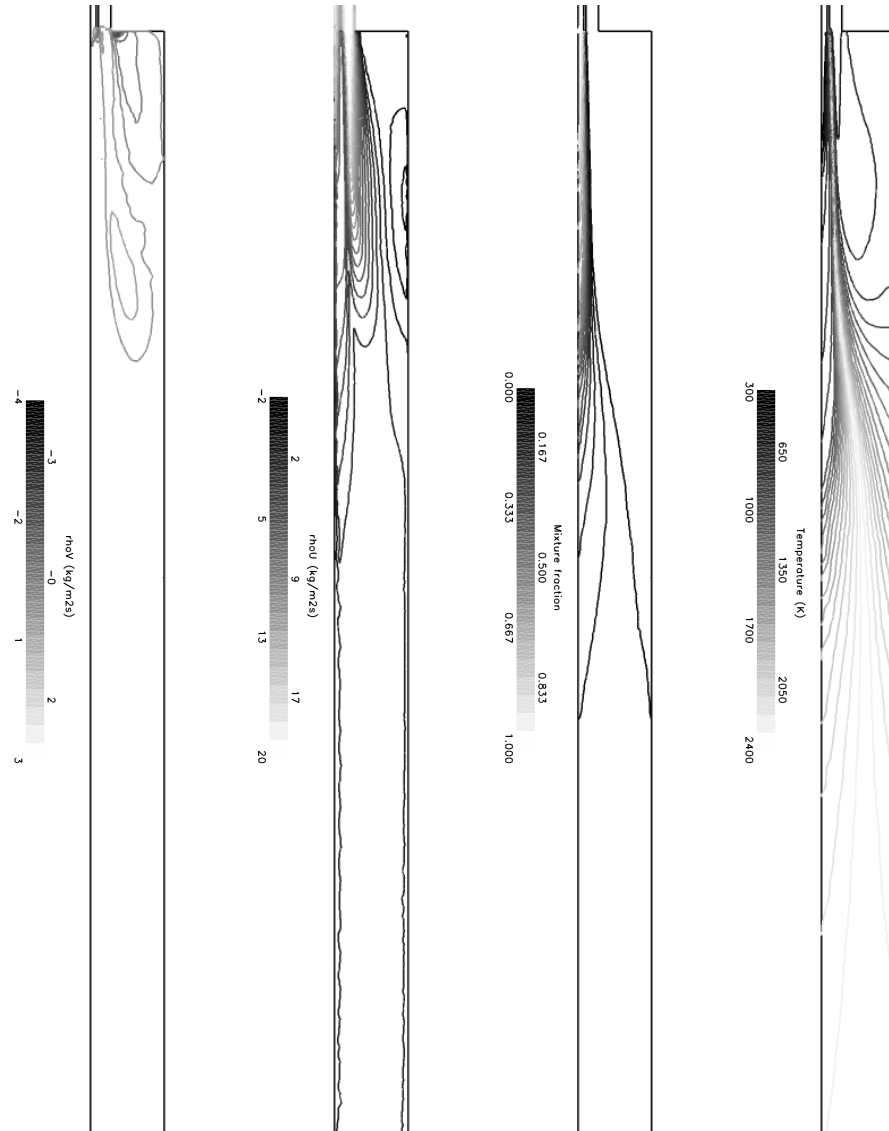


FIGURE 3.46 Solution finale sur le maillage de la de la chambre de combustion après 5 itérations.

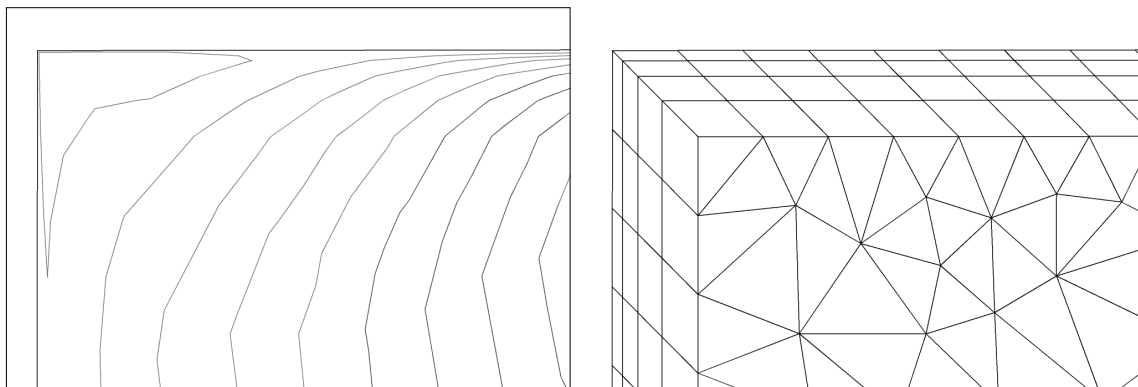


FIGURE 3.47 Zone de recirculation secondaire, itération 1.

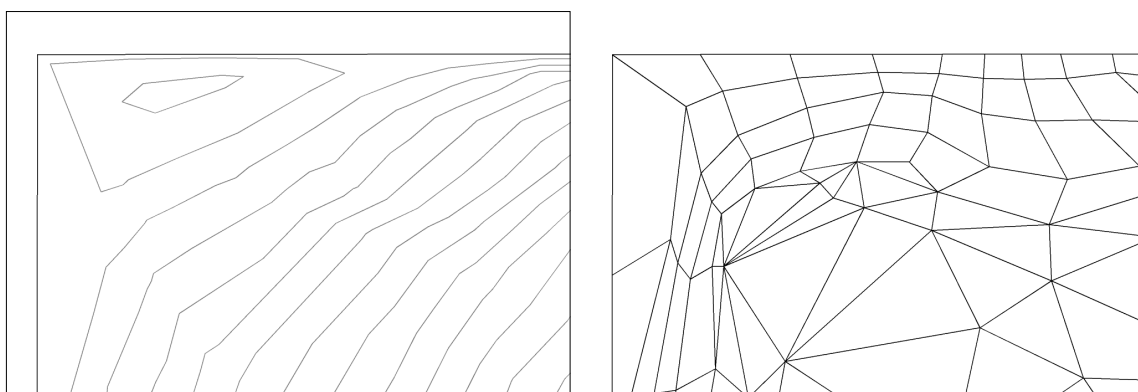


FIGURE 3.48 Zone de recirculation secondaire, itération 5.

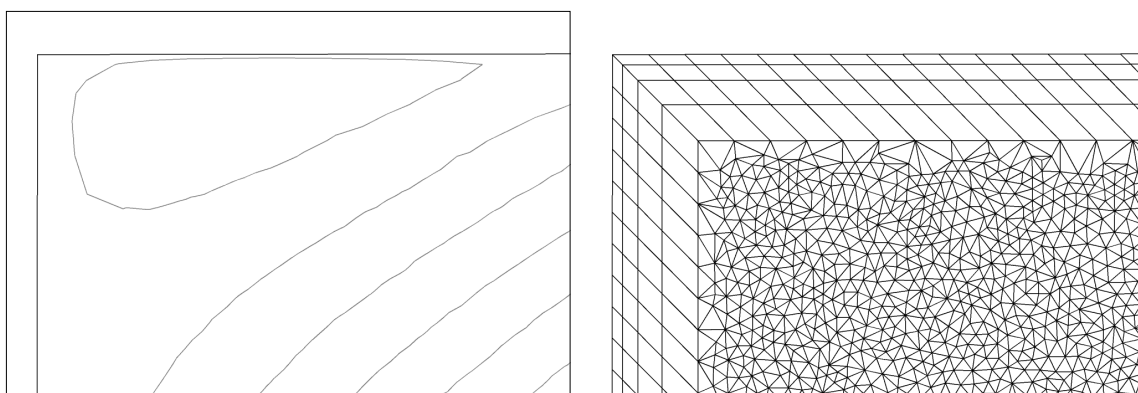


FIGURE 3.49 Zone de recirculation secondaire, maillage de 825 000 éléments.

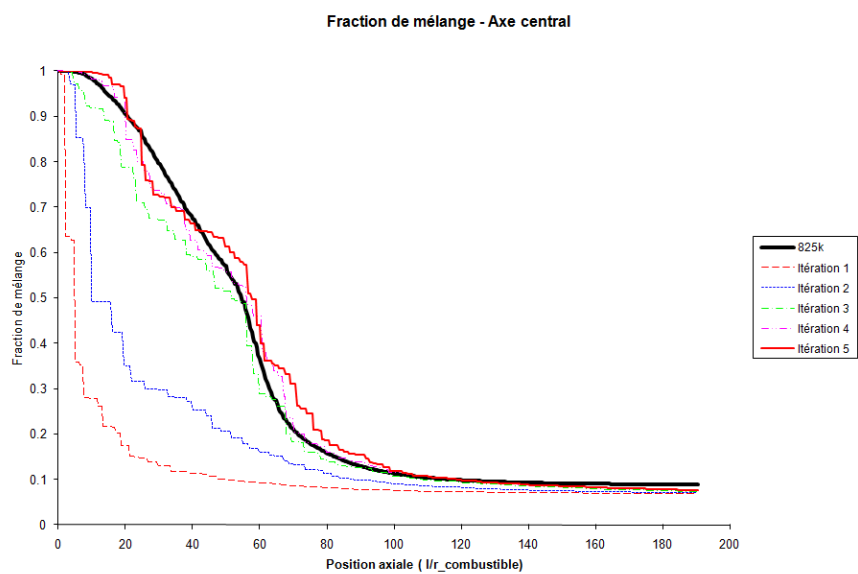


FIGURE 3.50 Adaptation de la chambre de combustion, fraction de mélange axiale.

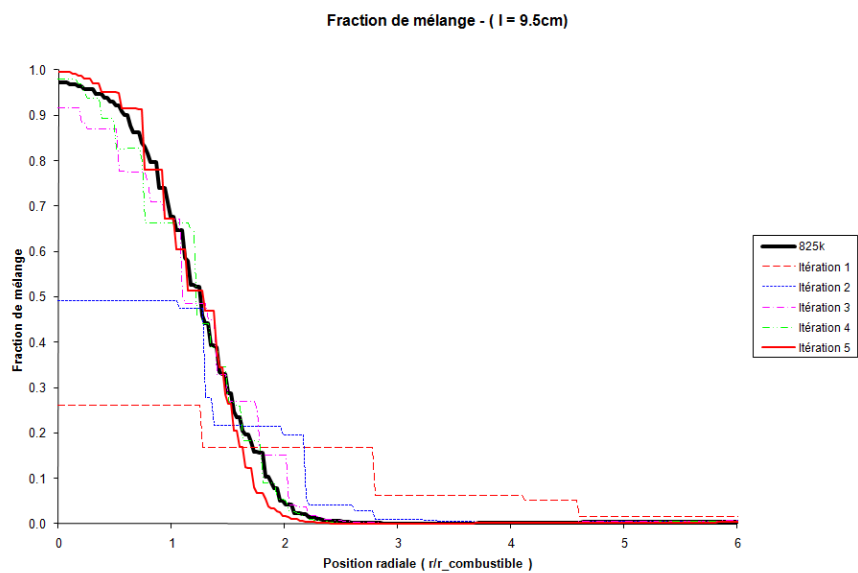


FIGURE 3.51 Adaptation de la chambre de combustion, fraction de mélange radiale.

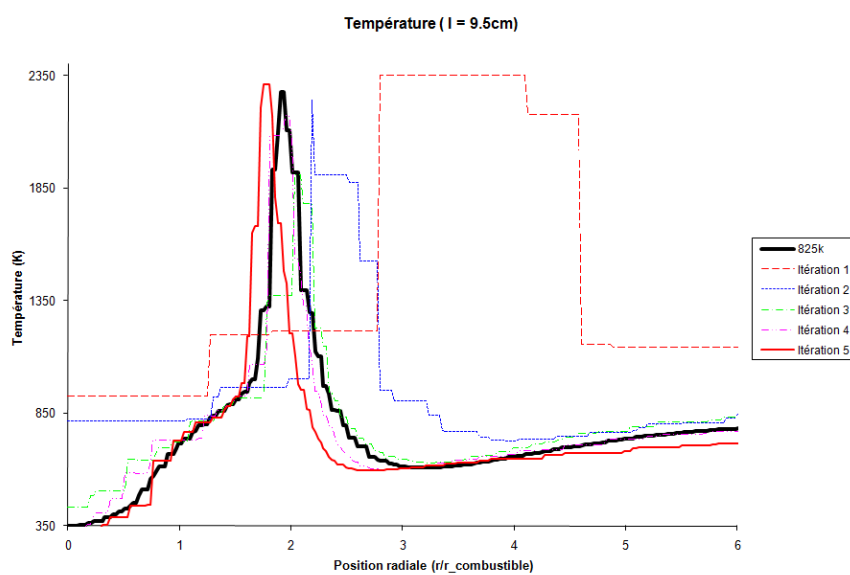


FIGURE 3.52 Adaptation de la chambre de combustion, température radiale.

## Chapitre 4

### DISCUSSION GÉNÉRALE

L'objectif principal du projet de recherche présenté dans ce document est d'élaborer une méthode d'adaptation de maillage appliquée aux simulations d'écoulements réactifs dans les équipements de combustion industrielle. Cette méthode se doit de modifier un maillage de manière à augmenter la précision de la solution numérique afin de permettre une meilleure analyse et une meilleure prédiction des polluants générés par les équipements. Ce résultat sera obtenu en minimisant la puissance de calcul requise de façon à montrer l'efficacité la méthode face à une analyse sans adaptation devant être faite dans des délais restreints. À ce jour, très peu de méthodes d'adaptation ont été développées pour ce type d'écoulements. En général, les techniques employées sont des techniques de raffinement des éléments uniquement, qui permettent d'augmenter la résolution du maillage afin de détecter et de mieux résoudre certains phénomènes de l'écoulement. Ces techniques sont majoritairement isotropes et ne considèrent pas la minimisation du temps de calcul comme l'un des objectifs principaux de l'approche.

Nous avons donc établi que, pour répondre aux exigences d'un tel type de problème physique, c'est-à-dire des phénomènes multi-échelles turbulents avec quasi-discontinuité dans plusieurs champs ainsi que le transport d'espèces multiples, l'algorithme d'adaptation développé doit, en tout premier lieu, être anisotrope. Ce traitement anisotrope des éléments est surtout important dans les régions qualifiées de quasi-discontinuités, tels les fronts de flamme. En effet, l'alignement des éléments et leur étirement le long de ces phénomènes à hauts gradients permettent de réduire la quantité d'éléments nécessaires pour une résolution précise, et donc de minimiser le raffinement et les coût de calculs associés.

Aussi, comme la majorité des simulations de combustion industrielle utilisent des

modèles de turbulence avec lois de parois logarithmiques dans des géométries complexes, les maillages de type hybride, possédant une peau d'éléments structurés aux parois et des éléments non structurés discrétisant le reste de l'espace, sont généralement utilisés. Comme très peu de méthodes d'adaptation de maillage permettent l'optimisation de maillages hybrides, et que l'objectif principal de l'algorithme développé ici est son application à des problèmes de combustion industrielle, la technique développée se doit aussi de s'appliquer directement aux maillages hybrides.

Pour atteindre ces objectifs, nous nous sommes dotés d'une méthodologie bien précise qui consistait d'abord à développer une mesure de qualité applicable à tous les types d'éléments du maillage. Cette mesure est basée sur le concept de non-conformité à une métrique riemannienne proposée par Labbé *et al.* (2004). Il s'agissait ensuite de développer un algorithme de lissage de maillages utilisant la nouvelle mesure comme fondement de la fonction coût utilisée pour l'optimisation. Cet algorithme de lissage par minimisation de la non-conformité doit s'inscrire dans un processus d'adaptation qui doit améliorer le maillage initial en équidistribuant l'erreur d'interpolation de manière à augmenter la précision de la solution tout en minimisant les coûts de calcul. Après validation de la technique sur plusieurs types de maillages, pour plusieurs cas académiques, nous avons appliqué et validé l'adaptation de maillage incluant l'algorithme de lissage pour un écoulement réactif dans une chambre de combustion. L'écoulement de validation comportait une ensemble de phénomènes physiques généralement présents dans les simulations de combustion industrielle, soit le transport d'espèces chimiques, la turbulence et la quasi-discontinuité associées au front de flamme. La résolution de l'écoulement a été faite à l'aide d'un résolveur commercial en utilisant des modèles numériques typiquement employés dans les simulations de combustion industrielle, comme dans le cas des chaudières à vapeur de grande envergure.

### **Mesure de non-conformité à une métrique riemannienne appliquée aux éléments non simpliciaux**

La mesure de non-conformité quantifie la différence entre une métrique spécifiée et celle qui décrit l'élément par rapport à l'élément de référence. Ce concept originellement élaboré par Labbé *et al.* (2004) est utilisé pour la première fois dans un contexte d'application industrielle dans le cadre de cet ouvrage. Nous avons tout d'abord démontré que l'extension aux éléments non simpliciaux proposée par les auteurs ne

permettait pas de détecter toutes les dégénérescences des éléments. Nous avons donc élaboré une technique permettant d'évaluer la non-conformité sur les éléments non simpliciaux par l'évaluation des sous-simplexes à chaque coin de éléments. Une caractérisation de la mesure a montré que la mesure de non-conformité dans sa forme générale est sensible à tous les types de déformation et qu'elle permet aussi de détecter les dégénérescences des éléments. Elle peut donc être qualifiée de mesure universelle puisqu'elle s'applique maintenant à tous les types de maillages composés de plusieurs types d'éléments. De plus, une mesure de qualité capable de fournir un nombre global qualifiant tout le maillage peut facilement être utilisé comme critère de comparaison lors du choix ou de la conception de méthodes de génération ou d'adaptation de maillage. La mesure permet ainsi de différencier des maillages très complexes pour un écoulement donné sans être dépendante de l'expérience de l'utilisateur. La mesure développée ne dépend que de la métrique spécifiée, qui, elle, peut être obtenue à partir de données importantes choisies par l'utilisateur en fonction du cas étudié, justifiant d'autant mieux le terme de mesure universelle utilisé plus haut.

### **Adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité**

Nous avons ensuite implanté la minimisation de la non-conformité sous forme d'un algorithme de lissage de la position des sommets qui s'appliquent à tous les éléments du maillage. L'ordre des opérations effectuées sur le maillages dans une itération globale d'adaptation début par le raffinement et l'utilisation de méthodes modifiant la connectivité, suivi par du lissage pour compléter. Le résultat obtenu se situe donc plus près de la non-conformité minimale si la minimisation de celle-ci est utilisée après les autres opérations d'adaptation, puisqu'elle ne sera pas affectée par des changements subséquents.

L'aspect le plus innovateur de cette technique réside dans la définition de la fonction coût utilisée dans le processus d'optimisation. Cette fonction coût est construite à partir de comparaisons de métriques par l'entremise de la mesure de non-conformité. Chaque métrique contient toute l'information nécessaire pour décrire l'état actuel de l'élément et son état désiré. L'utilisation de la non-conformité à une métrique riemannienne comme fondement de la fonction coût nous garantit l'indépendance de la méthode d'adaptation face aux types d'éléments présents dans le maillage à adapter. Même si l'algorithme présenté pour le déplacement des sommets n'est pas le plus efficace sur le plan du calcul, il se veut complètement indépendant de la fonction



coût et a permis de tester rapidement plusieurs combinaisons de fonctions coûts et d’algorithmes et ainsi de valider l’approche proposée.

À l’aide de plusieurs exemples numériques, nous avons montré que les maillages découlant de l’adaptation à l’aide de la minimisation de la non-conformité sont de très haute qualité et présentent les caractéristiques désirées au niveau numérique, telles que l’orthogonalité aux parois, et l’anisotropie là où la métrique spécifiée le demande. Nous avons aussi montré que l’algorithme est robuste et permet d’obtenir une excellente continuité dans les régions d’interfaces entre les éléments de types différents. La comparaison de notre algorithme de lissage à d’autres techniques a aussi permis de montrer qu’il est complètement indépendant de la géométrie discrétisée et n’induit donc aucune tension géométrique comme le font les méthodes de lissage basées sur la paramétrisation de la géométrie ou sur l’équilibrage de réseaux d’énergie.

### **Application à la simulation d’écoulement en combustion industrielle**

Nous avons ensuite appliqué le concept de minimisation de la non-conformité dans le contexte de simulation d’écoulements réactifs dans les composantes de combustion industrielle de très grande taille, et ce, avec des ressources de calcul restreintes. Dans ces écoulements, la résolution des phénomènes tels les fronts de flamme est de la plus haute importance pour la prédiction des polluants, et sans connaissance *a priori* de la dynamique des écoulements, il devient presque impossible de générer un maillage adéquat.

Nous avons appliqué le processus d’adaptation avec minimisation de la non-conformité à un combusteur industriel discrétisé à l’aide d’un maillage hybride et simulé à l’aide des modèles généralement utilisés dans l’industrie. En comparant la solution obtenue après 5 itérations d’adaptation à celle obtenue avec un maillage isotrope non adapté très raffiné, nous avons pu démontrer que l’adaptation permet d’obtenir une solution comparable à celle du maillage isotrope non adapté en utilisant environ 30 fois moins d’éléments, et ce, en une fraction du temps calcul. De meilleurs résultats auraient pu être obtenus si des méthodes de modifications des connectivités dans les régions structurées avaient été disponibles, de manière à permettre une meilleure convergence de la fonction coût vers son minimum absolu dans ces régions. D’autres gains en termes de précision de la solution auraient également pu être obtenus au détriment du temps de calcul en modifiant le facteur d’échelle de la métrique spécifiée. En effet, ce facteur d’échelle force la génération d’éléments de plus grande taille que celle

dictée par la phase d'estimation d'erreur, afin de limiter l'augmentation du nombre de degrés de liberté lors de l'adaptation.

Même si la mesure de non-conformité ainsi que l'algorithme d'adaptation par sa minimisation ont tous deux été démontrés fonctionnels pour des maillages en trois dimensions, il a tout de même été impossible de valider le processus pour un cas de combustion en trois dimensions. Ceci est majoritairement dû au fait que, pour détecter tous les phénomènes de l'écoulement réactif, une intersection des métriques provenant de plusieurs variables importantes est nécessaire pour générer la métrique spécifiée. Or, la méthode d'intersection utilisée dans ce projet fait partie d'un autre projet toujours en développement, et sa robustesse en trois dimensions n'est toujours pas prouvée. Il serait inapproprié de notre part d'introduire un élément dont la robustesse est mise en doute dans la boucle d'adaptation servant à valider un autre élément de cette boucle. C'est pourquoi aucun cas de combustion en trois dimensions n'est présenté dans ce document.

Les résultats obtenus en deux dimensions montrent tout de même clairement le potentiel de l'utilisation de cette technique pour augmenter la précision des solutions numériques dans les simulations de combustion industrielle. De plus, la puissance de calcul considérable sauvée lors de l'analyse témoigne aussi de la possibilité d'utiliser cette méthode d'adaptation dans les très grandes géométries comme les chaudières à vapeur et, pour un niveau de précision donné, de réduire de beaucoup le cycle de design des équipements.

## Retombées

Il est important de noter que la méthode de lissage par minimisation de la non-conformité a été incorporée dans la bibliothèque d'adaptation de maillage *OORT*, qui offre un canevas pour le développement de telles techniques. Cette bibliothèque est aussi utilisée dans le cadre d'autres projets de recherche, et est complètement indépendante du résolveur utilisé ou du type d'application. Suite aux résultats impressionnants obtenus par la méthode de lissage par minimisation de la non-conformité, celle-ci a été promue comme méthode utilisée par défaut. Elle est donc maintenant utilisée dans tous les projets de recherche avec l'industrie utilisant la bibliothèque *OORT*.

## Chapitre 5

### CONCLUSION

Le projet de recherche de cette thèse de doctorat avait pour objectif principal d'appliquer une technique d'adaptation de maillage aux simulations de combustion industrielle de manière à augmenter la qualité des solutions numériques des écoulements et ainsi de permettre une meilleure prédiction des polluants générés par les équipements, et ce, en minimisant les coûts de calcul. En effet, la différence de taille des chaudières industrielles par rapport à l'échelle des phénomènes physiques et chimiques peut être tellement grande qu'une résolution précise de l'écoulement nécessiterait un super-calculateur et des temps de calculs très considérables. Pour de petites compagnies disposant de peu de moyens et travaillant sous la contrainte de délais très courts pour les design des composantes, l'utilisation d'une technique d'adaptation de maillage permettant d'augmenter la qualité des solutions à peu de frais devient un atout.

Pour atteindre cet objectif, une mesure de qualité des éléments d'un maillage a été élaborée. Cette mesure quantifie la différence en taille, étirement et orientation d'un élément par rapport à ce que est désiré localement lorsque la spécification est donnée sous forme de métrique riemannienne. Une technique a aussi été développée afin d'utiliser la mesure de non-conformité à une métrique riemannienne sur les éléments non simpliciaux, puisque la résolution des écoulements réactifs en milieu industriel repose majoritairement sur une discrétisation hybride utilisant des éléments non simpliciaux près des parois pour respecter la validité des modèles. L'étude du comportement de la mesure pour des éléments soumis à différentes déformations par rapport à une métrique spécifiée a démontré que la mesure se comporte similairement pour tous les types d'éléments, tout en étant lisse, continue et capable de détecter les dégénérescences des éléments.

Le mesure de non-conformité a ensuite été utilisée dans la construction d'une

fonction coût servant à l’optimisation de la position des sommets du maillage par la minimisation de cette fonction pour le voisinage de chaque sommet. Il a été démontré que l’algorithme de lissage minimisant la non-conformité développé dans le cadre de cette étude améliore la qualité des solutions obtenues sur des maillages d’éléments non simpliciaux ou hybrides adaptés avec des métriques provenant de plusieurs sources.

L’utilisation de cette approche sur un cas de combustion industriel, résolu avec les modèles numériques généralement employés pour ce type d’analyse, a permis de valider l’approche d’adaptation de maillage proposée. En utilisant une métrique spécifiée composée des métriques spécifiées provenant des variables importantes de l’écoulement, soit la quantité de mouvement, la température et la fraction de mélange, une amélioration marquée de la solution pour un nombre très réduit d’éléments a été observée. La solution obtenue est de précision comparable à celle obtenue en utilisant un maillage raffiné, et ce avec des temps de calcul minimisés.

Les résultats obtenus nous autorisent à conclure que la méthode d’adaptation de maillage minimisant la non-conformité à une métrique riemannienne permet d’améliorer les maillages hybrides dans les cas de combustion industrielle, et ainsi, d’augmenter considérablement la qualité de la solution pour un nombre de degrés de liberté minimisé. L’implantation d’une telle technique dans le domaine de la conception des équipements de combustion industrielle tels que les brûleurs et les chaudières à vapeur pourrait permettre l’évaluation de plus de configuration de ces équipements avec une plus grande précision de la prédiction des écoulements et des polluants en accélérant le cycle de design.

## 5.1 Limitations de l’approche proposée

L’adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité à une métrique riemannienne appliquée aux écoulements réactifs dans un contexte de conception d’équipements de combustion industrielle présente certaines limitations majoritairement associées aux hypothèses fixées au début du projet. Nous avons choisi d’appliquer les méthodes développées dans ce projet de recherche aux éléments linéaires seulement. Ce choix a pour effet de garantir que la transformation entre un simplexe et son état de référence est toujours linéaire et donc que le jacobien est constant sur le simplexe. Pour des éléments quadratiques ou autres, cette transformation n’est plus linéaire. Comme dans le cas des éléments non simpliciaux étudiés à la section 3.1, le

jacobien variable ne permet plus de détecter toutes les dégénérescences du simplexe, restreignant ainsi la validité de la mesure de non-conformité proposée aux éléments linéaires seulement. Ce choix a aussi pour effet de limiter l'estimation de l'erreur d'interpolation à la dérivée seconde de la solution numérique et ainsi de limiter la précision des résultats à ce niveau.

On peut aussi noter que la méthode d'adaptation de maillage proposée se limite à une technique d'équidistribution de l'erreur d'interpolation. D'autres techniques pour les cas de combustion industrielle telle l'estimation de l'erreur par la résolution d'un problème dual, auraient peut-être pu générer des solutions plus précises après l'adaptation, mais nous avons délibérément choisi de ne pas étudier les impacts des ces méthodes dans le cadre de ce projet.

Une limitation de l'approche peut aussi être associée au choix des modèles numériques pour les simulations d'écoulements en combustion industrielle. Ce choix a été fait par expérience de ce qui est utilisé en industrie pour résoudre de tels problèmes. L'approche proposée a donc été validée uniquement pour ces modèles, et rien ne permet d'extrapoler des conclusions sur la précision des résultats qui seraient obtenus en changeant les modèles numériques utilisés. L'approche pour des cas de combustion n'a aussi été validée que pour des cas en deux dimensions en raison du manque de robustesse en trois dimensions de l'algorithme permettant l'intersection des métriques. Ceci a limité notre capacité à tirer des conclusions à des simulations en deux dimensions uniquement pour l'application à la combustion.

## 5.2 Perspectives futures

Cette thèse propose plusieurs avenues de recherches associées à chacun des grands thèmes discutés. En ce qui a trait à la mesure de non-conformité elle-même, l'approche proposée se veut générale en s'appliquant à tous les types d'éléments à topologie fixe. Il serait intéressant d'étendre l'approche de manière à ce qu'elle puisse mesurer la non-conformité sur les éléments polyédriques. La difficulté de ces éléments réside dans le fait que leur topologie est variable et qu'ils peuvent même être composés de plusieurs faces coplanaires. Une nouvelle décomposition de ce type d'élément en sous-simplexes devra être proposée. Celle-ci devra être valide pour toute topologie et donc ne pas dépendre de la forme des éléments comme c'est le cas présentement. De plus, il faudra trouver un moyen de ne pas considérer les faces coplanaires, qui se décomposent en

un sous-simplexe de coin de volume nul, comme étant dégénérées, puisqu'elles sont valides pour ce type d'élément. Après cette étape, la mesure de non-conformité pourra être efficacement appliquée à tous les types d'éléments, peu importe leur forme et leur connectivité.

Dans le cas de l'algorithme d'adaptation par minimisation de la non-conformité, sachant que la fonction coût est continue et différentiable, il pourrait être envisagé de développer un nouvel algorithme de positionnement des sommets basé sur la dérivation de la fonction coût. Un algorithme basé sur la méthode de Newton pourrait être proposé de manière à augmenter le taux de convergence associé au positionnement d'un sommet. Une étude complète de convergence de l'algorithme d'adaptation et de validation des résultats devra être faite si une telle méthode est développée, de manière à déterminer si les temps de calcul sont bien minimisés et que les résultats obtenus après adaptation sont aussi précis ou meilleurs que ceux montrés dans ce document. Il faut aussi, pour le développement d'une telle méthode d'optimisation, tenir compte de la forme de la fonction coût en fonction de la position du sommet en déplacement. Une étude plus approfondie de la forme de cette fonction coût pourrait ainsi permettre de déterminer si plusieurs minima peuvent être présents et si le déplacement des sommets risque de stagner dans des positions non optimales. Si tel est le cas, des méthodes d'optimisation comme le recuit simulé pourraient être utilisées de façon à empêcher l'optimisation selon des minima locaux de la fonction coût et ainsi trouver le minimum absolu de façon systématique. L'obtention du minimum absolu pourrait permettre de diminuer encore plus le nombre de sommets nécessaire pour satisfaire la métrique spécifiée, et ainsi d'obtenir, à moins de coûts, des solutions d'une meilleure qualité.

Le processus du déplacement des sommets est présentement effectué selon un schéma de type Gauss-Seidel. Il est connu que ce type de schéma n'est pas du tout optimisé et qu'il requiert un grand nombre d'itérations de lissage sur tout le maillage pour atteindre l'équilibre. Il serait intéressant d'utiliser un algorithme plus rapide, telle une méthode du gradient, pour réduire ces coûts. Cependant, une validation exhaustive devra être effectuée sur la qualité des maillages obtenus ainsi que sur leurs solutions de manière à s'assurer que le nouvel algorithme garantisse des résultats de qualité équivalente ou supérieure dans tous les cas.

Le processus d'adaptation de maillage dans lequel est implanté l'algorithme de lissage par minimisation de la non-conformité pourrait aussi bénéficier du dévelop-

pement de techniques de raffinement et de déraffinement des zones structurées, ce qui permettrait à l'optimisation de la non-conformité de ne plus être limitée par le nombre d'éléments générés initialement dans ces régions. Comme ces modifications ne seraient appliquées qu'aux zones de peau structurées, il serait donc possible d'implanter des techniques de raffinement qui conservent la structure logique de ces régions sans avoir un trop grand impact sur les temps de calculs. Les résultats obtenus devraient être ensuite comparés à ceux présentés dans cette thèse afin de démontrer que l'existence de telles opérations au moment de notre étude auraient effectivement aidé à augmenter la précision des solutions obtenues. Une étude pourrait aussi être effectuée pour déterminer si les autres opérations sur les maillages, le raffinement, le déraffinement et les modifications topologiques pourraient bénéficier d'une formulation visant à optimiser directement la mesure de non-conformité au lieu des coefficients de taille et de forme mesurés dans la métrique. En effet, comme ces critères ne minimisent pas directement la non-conformité, celle-ci est modifiée de façon imprévisible par les opérations utilisées. Le lissage géométrique doit donc réparer les dommages causés à la non-conformité avant même de considérer l'améliorer. Un gain intéressant de temps d'adaptation et possiblement de qualité des maillages obtenus serait envisageable si ces critères étaient modifiés de manière à minimiser la non-conformité.

Actuellement, le processus d'adaptation nécessite une évaluation manuelle de la qualité de la solution obtenue à chaque itération. L'intervention de l'utilisateur est requise pour déterminer si la boucle est convergée ou si une autre itération d'adaptation est requise. La mesure de non-conformité développée durant ce projet permet de comparer entre eux différents maillages contenant des éléments de types variés par rapport à une spécification du maillage minimisant l'erreur d'interpolation de la solution. Utilisant ce principe, la non-conformité du maillage pourrait être utilisée comme moniteur de la convergence de la boucle itérative résolution-adaptation. L'implantation d'un tel moniteur permettrait de réduire considérablement le temps nécessaire pour une analyse en automatisant le processus.

Tout au long de ce projet, l'adaptation de maillage a été effectuée sur des maillages initiaux arbitraires. Dans tous les cas, le processus d'adaptation a convergé vers une solution plus précise que celle sur le maillage initial, mais il n'est pas certain que cela soit toujours le cas. Une étude de sensibilité de l'algorithme d'adaptation devrait être faite pour déterminer à quel niveau le maillage initial ne permet plus de produire une solution de plus haute précision sur un maillage adapté. Les résultats d'une telle étude

pourraient guider les utilisateurs lors de la génération du maillage initial servant à faire une analyse par adaptation.

Pour ce qui est de l'application à la combustion industrielle, les prochaines étapes à suivre dans l'évolution de la technique seraient de tout d'abord de valider l'approche sur la même chambre de combustion, mais cette fois en trois dimensions. Pour ce faire, il est nécessaire d'avoir accès à un algorithme robuste d'intersection des métriques spécifiées en trois dimensions, qui permet d'obtenir une métrique spécifiée composée de la résultante de l'estimation de l'erreur pour toutes les variables importantes des écoulements réactifs. Ce critère satisfait, l'analyse en trois dimensions devient possible. Il sera important de comparer les résultats obtenus à ceux en deux dimensions et aux données expérimentales pour valider l'approche. Cette étude permettra ensuite d'appliquer l'adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité à un foyer de chaudière industrielle pour valider son efficacité sur les géométries de grandes tailles et de comparer directement les concentrations de polluants prédites aux mesures prises en chantier pour la chaudière simulée. Après cette étape de comparaison, si les prédictions s'avéraient meilleures que celles sans adaptation, et ce, à des coûts raisonnables, l'adaptation de maillage par minimisation de la non-conformité pourrait devenir un atout important dans le domaine des simulations d'équipements de combustion.



## RÉFÉRENCES

- ABDUL MAJID, M. A. N., SHUAIB, N. H., HASINI, H. et BOOSROH, M. H. (2009). Numerical investigations on the effects of high temperature air combustion in a coal-powered boiler. *ICEE 2009 - Proceeding 2009 3rd International Conference on Energy and Environment : Advancement Towards Global Sustainability*, 184–188.
- AGOUZAL, A., LIPNIKOV, K. et VASSILEVSKI, Y. (2010). Hessian-free metric-based mesh adaptation via geometry of interpolation error. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 50, 124–138.
- AIT-ALI-YAHIA, D., BARUZZI, G., HABASHI, W. G., FORTIN, M., DOMPIERRE, J. et VALLET, M.-G. (2002). Anisotropic mesh adaptation : Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. part II. structured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39, 657–673.
- AMENTA, N., BERN, M. et EPPSTEIN, D. (1997). Optimal point placement for mesh smoothing. *Proceedings of the Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, 528–537.
- AMENTA, N., BERN, M. et EPPSTEIN, D. (1999). Optimal point placement for mesh smoothing. *Journal of Algorithms*, 30, 302–322.
- BALASUBRAMANIAN, R. et NEWMAN III, J. (2006). Comparison of adjoint-based and feature-based grid adaptation for functional outputs. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 53, 1541–1569.
- BECKER, R. et RANNACHER, R. (1996). A feed-back approach to error control in finite element methods : Basic analysis and examples. *East West Journal of Numerical Mathematics*, 4, 237–264.
- BÉLANGER, S. (2010). *Adaptation de maillages anisotropes*. Ph.D., École Polytechnique de Montréal, Qc, Canada.

- BENNETT, B. (2007). Local rectangular refinement in three dimensions (lrr3d) : Development of a solution-adaptive gridding technique with application to convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 52, 1–32.
- BENNETT, B. et SMOOKE, M. (1998). Local rectangular refinement with application to axisymmetric laminar flames. *Combustion Theory and Modelling*, 2, 221–258.
- BENNETT, B. et SMOOKE, M. (1999). Local rectangular refinement with application to nonreacting and reacting fluid flow problems. *Journal of Computational Physics*, 151, 684–727.
- BERZINS, M. (1999). Mesh quality : A function of geometry, error estimates or both ? *Engineering with Computers*, 15, 236–247.
- BOROUCHAKI, H. et FREY, P. J. (1998). Adaptive triangular-quadrilateral mesh generation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 41, 915–934.
- BOROUCHAKI, H., HECHT, F. et FREY, P. J. (1998). Mesh gradation control. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43, 1143–1165.
- BOROUCHAKI, H., VILLARD, J., LAUG, P. et GEORGE, P. L. (2005). Surface mesh enhancement with geometric singularities identification. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194, 4885–4894.
- BOSSEN, F. (1996). *Anisotropic Mesh Generation with Particles*. Thèse de doctorat, Carnegie Mellon University.
- BOTTASSO, C. L. (2004). Anisotropic mesh adaption by metric-driven optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 60, 597–639.
- BOUDIER, G., GICQUEL, L. Y. M. et POINSOT, T. J. (2008). Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combustion and Flame*, 155, 196–214.
- BOURGAULT, Y., PICASSO, M., ALAUZET, F. et LOSEILLE, A. (2009). On the use of anisotropic *a posteriori* error estimators for the adaptative solution of 3d inviscid compressible flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 59, 47–74.
- BRAIS, N. (1993). *Simulation numérique d'écoulements réactifs utilisant un maillage adaptatif*. Ph.D., École Polytechnique de Montréal, Qc, Canada.

- BRANETS, L. et CAREY, G. (2005). A local cell quality metric and variational grid smoothing algorithm. *Engineering with Computers*, 21, 19–28.
- BUSCAGLIA, G. C. et DARI, E. A. (1997). Anisotropic mesh optimization and its application in adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40, 4119–4136.
- CABELLO, J. (1990). *A new variational method for optimization and adaptation of tridimensional structured grids*. Ph.D., Université de Paris Sud, Paris, France.
- CASTRO-DÍAZ, M. J., HECHT, F., MOHAMMADI, B. et PIRONNEAU, O. (1997). Anisotropic unstructured mesh adaption for flow simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 25, 475–491.
- DOMPIERRE, J., VALLET, M.-G., BOURGAULT, Y., FORTIN, M. et HABASHI, W. G. (2002). Anisotropic mesh adaptation : Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. part III. unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39, 675–702.
- DOMPIERRE, J., VALLET, M. G., LABBÉ, P. et GUIBAULT, F. (2005). An analysis of simplex shape measures for anisotropic meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194, 4895–4914.
- EISEMAN, P. (1983). Alternating direction adaptive grid generation for three-dimensional regions. *AIAA*, 258–263.
- EISEMAN, P. (1987). Adaptive grid generation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 64, 321–376.
- ESCOBAR, J. M., RODRIGUEZ, E., MONTENEGRO, R., MONTERO, G. et GONZALEZ-YUSTE, J. M. (2003). Simultaneous untangling and smoothing of tetrahedral meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192, 2775–2787.
- FANG, F., PAIN, C. C., NAVON, I. M., GORMAN, G. J., PIGGOTT, M. D., ALLISON, P. A. et GODDARD, A. J. H. (2009). A pod goal-oriented error measure for mesh optimization. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 63, 185–206.
- FERZIGER, J. H. et PERIC, M. (1999). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, seconde édition.

- FORMAGGIA, L., MICHELETTI, S. et PEROTTO, S. (2004). Anisotropic mesh adaptation in computational fluid dynamics : Application to the advection-diffusion-reaction and the Stokes problems. *Applied Numerical Mathematics*, 51, 511–533.
- FORMAGGIA, L. et PEROTTO, S. (2000). Anisotropic error estimation for finite element methods. *Lecture series-van Karman Institute for fluid dynamics*, 5, G1–G25.
- FREITAG, L. A. (1997). On combining laplacian and optimization-based mesh smoothing techniques. ASME, Evanston, IL, USA, vol. 220 de *American Society of Mechanical Engineers, Applied Mechanics Division, AMD*, 37–43.
- FREITAG, L. A. et KNUPP, P. M. (2002). Tetrahedral mesh improvement via optimization of the element condition number. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53, 1377–1391.
- FREITAG, L. A. et PLASSMANN, P. (2000). Local optimization-based simplicial mesh untangling and improvement. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 49, 109–125.
- FREY, P. J. et ALAUZET, F. (2005). Anisotropic mesh adaptation for CFD computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194, 5068–5082.
- FREY, P. J. et GEORGE, P. L. (1999). *Maillages : applications aux éléments finis*. Hermes Science, Paris.
- GAO, X. et GROTH, C. (2010). A parallel solution-adaptive method for three-dimensional turbulent non-premixed combustng flows. *Journal of Computational Physics*.
- GAO, X. et GROTH, C. P. T. (2006). Parallel adaptive mesh refinement scheme for turbulent non-premixed combustng flow prediction. *Collection of Technical Papers - 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 23, 17450–17463.
- GEORGE, P. et BOROUCHAKI, H. (1998). *Delaunay triangulation and meshing : application to finite elements*. Kogan Page, London, UK.
- GEORGE, P. L. et BOROUCHAKI, H. (1997). *Triangulation de Delaunay et mailage : applications aux éléments finis*. Hermès, Paris.
- GILES, M. et PIERCE, N. (1999). Improved lift and drag estimates using adjoint euler equations. *14th Computational Fluid Dynamics Conference*. AIAA, Norfolk, VA, USA, vol. AIAA Paper 99-3293, 8–34.

- GILES, M. et PIERCE, N. (2001). Analytic adjoint solutions for the quasi-one-dimensional Euler equations. *Journal of Fluid Mechanics*, 426, 327–345.
- GORDON, S. et MCBRIDE, B. (1971). *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Composition, Rocket Performance, Incident and Reflected Shock and Chapman Jouguet Detonation*. Rapport technique, NASA, USA.
- HABASHI, W. G., DOMPIERRE, J., BOURGAULT, Y., AIT-ALI-YAHIA, D., FORTIN, M. et VALLET, M.-G. (2000). Anisotropic mesh adaptation : Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. part i : General principles. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 32, 725–744.
- HALDENWANG, P. et PIGNOL, D. (2002). Dynamically adapted mesh refinement for combustion front tracking. *Computers and Fluids*, 31, 589–606.
- HASINI, H., YUSOFF, M. Z., SHUAIB, N. H., BOOSROH, M. H. et HANIFF, M. A. (2009). Analysis of flow and temperature distribution in a full scale utility boiler using CFD. *ICEE 2009 - Proceeding 2009 3rd International Conference on Energy and Environment : Advancement Towards Global Sustainability*, 208–214.
- HUANG, W. (2005). Metric tensors for anisotropic mesh generation. *Journal of Computational Physics*, 204, 633–665.
- HUANG, W., KAMENSKI, L. et LANG, J. (2010). A new anisotropic mesh adaptation method based upon hierarchical a posteriori error estimates. *Journal of Computational Physics*, 229, 2179–2198.
- JIAO, X., WANG, D. et ZHA, H. (2008). Simple and effective variational optimization of surface and volume triangulations. *Proceedings of the 17th International Meshing Roundtable*, 315–332.
- JONES, W. et LAUNDER, B. (1972). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15, 301–314.
- JONES, W. et WHITELAW, J. (1982). Calculation methods for reacting turbulent flows : a review. *Combustion and Flame*, 48, 1–26.
- JOUBARNE, E. (2008). *Adaptation de maillage pour la simulation numerique du tourbillon marginal sur une aile tridimensionnelle*. M. Sc. A., École Polytechnique de Montréal, Qc, Canada.

- KALLINDERIS, Y. et KAVOUKLIS, C. (2005). A dynamic adaptation scheme for general 3-d hybrid meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194, 5019–5050.
- KHALIL, E. E. (1982). *Modelling of furnaces and combustors*. Energy and engineering science series. Abacus Press, Tunbridge Wells, Kent.
- KNUPP, P. (1999). Winslow smoothing on two-dimensional unstructured meshes. *Engineering with Computers*, 15, 263–268.
- KNUPP, P. (2003). A method for hexahedral mesh shape optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58, 319–332.
- KNUPP, P. et STEINBERG, S. (1994). *Fundamentals of grid generation*. CRC Press, Boca Raton.
- KNUPP, P. M. (2000). Achieving finite element mesh quality via optimization of the jacobian matrix norm and associated quantities. Part I - a framework for surface mesh optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48, 401–420.
- KONG, S.-C. et REITZ, R. D. (2003). Numerical study of premixed HCCI engine combustion and its sensitivity to computational mesh and model uncertainties. *Combustion Theory and Modelling*, 7, 417–433.
- KUNERT, G. (2000). An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numerische Mathematik*, 86, 471–490.
- KUNERT, G. (2001). A posteriori l2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 21, 503–523.
- LABBÉ, P., DOMPIERRE, J., VALLET, M. G., GUIBAULT, F. et TRÉPANIER, J. Y. (2004). A universal measure of the conformity of a mesh with respect to an anisotropic metric field. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61, 2675–2695.
- LEWIS, M. H. et SMOOT, L. D. (1981). Turbulent gaseous combustion - 1. Local species concentration measurements. *Combustion and Flame*, 42, 183–196.
- LI, X., REMACLE, J., CHEVAUGEON, N. et SHEPHARD, M. (2004). Anisotropic mesh gradation control. *13th International meshing roundtable*. Williamsburg, VA, 401–412.

- LI, X., SHEPHARD, M. et BEALL, M. (2005). 3d anisotropic mesh adaptation by mesh modification. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194, 4915–4950.
- LIU, A. et JOE, B. (1994). Relationship between tetrahedron shape measures. *BIT Numerical Mathematics*, 34, 268–287.
- LOSEILLE, A., DERVIEUX, A. et ALAUZET, F. (2010). Fully anisotropic goal-oriented mesh adaptation for 3d steady Euler equations. *Journal of Computational Physics*, 229, 2866–2897.
- MARTINELLI, L. et JAMESON, A. (1988). Validation of a multigrid method for the Reynolds averaged equations. *AIAA paper*, 414, 1988.
- MAVRIPLIS, D. J. (2000). Adaptive meshing techniques for viscous flow calculations on mixed element unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34, 93–111.
- MCKENTY, F. (1992). *Modèles de combustion pour la simulation numérique d'écoulements réactifs en atmosphère confinée*. Ph.D., École Polytechnique de Montréal, Qc, Canada.
- MCKENZIE, S., DOMPIERRE, J., TURCOTTE, A. et MENG, E. (2009). On metric tensor representation, intersection and union. *11th ISGG Conference*. École Polytechnique de Montréal, Montréal, Qc, Canada, 12.
- MCRAE, D. S. (2000). r-refinement grid adaptation algorithms and issues. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 189, 1161–1182.
- MONTENEGRO, R., ESCOBAR, J., MONTERO, G. et RODRIGUEZ, E. (2005). Quality improvement of surface triangulations. *14th International Meshing Roundtable*, 469–480.
- MULLER, J.-D. (2002). Anisotropic adaptation and multigrid for hybrid grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40, 445–455.
- NAGA, A. et ZHANG, Z. (2005). A posteriori error estimates based on the polynomial preserving recovery. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42, 1780.
- NORTHRUP, S. et GROTH, C. (2005). Solution of laminar diffusion flames using a parallel adaptive mesh refinement algorithm. *AIAA Pap.*
- PATANKAR, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. Hemisphere Pub. Corp.; McGraw-Hill, Washington New York.

- PICASSO, M. (2003). An anisotropic error indicator based on Zienkiewicz–Zhu error estimator : Application to elliptic and parabolic problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 24, 1328–1355.
- PICASSO, M. (2006). Adaptive finite elements with large aspect ratio based on an anisotropic error estimator involving first order derivatives. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196, 14–23.
- RAZALI, N. M., BOOSROH, M. H., HASINI, H. et SHUAIB, N. H. (2009). Impact of tangential burner firing angle on combustion characteristics of large scale coal-fired boiler. *ICEE 2009 - Proceeding 2009 3rd International Conference on Energy and Environment : Advancement Towards Global Sustainability*, 177–183.
- RENDLEMAN, C., BECKNER, V. et LIJEWSKI, M. (2001). Parallelization of an adaptive mesh refinement method for low Mach number combustion. *Computational Science-ICCS 2001*, 1117–1126.
- RIVARA, M. (1999). New longest-edge algorithms for the refinement and/or improvement of unstructured triangulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40, 3313–3324.
- SACHDEV, J., GROTH, C. et GOTTLIEB, J. (2005). A parallel solution-adaptive scheme for multi-phase core flows in solid propellant rocket motors. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 19, 159–177.
- SEVENO, E. (1998). *Génération automatique de maillages tridimensionnels isotropes par une méthode frontale*. Ph.D., Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, Paris, France.
- SIROIS, Y., DOMPIERRE, J., VALLET, M., LABBÉ, P. et GUIBAULT, F. (2002). Progress on vertex relocation schemes for structured grids in a metric space. *8th ISGG Conference*. Honolulu, USA, 389–398.
- SIROIS, Y., DOMPIERRE, J., VALLET, M.-G. et GUIBAULT, F. (2005). Measuring the conformity of non-simplicial elements to an anisotropic metric field. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 64, 1944–1958.
- SIROIS, Y., DOMPIERRE, J., VALLET, M.-G. et GUIBAULT, F. (2010a). Hybrid mesh smoothing based on riemannian metric non-conformity minimization. *Finite Elements in Analysis and Design*, 46, 47–60.



- SIROIS, Y., MCKENTY, F., GRAVEL, L. et GUIBAULT, F. (2010b). Hybrid mesh adaptation applied to industrial numerical combustion. *Flow, Turbulence and Combustion*, Submitted.
- SMITH, P. J. et SMOOT, L. D. (1981). Turbulent gaseous combustion - 2. Theory and evaluation for local properties. *Combustion and Flame*, 42, 277–285.
- SONI, B. K., KOOMULLIL, R., THOMPSON, D. S. et THORNBURG, H. (2000). Solution adaptive grid strategies based on point redistribution. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 189, 1183–1204.
- SPEKREIJSE, S., HEIGMEIJER, R. et BOERSTOEL, J. (1996). Adaptive grid generation by using laplace-beltrami operator on a monitor surface.
- THIBERT, J., GRANDJACQUES, M. et OHMAN, L. (1979). *Experimental data base for computer program assessment*, AGARD AR-138. Rapport technique, A1-1-A1-19.
- THOMPSON, J. F., WARSI, Z. U. A. et MASTIN, C. W. (1985). *Numerical grid generation, foundations and applications*. North Holland, New York.
- VALLET, M.-G. (1992). *Génération de maillages éléments finis anisotropes et adaptatifs*. Ph.D., Université Pierre et Marie Curie, Paris, France.
- VALLET, M.-G., MANOLE, C. M., DOMPIERRE, J., DUFOUR, S. et GUIBAULT, F. (2007). Numerical comparison of some hessian recovery techniques. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 72, 987–1007.
- VENDITTI, D. A. et DARMOFAL, D. L. (2003). Anisotropic grid adaptation for functional outputs : application to two-dimensional viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 187, 22–46.
- YUAN, L. et TANG, T. (2007). Resolving the shock-induced combustion by an adaptive mesh redistribution method. *Journal of Computational Physics*, 224, 587–600.
- ZELDOVICH, J. B. (1946). Oxidation of nitrogen in combustion and explosion. *Académie des Sciences de l'URSS – Comptes Rendus*, 51, 217–220.
- ZHOU, T. et SHIMADA, K. (2000). An angle-based approach to two-dimensional mesh smoothing. *Citeseer*, 373–384.
- ZIENKIEWICZ, O. et ZHU, J. (1987). A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24, 337–357.

## Annexe A – Measuring the conformity of non-simplicial elements to an anisotropic metric field

Yannick Sirois<sup>1,\*</sup> Julien Dompierre<sup>1</sup>, Marie-Gabrielle Vallet<sup>1</sup> and Francois Guibault<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *École Polytechnique de Montréal*  
C.P. 6079, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), H3C 3A7 Canada

### SUMMARY

This paper extends an approach for measuring the element conformity of simplices to non-simplicial elements of any type, in spaces of arbitrary dimension. Element non-conformity is defined as the difference between a given size specification map, in the form of a Riemannian metric tensor, and the actual metric tensor of the element. An approach to the measurement of non-conformity coefficients of non-simplicial elements based on sub-simplex division is proposed. An analysis of the measure's behavior presented for quadrilaterals, hexahedra, prisms and pyramids shows that the measure is sensitive to size, stretching and orientation variations, as well as to other types of element shape degeneration. Finally, numerical applications show that the metric conformity measure can be used as a quality measure to quantify the discrepancy between a whole non-simplicial mesh and a complex anisotropic size specification map. Copyright © 2005 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS: quadrilateral; prism; hexahedron; pyramid; metric; shape measure; size measure; mesh conformity; mesh anisotropy.

### 1. INTRODUCTION

*A posteriori* mesh adaption algorithms increase mesh quality, and hence numerical solution quality [1]. This is performed through the computation of a succession of numerical solutions and mesh modifications, such as vertex displacement [2, 3, 4] or mesh refinement [5, 6, 7]. It has often been shown, but not proved, that, in the end, the process converges towards an optimized solution. In complex cases, it is difficult to determine the level of quality attained by adapted anisotropic meshes, or even to compare meshes adapted using different methods. Given this difficulty, it becomes really important to develop ways of measuring mesh quality without relying solely on visualization.

The use of a size specification map in the form of a metric tensor field, such as described in [8, 9], allows for an anisotropic description of element shape in terms of size, orientation and stretching. The development of a measure based on metric comparison, such as those proposed in [10, 11], can generate a measure of quality that takes into account the combined effects of size and shape distortions.

---

\*Correspondence to: Yannick.Sirois@polymtl.ca, École Polytechnique de Montréal, C.P. 6079, Succ. Centre-Ville, Montréal (Québec), H3C 3A7 Canada

The aim of this paper is to show that the non-conformity measure defined in [10] for simplices is also applicable to any kind of non-simplicial element. It will be shown that the concept of metric non-conformity does mathematically apply to non-simplices. Some simplifications to the algorithm implementation are proposed in order for the measure to be computationally efficient. A thorough analysis of the measure's behavior for different types of degeneration is then presented, and some applications are described to show the usefulness of the measure.

## 2. THE NON-CONFORMITY MEASURE

As stated in [10] and [11], perfect conformity of a simplicial element, triangle in 2D or tetrahedron in 3D is reached when the element's actual metric  $\mathcal{M}_K$  is the same as the specified target metric  $\mathcal{M}_s$ :

$$\mathcal{M}_K = \mathcal{M}_s. \quad (1)$$

where  $\mathcal{M}_K$  is computed from the transformation between the element  $K$  and an ideal reference element, and  $\mathcal{M}_s$  the targeted properties to be obtained for the mesh. The specified metric can be computed from geometric properties, *a posteriori* error estimation or any user input.

The distance between the two metrics of equation (1) is called the non-conformity tensor of an element, and is expressed as follows:

$$T_{NC} = \mathcal{M}_s^{-1} \mathcal{M}_K + \mathcal{M}_K^{-1} \mathcal{M}_s - 2I. \quad (2)$$

An arbitrary norm is then taken to obtain a single value, that is, the non-conformity coefficient of element  $K$ :

$$\varepsilon_K = \|R_T\| = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{R}_T^T \mathbf{R}_T)}. \quad (3)$$

The resulting elementary non-conformity coefficient  $\varepsilon_K$  has a value of zero only for an element satisfying its specified metric, and of infinity when the element is degenerate. A global coefficient can easily be obtained by arithmetic mean or area weighted mean of the elementary values.

## 3. EXTENSION TO NON-SIMPLICIAL ELEMENTS

The main difference between simplices and non-simplices is that the actual metric of a non-simplex varies inside the element. In order to know if an element totally conforms to its specified metric, one should compare the metrics at every point in the element. Since verifying the identity at an infinite number of locations is too constraining, some approximations must be applied to equality (1). The previously defined equality can be expressed as

$$\overline{\mathcal{M}_K} = \overline{\mathcal{M}_s}, \quad (4)$$

where the overline denotes an average or approximate value computed over the element studied.

The average specified metric,  $\overline{\mathcal{M}_s}$ , is defined by numerical integration over the element  $K$ , as in [10]:

$$\overline{\mathcal{M}_s} = \int_K \mathcal{M}_s(\vec{x}) dK \Big/ \int_K dK. \quad (5)$$

Usual numerical integration is performed on each component of the metric tensor in order to obtain the element's averaged specified metric tensor.

It would also be easy to integrate  $\mathcal{M}_K(\vec{x})$  over element  $K$  to find an averaged actual metric tensor, but it matters that  $\mathcal{M}_K(x)$  be sensitive to element degeneration. In this paper, an element is said to be degenerate if the determinant of the Jacobian matrix used to compute  $\mathcal{M}_K(x)$  is zero at any point inside the element. Numerical integration methods use quadrature points that sample the actual metric at certain points inside the non-simplex. However, not all types of degenerating elements are always detected using such methods.

Figure 1 is an example of a degenerated quadrilateral where the two lower vertices are at exactly the same position. Figure 1 also presents a plot of the Jacobian at each point inside the element. The Jacobian matrix  $\mathcal{J}$  of the transformation between the element and the ideal reference element, in this case the unit square, is used to compute the actual metric  $\mathcal{M}_K(\vec{x}) = \mathcal{J}^T(\vec{x})\mathcal{J}(\vec{x})$ . This Jacobian varies continuously on the element from one at the top to zero at the bottom, where the element degenerates.

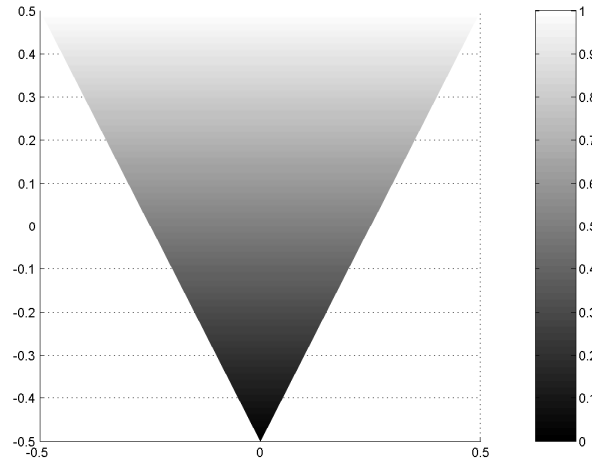


Figure 1. Jacobian of the non-inverted transformation on a degenerated quadrilateral

It can also be noted that the function varies rapidly around the degenerated part of the element, giving rise to a localized area of high non-conformity. It has been found that the fast variation towards the degenerated state in the function is not captured precisely enough by the Gaussian quadrature to make an impact on the value of  $\overline{\mathcal{M}_K}$ .

The use of an average metric on a non-simplex element will detect changes in orientation and size, since these changes affect the element as a whole. This is not the case for shape degenerations which appear locally on the element, as shown in the previous example. Using an averaging method in such cases will result in an attenuation of the local defect and non detection of shape-degenerated elements.

### 3.1. Sub-Simplex Decomposition

The proposed approach is an alternative to the integration of  $\overline{\mathcal{M}_K}$  over non-simplices. It consists of dividing non-simplices into a combination of simplices onto which the non-conformity coefficient is computed. Since the actual metric on a given simplex is constant, this method eliminates the need for integration and the related imprecision.

Division into simplices is not arbitrary. Covering only the general volume of the element is not

sufficient to detect all degenerate states. As an example, Figure 2 shows a degenerated quadrilateral that is divided into two sub-triangles. When non-conformity is calculated on those two triangles, a good conformity is returned for each of them because they are both nicely shaped triangles. The limiting case with an angle of  $180^\circ$  at vertex three is only detected by the sub-triangle formed by vertices 3-4-2.

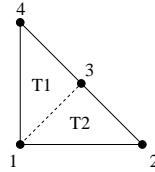


Figure 2. Degenerated quadrilateral described by only two sub-triangles

Calculating the non-conformity of the four corner sub-triangles will detect any degenerate configuration of a quadrilateral, except for inversion and twist. The same is true for all usual non-simplicial elements in three dimensions, where non-conformity must be computed on all corner sub-tetrahedra. Using this approach, each sub-simplex is treated independently of the others, having its own computation of  $\overline{\mathcal{M}}_s$ . This allows for a better differentiation in the variations of shape, since each average specified metric tensor is integrated on a smaller domain.

To obtain a unique value for the element, the non-conformity coefficients on all the sub-simplices are summed:

$$\varepsilon_K = \sum_i \varepsilon_{T_i} \quad (6)$$

where  $\varepsilon_{T_i}$  is the non-conformity coefficient of the  $i$ th sub-simplex. This sum will tend towards infinity for all types of degenerated elements, and towards zero when all sub-simplices are of the perfect size and shape.

### 3.2. Ideal Metric Element

In order to compute the actual metric, one must define the ideal metric element for each specific element type. In the case where the specified metric is computed directly from a transformation to a known ideal element, obviously this element will be used as the ideal metric element.

In our specific case, the measure is used in an *a posteriori* adaptation process. This means that the specified metric is computed from error estimation on solution data [9, 12] and not directly from a transformation between two elements.

It is assumed that the specified metric in our application does not carry any information about the ideal metric element, as is the case in an *a posteriori* adaptation process. The mesh is optimized so that the element distribution will be as regular as possible in terms of size and shape in the specified metric space. In 2D, the most regular elements are the unit equilateral triangle and the unit square, making them the obvious choices for ideal metric elements. So, when using the sub-simplex approach, the ideal metric element of each sub-simplex is a right-angled isosceles triangle where the two edges corresponding to the edges of the quadrilateral are of unit length. The same principles apply for non-simplices in three dimensions.

#### 4. ANALYSIS OF THE NON-CONFORMITY COEFFICIENT

Tests are carried out to demonstrate that the non-conformity measure generalized to non-simplices using the sub-simplex approach has the expected properties: its minimum value must be when an element is of the ideal size and shape in the metric space; for any type of variation from this state, the non-conformity coefficient should continuously increase; it must tend towards infinity for all degenerated elements. Test cases are divided into five categories of element modification: scaling, stretching, orientation, shape degeneration and reversal. Each type of element modification is applied to quadrilaterals, hexahedra, prisms and pyramids in the following sections.

##### 4.1. Scaling

The first series of tests present the variation of the non-conformity coefficient associated with the scaling of a non-simplicial element using a specified Euclidean metric.

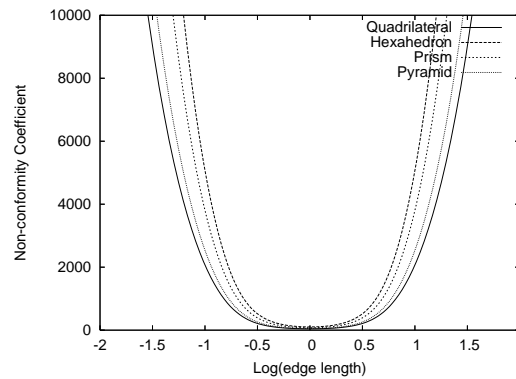


Figure 3. Effects of scaling on the non-conformity coefficient

The curves in Figure 3 show how the measure behaves as the size of an ideally shaped element is modified. Since the specified metric used is Euclidean, when an element is exactly the same as the ideal metric element, its computed non-conformity coefficient is zero. It can be seen that by either increasing or decreasing element size, the non-conformity increases exponentially in order to reach infinity for either a very large or a very small element. The measure is continuous and behaves similarly for each type of element. It is important to note the curve symmetry on either side of the non-scaled element. This means that from a non-conformity standpoint, an element that is twice as large as its targeted size is as bad as an element that is half as large.

##### 4.2. Stretching

Stretching the elements in one direction adds complexity by combining modifications in size and shape. Figure 4 shows the effect of stretching applied to the edges marked  $L$  using a Euclidean-specified metric.

Again, the curves reach zero for  $L = 1$  and infinity for very small or very large values of  $L$ , and are symmetrical around the zero non-conformity point. We conclude that for stretching (change in shape and size) the measure detects elements different from their ideal state in a continuous manner, similar to changes in size only.

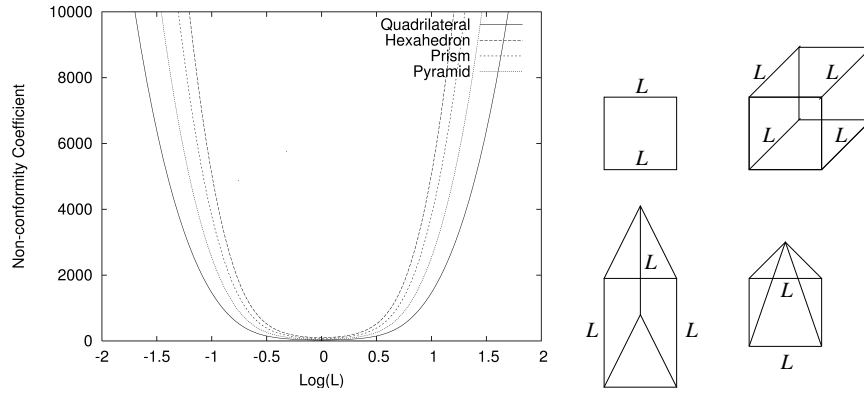


Figure 4. Effects of stretching on the non-conformity coefficient

#### 4.3. Orientation

It has been discussed earlier that, because of the fact that the non-conformity coefficient is based on metrics, the measure allows detection of changes in orientation of the elements. Figure 5 shows the non-conformity coefficient for non-simplicial elements rotated  $180^\circ$  around the y-axis using a specified anisotropic metric.

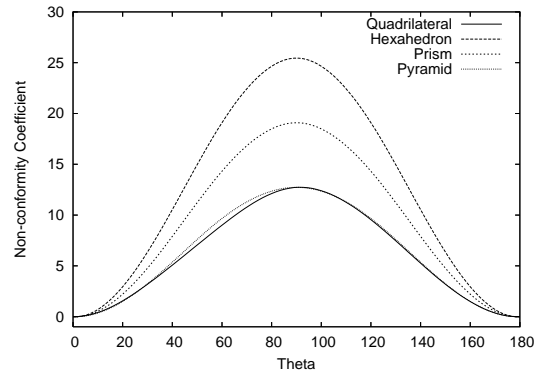


Figure 5. Effects of orientation on the non-conformity coefficient

In this particular case, the specified metric must be anisotropic in order for the measure to be dependent on direction. Because, if an identity matrix were specified, the length of a segment would remain the same when it is rotated in space. The use of an isotropic Euclidean metric would detect variations of size and stretching, but not of orientation. So, the metric chosen here is

$$\mathcal{M}_s = \begin{pmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ in 2D, and } \mathcal{M}_s = \begin{pmatrix} 0.25 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ in 3D.} \quad (7)$$

This metric considers that an element that is stretched by a factor of 2 in the  $x$  direction totally conforms to the specified metric. The rotation starts at an angle of zero when the stretched element

is in conformity. As the angle increases, the non-conformity also increases and detects that the element's orientation is no longer right, reaching its maximum value at an angle of  $90^\circ$ . At this point, the element is too large by a factor of 2 along the y-axis and too small by a factor of 2 along the x-axis. At  $180^\circ$ , the element returns to a direction where its stretching is ideal and where the coefficient reflects perfect conformity.

#### 4.4. Shape degeneration

When the basic types of modification, i.e. scaling, stretching and orientation, are combined, it can lead to other types of element degeneration which will be called "shape degenerations". In the context presented here, a non-simplicial element is considered degenerated at the point where it becomes non-convex, or of zero volume. In this section, three types of generic shape degeneration are presented: a zero-length edge, an internal angle of  $180^\circ$  and one of  $0^\circ$ .

Figure 6 shows the variation of the non-conformity coefficient when the length of the edges marked  $L$  are reduced from 1 to 0 in order to reach the point where there is at least one zero-length edge.

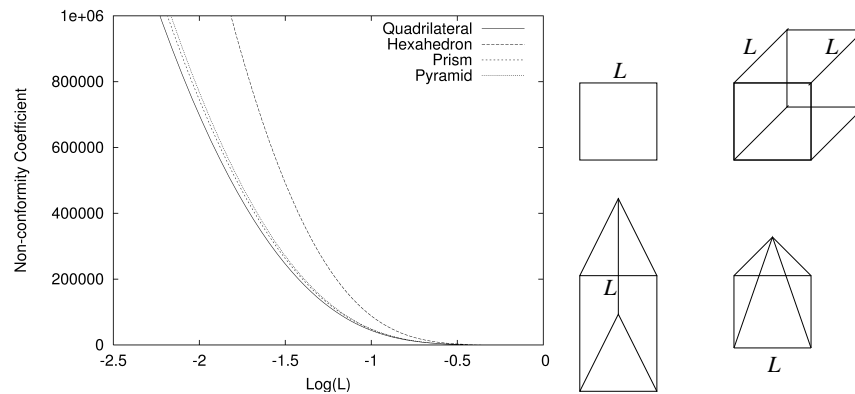


Figure 6. Effects of zero-length edges

Starting at perfect conformity for a value of  $L = 1$ , the non-conformity coefficient increases continuously as the edge length is reduced. As the elements approach their degenerated state, the non-conformity coefficient reaches extremely high values, and will actually tend towards infinity every time two or more vertices are at the same location.

An element can also become degenerated when an internal angle is larger than  $180^\circ$ . An element with such an angle will become non-convex.

Figure 7 shows the non-conformity coefficient for elements where the length  $L$  is reduced in order to create internal angles larger than  $180^\circ$ . The non-conformity coefficient starts at a perfect value and increases continuously and exponentially as  $L$  is reduced towards each element's degenerated state. It can be seen that, as each element approaches its degenerated state, the curves will asymptotically reach infinity.

The same behavior is observed when an arbitrary angle is decreased until it reaches zero, such as seen in Figure 8. Just before reaching  $\theta = 0$ , the non-conformity coefficient moves asymptotically towards infinity.



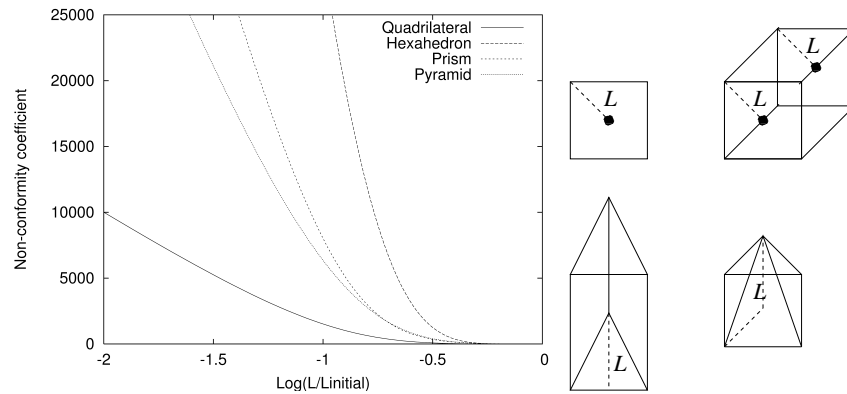


Figure 7. Effects of internal angle increase until degeneration

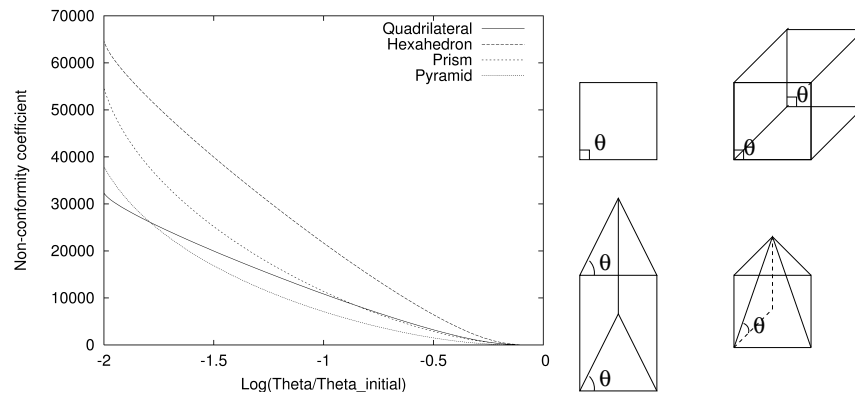


Figure 8. Effects of internal angle decrease until degeneration

#### 4.5. Reversal and Twist

In the case of inverted or twisted elements, it has been found that the measure does not properly detect such degeneration cases. Mathematically, the non-conformity measure cannot detect an element that is completely inverted. In fact, the reversed element, when strictly compared in terms of metrics, can still be seen as being of perfect size and shape.

For elements that are twisted but not completely reversed, the sub-simplex approach as previously described cannot be successfully used. Figure 9 shows a twisted quadrilateral where diagonals are identified as dotted lines. We can see that the four sub-triangles (1-2-4, 2-3-1, 3-4-2, 4-1-3) are all regular, nicely shaped triangles. The use of these four sub-triangles for computation of the non-conformity coefficient of this quadrilateral element even results in a value that is not far from total conformity.

In three dimensions, elements can also become twisted until they reach a degenerated state. The sub-simplex approach fails to detect twisted elements because each sub-simplex is measured independently from the others and cannot be twisted, nor can it be affected enough by twist for

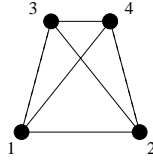


Figure 9. Quadrilateral in reversal and its sub-simplices

the entire element to become degenerated. A boolean test can be used to determine if an element is inverted or twisted, and the non-conformity coefficient adjusted to reflect the findings.

## 5. APPLICATIONS

Several methods of vertex relocation in metric space on non-simplicial elements were presented and compared in previous work [13]. The conclusions drawn on the validity of each approach was based on experience and visual inspection. Now, equipped with a non-conformity measure, meshes where quality is defined by a Riemannian metric can be quantitatively compared, and these methods can be revisited. In this section, the non-conformity coefficient is computed on some of the meshes presented in [13] and results obtained are compared with our previous assessment of each vertex relocation scheme.

The left of Figure 10 shows a  $5 \times 5$  mesh in a rectangle where all elements are exactly identical rectangles. The right figure shows the mesh adapted with a method of edge length equidistribution using a Euclidean metric for  $\mathcal{M}_s$ . The variance of the edge lengths of the original grid is 0.1127, while those of the adapted grid has decreased to 0.0807. The adapted grid is better from the point of view of edge length equidistribution, but not for grid orthogonality.

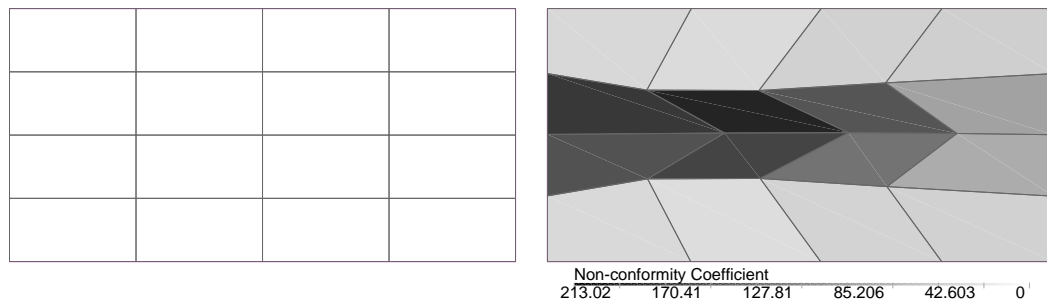


Figure 10. Edge length equidistribution using a euclidean specified metric. (Before:  $\varepsilon = 56.966$ , After:  $\varepsilon = 102.061$ )

On the right of Figure 10, colors in each element represent the elementary value of the non-conformity coefficient for that particular element measured with the specified Euclidean metric. The initial mesh presents a global non-conformity value of 56.966, as opposed to 102.061 for the adapted mesh. Note that, even if the initial mesh is the ideal mesh for this set of conditions, its non-conformity is still high. Even if they are perfectly shaped rectangles, one must remember that they are still compared to the ideal metric element, which is a unit square in this case. Achieving

perfect conformity on the global scale in this case is impossible, and the original mesh is the best compromise of size and stretching for these particular conditions.

The next example is a Cartesian mesh that is adapted using several vertex relocation algorithms with the goal of fitting a specified anisotropic metric. The metric is constructed with the second derivatives of the grey scale of a black and white picture. In this case, the picture is that of the mathematician Riemann (more details on how these meshes were obtained can also be found in [13]). The initial mesh, presented on the left of Figure 11, is composed entirely of identical square elements. The right-hand image shows the elementary non-conformity coefficient for each element. It is interesting to see the picture of Riemann appear, meaning that the non-conformity is present where features in the picture appear. High values for non-conformity are seen in regions where smaller or larger elements are needed. Globally, this initial mesh presents an average non-conformity coefficient of 11.33, but elementary values vary from almost perfect (0.04) to about 58.

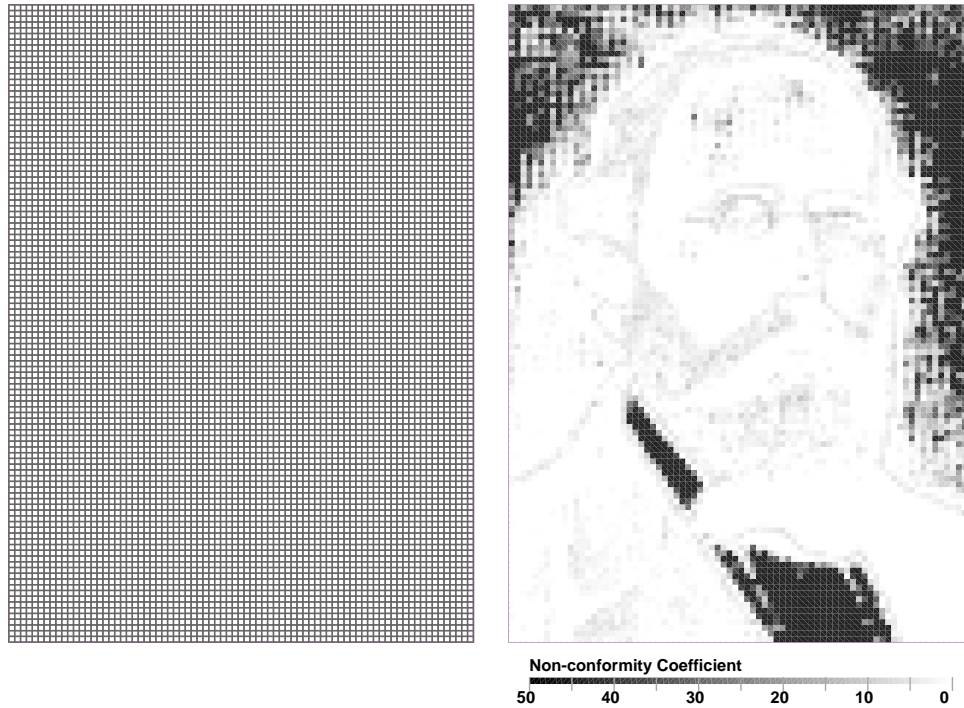


Figure 11. Initial grid,  $\varepsilon = 11.33$

The mesh is first adapted to its specified metric using a spring analogy algorithm. In this analogy, each edge around a vertex is a spring with a constant computed from the specified metric. The system's energy is minimized to find the optimum vertex position. Using the specified metric, each spring constant is computed as follows:

$$k_{ij} = \frac{L_{Ms}(e_{ij})}{L_{Eu}(e_{ij})} \quad (8)$$

where  $L_{Ms}(e_{ij})$  is the length of edge  $ij$  measured in the specified metric space and  $L_{Eu}(e_{ij})$  is the length of the same edge measured in the Euclidean space.

In the resulting mesh, presented in Figure 12(a), we can see features of the original picture appearing as elements adapted to fit their specified metric, showing a general increase in quality. From the non-conformity standpoint, the average value has decreased to a value of 5.16, showing the increase in quality of the mesh. Examining Figure 12(b), which plots elementary non-conformity, we can see the opposite effect: the picture attenuates the features in the lower range of values, meaning that non-conformity is very low around the principal features. It can also be seen that more elements have low non-conformity, but that the highest value has increased since the initial state of the mesh. Keep in mind that this adaptation algorithm increases the global quality in the mesh at the expense of a higher non-conformity for some elements, up to a value of about 80, which still represents an element of high quality that is not even close to degenerate. This effect is caused by the fact that the number of vertices was kept constant throughout the whole adaptation process. Since the mesh does not comprise enough vertices to completely satisfy the specified metric, the adaptation algorithm tries to find the best mesh for the prescribed conditions.

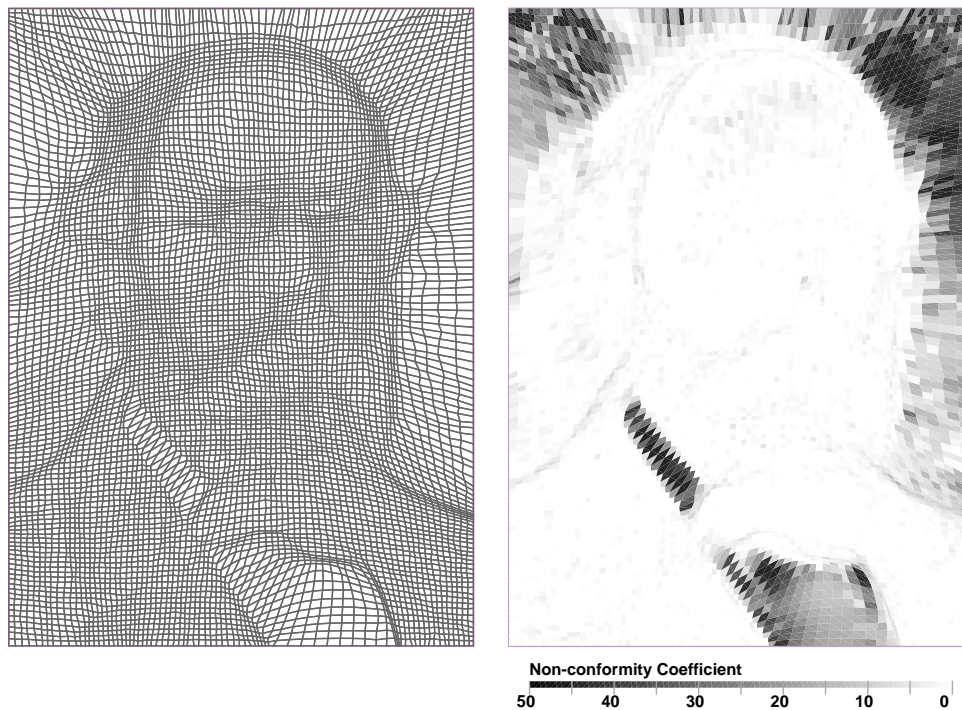


Figure 12. Adaptation with the spring analogy,  $\epsilon = 5.16$

Figure 13 shows a mesh that was adapted using an empirical method combining edge length equidistribution, area equidistribution and the spring analogy. From the mesh only, we can see that Riemann's features are slightly more defined than in the mesh that was created using only the spring analogy. The global non-conformity coefficient has decreased to 4.79, measuring an increase in quality. By looking at the figure, we can see that more elements are of low non-conformity, hence lowering global non-conformity. Again, some elements are of lower quality than they were initially, but this is caused by the constraints imposed by the structured nature of the mesh being adapted

and by the algorithm used to adapt it.

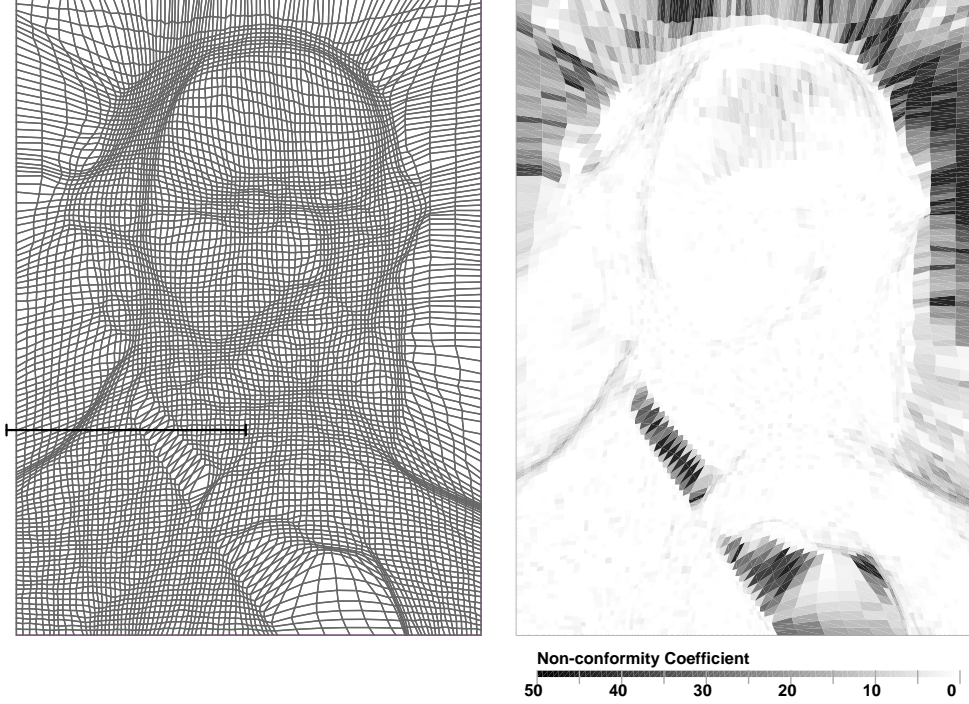


Figure 13. Adaptation with a combination of the spring analogy, length and area equidistribution combination,  $\varepsilon = 4.79$

In the results presented in this section, we saw that, in a global sense, the measure seems to corroborate our visual sense of what constitutes a better mesh. In order to obtain a deeper sense of how the non-conformity measure reflects the local discrepancies in the actual and specified metric, its behavior will now be studied along an arbitrary cut in the  $x$  direction. This analysis is performed on the mesh shown in Figure 13, where a black line has been drawn to identify the zone under study.

An anisotropic mesh conforms to a prescribed metric field when it conforms locally to a prescribed size, stretching and orientation. To verify the non-conformity measure on a real mesh, those three characteristics are first computed on both the  $\mathcal{M}_s$  and  $\mathcal{M}_K$  tensor fields, and then compared. The result is shown in Figure 14.

For size comparison, a coefficient  $A$ , the inverse of the square root of the metric determinant, which is proportional to an element area, is used. The stretching factor  $\kappa$  introduced by Formaggia and Perotto[14] is used to compute stretching of the actual element and the stretching described by the specified metric. The orientation is then computed as the angle  $\alpha$  of the Eigen direction associated with the largest Eigenvalue. The discrepancy between  $\mathcal{M}_s$  and  $\mathcal{M}_K$  is then evaluated in size and stretching by the relative difference of  $A$  and  $\kappa$  respectively, and plotted in Figure 14. For orientation, the angle difference  $|\alpha_s - \alpha_K|$  has to be weighted by the stretchings  $\kappa_s$  and  $\kappa_K$ , in a way that no difference is obtained when either  $\mathcal{M}_s$  or  $\mathcal{M}_K$  is isotropic. The orientation comparison is then computed as

$$C_\alpha = (1 - \kappa_s)(1 - \kappa_K) \min(|\alpha_s - \alpha_K|, \pi - |\alpha_s - \alpha_K|) \quad (9)$$

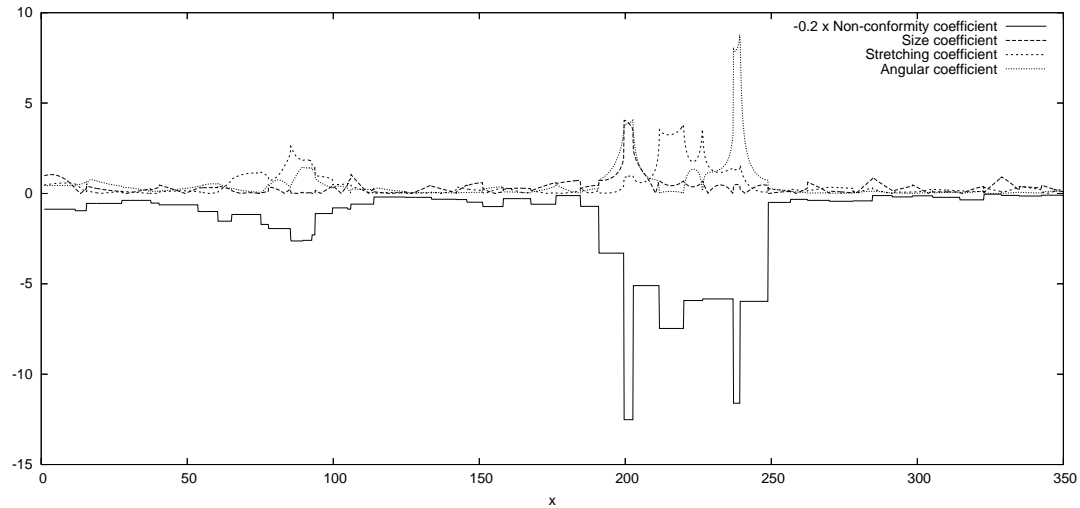


Figure 14. Discrepancies in the three metric characteristics compared to the non-conformity coefficient

It can be seen in Figure 14 that there are two regions where larger differences in size, stretching and/or orientation are detected using the previously described method. The non-conformity measure reacts as predicted, and also detects these specific regions in a similar manner. One can even see that the non-conformity coefficient keeps increasing when more than one type of discrepancy in the characteristics is observed and vice versa. Some noise can be observed in the flat regions, but this can be associated with the fact that there is only one value of the non-conformity coefficient computed for each element. In fact, when the non-conformity coefficient is evaluated in an element crossed by the cut line, it uses evaluations of the sub-simplices and vertex values that are not directly on the cut line, but around it. This is in contrast to the three characteristics which are computed from  $\mathcal{M}_s$  and  $\mathcal{M}_K$  that are restricted on the cut line. Based on these results, we can conclude that the non-conformity measure is, as expected, sensitive to discrepancies in size, stretching and orientation in a cumulative manner. This fact can be used as a way to measure quality or to compare anisotropic meshes.

## 6. CONCLUSION

A method has been presented to measure the non-conformity of a mesh to its specified metric for non-simplicial elements. Previous work has shown that the method is valid for simplices in any dimension. It has been shown in this paper how the method can be generalized to the analysis of both simplices and non-simplices. The measure, sensitive to size, stretching and orientation of elements, can be qualified as *universal* because it can be used on meshes composed of any combination of element types in any dimension.

Furthermore, a measure resulting in a single number to qualify an entire mesh can easily be used in benchmarking processes for the choice or design of mesh generation and adaptation algorithms. It can be used to differentiate complex meshes in a manner that is not dependent on user experience or trial and error. The use of the non-conformity measure is solely dependent on the specified target, which can be derived from data relevant to the user's needs, adding another meaning to the term

”universal” as discussed above.

The development of such a tool can be very useful in iterative *a posteriori* adaptation schemes. In future work, the use of the non-conformity as a means to compare different algorithms of vertex relocation and refinement is planned, but also its use directly as a cost function for mesh optimization.

#### ACKNOWLEDGEMENTS

The authors would like to thank the NSERC for its support of this research in the form of individual grants to the last two authors. They would also like to acknowledge the use of VU (<http://www.invisu.ca>), the software package used to draw all the images.

#### REFERENCES

1. P.-L. George, ed., *Maillage et adaptation*. Paris: Hermès, 2001.
2. P. M. Knupp, “Winslow smoothing on two-dimensional unstructured meshes,” *Engineering with Computers*, vol. 15, pp. 263–268, 1999.
3. B. K. Soni, R. Koomullil, D. S. Thompson, and H. Thornburg, “Solution adaptive grid strategies based on point redistribution,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 189, pp. 1183–1204, 2000.
4. L. A. Freitag, “On combining laplacian and optimization-based mesh smoothing techniques,” *AMD Trends in Unstructured Mesh Generation, ASME*, vol. 220, pp. 37–43, 1997.
5. J.-F. Remacle, X. Li, N. Chevaugnon, and M. S. Shephard, “Transient mesh adaptation using conforming and non conforming mesh modifications,” in *Eleventh International Meshing Roundtable*, (Ithaca, NY), pp. 261–272, Sandia National Laboratories, Sept. 2002.
6. K.-F. Tchou, J. Dompierre, and R. Camarero, “Conformal refinement of all-quadrilateral and all-hexahedral meshes according to an anisotropic metric,” in *Eleventh International Meshing Roundtable*, (Ithaca, NY), pp. 231–242, Sandia National Laboratories, Sept. 2002.
7. K.-F. Tchou, J. Dompierre, and R. Camarero, “Automated refinement of conformal quadrilateral and hexahedral meshes,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 59, pp. 1539–1562, Mar. 2004.
8. M.-G. Vallet, “Génération de maillages anisotropes adaptés. Application à la capture de couches limites,” Tech. Rep. 1360, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, France, Dec. 1990.
9. M.-G. Vallet, F. Hecht, and B. Mantel, “Anisotropic control of mesh generation based upon a Voronoi type method,” in *Third International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics and Related Fields* (A. S. Arcilla, J. Häuser, P. R. Eiseman, and J. F. Thompson, eds.), (Barcelona, Spain), pp. 93–103, North-Holland, June 1991.
10. P. Labbé, J. Dompierre, M.-G. Vallet, F. Guibault, and J.-Y. Trépanier, “A universal measure of the conformity of a mesh with respect to an anisotropic metric field,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 61, pp. 2675–2695, 2004.
11. C. L. Bottasso, “Anisotropic mesh adaption by metric-driven optimization,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 60, pp. 597–639, May 2004.
12. P.-L. George and H. Borouchaki, *Delaunay Triangulation and Meshing. Applications to Finite Elements*. Paris: Hermès, 1998.
13. Y. Sirois, J. Dompierre, M.-G. Vallet, P. Labbé, and F. Guibault, “Progress on vertex relocation schemes for structured grids in a metric space,” in *8th International Conference on Numerical Grid Generation*, (Honolulu, USA), pp. 389–398, June 2002.
14. L. Formaggia and S. Perotto, “Anisotropic error estimator for finite element methods,” in *31st Computational Fluid Dynamics*, Lecture Series 2000–05, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Mar. 2000.

## Annexe B – Hybrid mesh smoothing based on Riemannian metric non-conformity minimization

Yannick Sirois<sup>a</sup>, Julien Dompierre<sup>b</sup>, Marie-Gabrielle Vallet<sup>c</sup>, François Guibault<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*BMA, 144 rue Barr, St-Laurent (Québec), H4T 1Y4 Canada*

<sup>b</sup>*Laurentian University, 935 Ramsey Lake Road, Sudbury (Ontario), P3E 2C6 Canada*

<sup>c</sup>*École Polytechnique de Montréal, C.P. 6079, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), H3C 3A7 Canada*

---

### Abstract

A smoothing method specifically designed to treat hybrid meshes is presented in this paper. This method, based on Riemannian metric comparison, minimizes a cost function constructed from a measure of metric non-conformity that compares two metrics: the metric that transforms a given element into its reference element and a specified Riemannian metric, that contains the desired target size and shape of each element. This combination of metrics allows the proposed mesh smoothing method to be cast in a very general frame, valid for any dimension and type of element. Numerical examples show that the proposed method generates high quality meshes as measured both in terms of element characteristics and also in terms of orthogonality at the boundary and overall smoothness, when compared to other known methods.

*Key words:* Mesh optimization, mesh adaptation, element shape, metric comparison, boundary orthogonality, anisotropy.

---

### 1. Introduction

In the context of numerical simulations, particularly in computational fluid dynamics (CFD), the concept of mesh quality is always an issue. Smoothing is a mesh modification method that can be used to increase mesh quality in many ways. Most often, simple smoothing algorithms are used after initial mesh generation or topological modifications to an existing mesh, in order to equidistribute variations of size or shape globally or locally, see [1, 2] for examples.

In this paper, a mesh smoothing method driven by the minimization of metric non-conformity is proposed. The presented method, instead of optimizing size or shape functions, directly compares an element's current metric to a desired target metric. These metrics contain, in a single matrix entity, details on local size and



shape. Since the algorithm is only dependant on a specified metric, it can be used in different settings such as initial mesh generation, where the specified metric is constructed from geometric information, or in *a posteriori* adaptation, where the metric is computed from a numerical solution. Assuming that a correctly defined metric is specified, this paper explains how a mesh smoothing method can be devised to generate high quality meshes with respect to the desired metric, while respecting many constraints for the mesh such as constant number of vertices and constant connectivity between vertices of the mesh. The main contribution of this paper is to propose a method that is applicable to hybrid meshes, which comprise elements of different types, and to show how minimization of metric non-conformity can be incorporated into a convergent mesh adaptation algorithm.

The first section of the paper presents some of the works related to mesh smoothing and discusses why a new smoothing algorithm is needed for industrial applications, that simultaneously accounts for both size and shape of the elements. The concepts of Riemannian metrics and non-conformity are explained next, in Sect. 3. The paper then goes on to explain the smoothing method used to optimize the non-conformity of a mesh (Sect. 4) and presents an algorithm based on the prototype presented in [3]. Numerical examples that illustrate the versatility of the method and the quality of the resulting meshes are presented in the final part of the paper for different types of meshes, and conclusions are drawn.

## 2. Mesh Optimization by Smoothing

Most smoothing methods can be separated into two categories: methods that optimize size distribution and methods that optimize element shape.

In the size distribution methods category, the most common type of smoothing is certainly Laplacian smoothing, where a vertex is moved to the center of its neighbors. Examples of other size distribution methods include physical analogies such as the spring analogy [4, 5] and particle potential minimization [6], methods based on the elliptical Poisson system [7, 8, 9, 10] as well as “center of mass” methods [11, 12]. These methods have been used in adaptive environments using weight functions or concentration functions that allow for spacing or size specification. Their main drawback is that they provide very little control over element shape, since they are only based on the measure of distance between points. They are usually not appropriate when orthogonality or other shape properties are desired. Moreover, these methods are subject to geometric tensions. This means that vertices are attracted in concave corners of the geometry, and this pulling effect can even result in the mesh folding outside the geometry, since optimal positioning of nodes is based on length and is not, by definition, aware of domain boundaries. This behavior can be controlled using constraints on the optimization process to enforce boundaries, or concentration

functions to reduce tensions. But these processes must often be adjusted somewhat manually for a given class of geometries. This implies that, as they are formulated, these optimization processes do not entirely incorporate the underlying engineering and computational objectives of smoothing.

The second category of methods is shape based optimization. Some of the best known methods in this category apply complex optimization algorithms to reduce a cost function based, for example, on angular criteria [13, 14] or on shape distortion measures such as those presented in [15, 16, 17]. Most often, these smoothing methods are used as a final step during mesh generation, to regulate shape variations from an ideal shape, for example a square for a two-dimensional quadrilateral element. The resulting meshes exhibit very smooth shape distribution. The inherent limitation of these methods lies in the fact that the definition of a perfect element shape is global. When a vertex is moved, the optimization process tries to satisfy a specific shape which is the same over the whole domain and is usually isotropic. These approaches are excellent to correct unsatisfactory shape distortions in a generated mesh. Local specification of shape can be implemented in these methods in order to also adapt the vertex distribution to complex flow characteristics, that locally exhibit highly anisotropic features.

In order to generate a better result, two or more smoothing methods can be combined either by successively applying each one, sequentially or iteratively, or by minimizing a single cost function obtained as an arbitrary combination of several simpler functions. However, this type of combined method results in heuristic approaches that are application and case dependant and thus, not as general as desired. In the present work, a single cost function is used, rather than an arbitrary combination of functions, in order to prevent spurious properties in resulting meshes and to eliminate the need for case specific modifications to the function.

From the previous analysis, it becomes apparent that current methods lack one of two kinds of control, either on size or shape, or combine them in a heuristic manner that does not give intrinsic control on both properties at the same time. In the present work, the goal is to unify these controls into a single target specification, and devise a vertex relocation method capable of satisfying at best this specification. For example, it could be necessary, in the same mesh, to specify highly anisotropic elements to resolve a shock near an airfoil while also specifying, in another region, highly isotropic elements with great size variations to resolve flow vortices at a trailing edge. In this case, a variation of a shape based approach might seem best suited for the shock region, while a size based approach would probably yield the best results for the trailing edge region.

To obtain high quality meshes with local control of mesh characteristics, a number of desired properties of the smoothing method have been identified. The smoothing method should allow the :

1. simultaneous optimization of both element size and shape;
2. specification of variable size and shape targets over the domain;
3. minimization of a single cost function;
4. smoothing of both structured or unstructured meshes possibly containing mixed element types;
5. construction of non-folding meshes without constraining the optimization process;
6. ensuring of the continuity between regions of different cell types (hybrid meshes).

The first three properties can be met using a cost function based on a Riemannian metric, as the next sections will show. Also, since a metric-based specification of the target mesh characteristics is independent of element type, the use of a cost function based on metric comparison ensures that the optimization process is independent of the mesh and element types as well.

Furthermore, the present work aims at developing a general mesh smoothing method that naturally converges towards non-folded meshes. Hence a formulation of the smoothing problem is chosen that lends itself to unconstrained optimization. It is postulated that for the optimization process to naturally result in high quality meshes without constraints, essentially entails that the overall process be specifying a correct form of the mesh smoothing problem. Here, a correct form of the smoothing problem refers to a formulation where element size, element shape, presence of domain boundaries and fixed mesh connectivity are accounted for intrinsically.

### 3. The Concepts of Metric and Non-Conformity

The use of a Riemannian metric as a size and shape specification map for adaptation of a mesh is a central concept to this paper. It has been first introduced in [18] as a way to describe the size, stretching and orientation of the mesh elements in a single matrix entity. It has been shown in works such as [19, 20] that the Riemannian metric allows the control of mesh characteristics through the specification of a single tensor defined on the domain.

A specified metric  $\mathcal{M}_s$  can be constructed from *a posteriori* error estimation or user defined functions as well as geometric properties. The Riemannian metric is an entity that can be used in any adaptation process, independent of how it is constructed and what characteristics the user wants to achieve through the adaptation process. The metric field  $\mathcal{M}_s$  uses the Hessian of a scalar variable, in the present case velocity magnitude or Mach number, to adapt the mesh to a solution obtained on an initial mesh (see e.g. [21]). The Hessian itself is reconstructed using the quadratic method described and analysed in [22].

Smoothing using a specified metric involves moving mesh vertices so that each element is as close as possible to the ideal size and shape, as measured in the space defined by the specified metric. These ideal elements are the unit side equilateral triangles or the unit squares in two dimensions and their equivalents in three dimensions. Being of the ideal size and shape in the metric will result in an element being of the specified size, stretching and orientation, according to the metric.

The quality of a mesh can be measured using the non-conformity coefficient presented for simplices in [23, 24] and extended to non-simplices in [25]. The central idea is that each element  $K$  in the mesh possesses an actual metric. This metric, denoted as  $\mathcal{M}_K$ , defines the transformation between the element in its present state and a reference element. The reference element, as described in the previous paragraph, is the same element type as element  $K$  with unit length edges. Evaluation of  $\mathcal{M}_K$  is done using finite element transformations, as described in [25].

The quality of an element is then defined as being optimal when that actual metric is equal to the specified metric:

$$\mathcal{M}_K = \mathcal{M}_s. \quad (1)$$

This statement means that the actual size and shape – aspect ratio and orientation – of element  $K$  are the ones required by the specified metric space.

Two residuals can be computed from Eq. (1) and, when added, result in the following non-conformity tensor:

$$T_{nc} = \mathcal{M}_K \mathcal{M}_s^{-1} + \mathcal{M}_s \mathcal{M}_K^{-1} - 2I \quad (2)$$

where  $T_{nc}$  is the non-conformity tensor and  $I$  the identity tensor. A norm is then taken on this tensor to obtain a single non-conformity value  $\varepsilon_K$ . There are a number of possibilities for the choice of a matrix norm. The Frobenius norm is used throughout this paper:

$$\varepsilon_K = \|T_{nc}\| = \sqrt{\text{tr}(T_{nc}^T T_{nc})}. \quad (3)$$

A global non-conformity measure  $\varepsilon_{\mathcal{T}}$  for a whole mesh  $\mathcal{T}$  has been defined by Labbé et al [23] as the average of the elementary values:

$$\varepsilon_{\mathcal{T}} = \frac{1}{n} \sum_i^n \varepsilon_{K_i} \quad (4)$$

where  $n$  is the number of elements in the mesh and  $\varepsilon_{K_i}$  the non-conformity measure of element  $i$ . This measure is used in Sect. 5 to compare the global quality among meshes obtained in numerical examples.

#### 4. Non-Conformity Minimization

Smoothing a mesh using a Riemannian metric as a control function is not a recent idea and a review of some tested methods can be found in [26]. Since most of these methods use the measure of distance in the specified metric, in either the weights or the cost function, it means that they are length based. As discussed in Sect. 2, it is inherent to these methods that they can result in regions of undesired element concentration, even folding, in highly curved regions or in areas with strong variations in the specified metric. In this section, an algorithm based on Riemannian metric non-conformity minimization that prevents these effects is proposed and explained.

##### 4.1. Choice of the cost function

Several cost functions can be constructed based on the elementary non-conformity measure and the choice discussed here is independent of the resolution algorithm presented in Sect. 4.3. The cost function  $f$  chosen for optimization is the sum of the squared non-conformity measures of the elements, as follows :

$$f = \sum_{K_i \in \mathcal{T}} \varepsilon_{K_i}^2 \quad (5)$$

Knowing that the non-conformity measure vanishes for a perfect element and increases exponentially as the element is modified from its perfect state, this function will put more emphasis on bad elements than an algebraic average, as in Eq. (4). The results obtained using this cost function have been compared to those obtained using the simple summation of the non-conformity measure, i.e. taking  $\varepsilon_{\mathcal{T}}$  as the cost function. In general, Eq. (5) generates better results in regions where the non-conformity measure is quite similar over neighboring elements, as it increases the distance between the values of the elements non-conformity measures. Minimization of this function prioritizes reducing distortions in the worse elements. Dispersion or standard deviation could also have been considered in order to reduce variation of non-conformity on neighboring elements and increase local smoothness of the mesh, but it has been judged not necessary to investigate at this stage of development.

The optimization algorithm described in this paper uses Gauss-Seidel iterations to determine the optimal position of the mesh vertices. Assuming a fixed position for all vertices except one, the optimal position for this vertex  $V$  is the position where the cost function  $f$  is minimized. The movement of vertex  $V$  only affects its neighborhood  $N(V)$  composed of elements  $K_i$  that own the vertex  $V$ . The optimal position  $(x_V, y_V, z_V)$  for vertex  $V$  is the one minimizing the contribution  $f_V$  of the neighborhood  $N(V)$  to the cost function  $f$

$$f_V = \sum_{K_i \in N(V)} \varepsilon_{K_i}^2. \quad (6)$$

#### 4.2. Application to hybrid meshes

It is an established concept that every smoothing method tries to move the mesh vertices so that an equilibrium between chosen forces is reached. It has been shown in [25] that, under the same state with respect to the equilibrium state, elements of the same type will have the same non-conformity coefficient. Hence, elements of the same type in the neighborhood  $N(V)$  will affect the equilibrium state of vertex  $V$  in the same way, but the same cannot be said for a neighborhood containing elements of different types.

Conceptually, it is necessary for a vertex belonging to elements of different types that the non-conformity coefficients of neighboring elements be equal under the same deformation, if they have the same specified metric. This is required to ensure that all elements have the same influence on vertex  $V$ , and thus that the new position will be chosen to satisfy a cost function that is independent of element type.

A study was carried out in two and three dimensions in order to find equivalence factors between non-conformity coefficients defined on different element types. In two dimensions, the study consisted of submitting a quadrilateral connected to a triangle to deformations in scaling, stretching and rotations using isotropic and anisotropic specified metrics. For non-simplices, the non-conformity coefficient is calculated using the sub-simplices method described in [25]. This study allowed to conclude that if the non-conformity coefficient of a quadrilateral is divided by a factor of 4, the resulting coefficient is equal to the non-conformity coefficient of a triangle under the same conditions. The study was repeated in three dimensions using a tetrahedron connected to a prism which in turn was connected to an hexahedron. The results showed that the non-conformity coefficient of the prism is to be divided by 6 and that of the hexahedron by 8, in order to be equivalent to the one of the tetrahedron.

In order to make non-conformity coefficients comparable quantities for different element types, it has been chosen to use the average of sub-simplices non-conformity for non-simplicial elements. This approach is surely not exact in every case, the tests only showing that under constant specified metric deformation, the average of the sub-simplices non-conformity are equal regardless of element type. The non-conformity coefficients will behave differently under a specified metric that varies over the element, but the use of the average sub-simplices coefficient has been judged satisfactory for the purposes of smoothing.

#### 4.3. Minimization algorithm

Non-conformity minimization is here only applied in a smoothing algorithm, without topological modifications. But in theory, the same concept of minimization local non-conformity could be applied to any mesh optimization algorithm based on the optimization of a cost function.

In order to minimize a cost function based on the non-conformity measure, the algorithm presented by Seveno in [27] has been chosen as the basis for our design. The algorithm discussed here is based on a prototype that was presented in [3]. The general approach chosen to verify the validity of the non-conformity minimization concept can be rated as a “brute force” method, since it is based on an optimization method that does not require the computation of cost function gradients.

At the global mesh level, a Gauss-Seidel scheme is used, where each vertex is moved in an arbitrary order, typically the one in which vertices were listed in the mesh input file, and the new computed position is updated right away to influence the displacement of the next vertices. The optimal position of each vertex is determined by sampling the cost function at various positions around its current position, using eq. 6, and choosing the position with the lowest value of the cost function. In this approach, the global computational cost of the optimization process is directly related to the number of function evaluations performed for each vertex, which is itself related to the number of alternate locations considered. Several tests have been carried out to increase the algorithmic efficiency of the optimization process and to reduce the number of locations evaluated for each vertex in a given global iteration.

These tests have allowed an optimization approach to be designed in which as many nodes as possible are rapidly moved at each iteration, without initially attempting to determine a precise optimal position for each vertex. Since the optimal position of a given vertex depends on the position of all its surrounding vertices, it is pointless to compute a very precise optimal position of one vertex while all surrounding vertices are moving. These experiences on smoothing have also shown that vertices tend to move in groups, and that once a group of vertices has started to move in a given direction, it tends to maintain that same direction for a few iterations.

Based on these observations, an approach has been devised, in which recent movement history is encoded for each vertex. This information distinguishes three possible states of a vertex, **CAN\_MOVE**, **MOVING(*n*)** and **CONVERGED**, described below.

The global smoothing procedure is summarized in algorithm 1. All vertices are initially placed in the **CAN\_MOVE** state, which indicates that new locations in all space directions should be evaluated for these vertices. The evaluation process is described next, as algorithm 2. When a better position is identified for a vertex, its state changes to **MOVING(*n*<sub>max</sub>)**, and its direction of movement is stored. The **MOVING(*n*)** state, with  $1 \leq n \leq n_{\text{max}}$ , indicates that only the location in the stored direction should be evaluated during the next *n* iterations. This choice considerably reduces the number of evaluations performed, compared to the sampling done in algorithm 2. Since for each evaluation of the cost function, the specified metric must be integrated over all neighboring cells using values at Gauss points that must be localized on the original mesh, a considerable speed increase is obtained by reducing the number of function evaluations. The third state, **CONVERGED**, is reached when algorithm 2 fails

to identify a better position for a vertex, and the displacement fraction considered is below the minimum displacement threshold  $\delta_{min}$  (see below).

The maximum number of iterations is set by the user in order for the code to stop if convergence cannot be obtained. During each global iteration, the algorithm tries to move every non-CONVERGED vertex. The procedure is stopped completely and said to have converged when all vertices are set to the CONVERGED state. This criterion is very restrictive but is necessary in cases where some of the mesh vertices need to travel a great distance in the domain, in very small displacement steps while the majority of the other vertices do not need to move at each iteration. The mesh could be considered converged by a more relaxed criterion such as the average displacement, but it could happen that some vertices do not completely travel to their optimum positions, causing others to be moved along the way.

---

**Algorithm 1** Global Procedure

---

```

for all vertex  $\in \mathcal{T}$  do
    Set vertex.state = CAN_MOVE
    Set vertex. $\delta$  =  $\delta_{max}$ 
for iter = 1 to maximum number of iterations do
    for all vertex  $\in \mathcal{T}$  do
        if vertex.state = CAN_MOVE then
            Try to move vertex using Algorithm 2
            if vertex has moved then
                Set vertex.state = MOVING( $n_{max}$ )
        else
            if vertex.state = MOVING( $n$ ) then
                Try to move vertex according to the previously computed displacement vector
                if vertex has moved then
                    Set vertex.state = MOVING( $n-1$ )
                else
                    Set vertex.state = CAN_MOVE
                    Set vertex. $\delta$  =  $\delta_{max}$ 
            if vertex has moved then
                for all neighbor_vertex  $\in N(vertex)$  do
                    if neighbor_vertex.state = CONVERGED then
                        Set neighbor_vertex.state = CAN_MOVE
                        Set neighbor_vertex. $\delta$  =  $\delta_{max}$ 
    if All vertex.state = CONVERGED then
        End the global iteration cycle

```

---



In order to identify better vertex positions for all vertices in the **CAN\_MOVE** state, a spatial sampling of potential locations is performed once per global iteration, as described by algorithm 2. This sampling considers  $3^d - 1$  positions on the first level of a cartesian grid centered at the vertex, where  $d$  is the number of space dimensions. The grid of positions considered is constructed using a uniform step size along each spatial direction. This step size is computed as a fraction  $\delta$  of  $L$ , the average Euclidian length of the edges connected to vertex  $V$ . Initially, a large value of  $\delta$  ( $= \delta_{max}$ ) is used to allow for fast movement of the vertices. This fraction is stored as part of the vertex state, and is dynamically modified according to the result of the cost function minimization. The value of the cost function at each sample location ( $CF_{test}$ ) is compared with the value of the function for the vertex in its initial position ( $CF_{initial}$ ). If a smaller value of the cost function is found, the vertex is moved to that new location, and the fraction  $\delta$  is increased by a factor  $c$ , to anticipate further movement. On the other hand, when spatial sampling fails to identify a better position, the vertex remains in its initial position and the fraction  $\delta$  is reduced by the factor  $c$ , unless  $\delta$  falls below the threshold  $\delta_{min}$  in which case the vertex changes state to **CONVERGED**. The reduction of  $\delta$  ensures that points closer to the initial position will be tested, to see whether the optimum position lies between the actual position and the ones previously tested.

For all examples presented in Sect. 5, the following values have been used:

$$\delta_{min} = 0.01 \tag{7}$$

$$\delta_{max} = 0.5 \tag{8}$$

$$c = 5 \tag{9}$$

These values result only in a two step decrease in displacement length, which is an excellent compromise between precision and computation time. Three levels of displacement may not seem much, but thorough testing of different values has shown that moving vertices by less than 1% of the local average edge length does not really affect the final mesh, but drastically increases computational costs.

In order to move vertices on the domain boundaries, an algorithm similar to the one just presented is used. In this case, the algorithm relies on the parametric definitions of the geometric entities that support the boundary edges and faces of the computational domain. In these cases, the variable  $L$  is defined in terms of the parametrization of the underlying entity instead of the Euclidean distance, and the displacement is computed from the parameter value at which the vertex was initially located. Then, the positions tested are evaluated on the entity using a modified value of this parameter.

This algorithm yields very good results, as shown in Sect. 5. The main disadvantage of using this “brute force” approach is that, even with the steps taken to accelerate the process, it is still slow. The testing of so many positions has a seri-

---

**Algorithm 2** Optimization of a vertex position (2D version)

---

```

Compute  $CF_{initial}$  = cost function for current position
Compute  $L$ , average edge length around vertex
Set  $CF_{best} = CF_{initial}$ 
for  $i = -1$  to  $1$  do
    for  $j = -1$  to  $1$  do
        if  $(i, j) \neq (0, 0)$  then
            Test position =  $(x + i\delta L, y + j\delta L)$ 
            Compute  $CF_{test}$  = cost function for test position
            if  $CF_{test} < CF_{best}$  then
                Set  $CF_{best} = CF_{test}$ 
                Set  $i_{best} = i$  and  $j_{best} = j$ 
if  $CF_{best} < CF_{initial}$  then
    Move vertex to  $(x + i_{best}\delta L, y + j_{best}\delta L)$ 
    if  $\delta < \delta_{max}$  then
        Set  $\delta = c\delta$ 
else
    Set  $\delta = \delta/c$ 
if  $\delta < \delta_{min}$  then
    Set vertex.state = CONVERGED

```

---

ous impact on the computing performance. This is caused by the fact that every time a position is tested, the non-conformity measure must be evaluated on all the neighboring elements. As discussed earlier, in order to compute these non-conformity measures, an average specified metric  $\mathcal{M}_s$  must be evaluated on each element using numerical integration as discussed in [25]. This operation is very costly because each integration point must be localized and interpolated on the background mesh, which is usually the mesh before smoothing, onto which the specified Riemannian metric field  $\mathcal{M}_s$  has been defined.

## 5. Numerical Examples

This section presents a series of academic test cases for which minimization of the mesh non-conformity measure using the proposed algorithm yields high quality meshes when compared to previously published smoothing methods. The main assumption regarding these tests is that the specified Riemannian metric used to control the smoothing process can be computed correctly and adequately represents a user's needs.

### 5.1. Optimization of shape

The first example presented is quite simple. The purpose of this example is to show how sensitive to shape distortion the proposed algorithm is, compared to edge length equidistribution. It is a rectangular geometry with a structured  $4 \times 4$  quadrilateral element mesh. Obviously, the smoothest mesh on this geometry, without using concentrations, is the one where all quadrilaterals are perfect rectangles that fit the geometry.

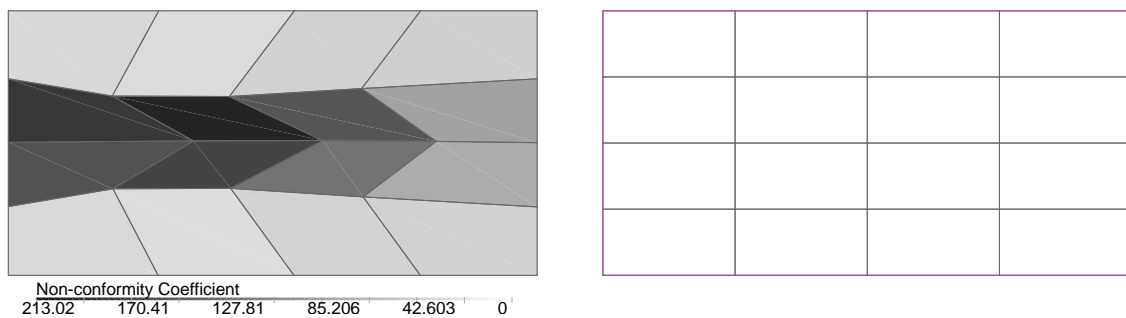


Figure 1: Edge length equidistribution versus minimization of non-conformity measure in a rectangular domain

The left part of Figure 1 shows the results of smoothing the mesh on this geometry using edge length equidistribution, a method discussed in [26], while the right part

shows the result of non-conformity minimization. For both cases a uniform Euclidean specified metric is used. Smoothing using the first method generates a valid mesh. The element are roughly the same size and vertical edges were lengthened so that edge lengths become more uniform. However, shape is not optimized at all. The color scale shows the resulting non-conformity measure of each element. The global non-conformity measure for this mesh is  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 102.061$  and the elementary non-conformity measure  $\varepsilon_K$  varies from 41 to 213. By comparison, the second mesh is much better. Its non-conformity measure is  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 56.966$  and is the same for each element since the specified metric is uniform. While not perfect, one must keep in mind that the reference element is a unit square, not a rectangle. But it can be seen that not only size was optimized but the shape was also respected, yielding elements closer to the unit square than in the other mesh.

The results presented here, using a Euclidean specified metric, show that the non-conformity minimization algorithm will yield a comparable mesh to any of the shape optimization method discussed in section 2 for this simple case. They also show that the specification of the metric has the desired shape effect on the mesh, and the same results should be expected in more complex cases.

### 5.2. Smoothing in a concave domain

One of the main concerns while smoothing meshes is the introduction of geometric tension, as described in Sect. 2. In this section, the example uses a simple concave geometry in order to show that, compared to other smoothing methods, the effect of geometric curvature on final vertex position is minimal for metric non-conformity based smoothing.

In this example, the computational domain is a two dimensional duct with a  $180^\circ$  elbow, as shown in Fig. 2. The initial mesh used for the smoothing procedure, also shown in Fig. 2, is a standard transfinite interpolation. If this mesh is smoothed using widely used methods such as the spring analogy or standard elliptic smoothing, the results is not satisfactory because of geometric tensions caused by the concave corner of the geometry. As it has been demonstrated in [28].

Smoothing is applied to this mesh using a locally defined isotropic target metric as the specified metric. The metric field prescribes a regular shape and the local target size is set to be the average edge length connected to the vertex. The resulting mesh, shown in figure 3, presents almost no sign of undesired concentrations in the curved region. The mesh is smooth in all directions and everywhere enclosed in the prescribed geometry. It can be seen that the smoothing did not destroy the balanced vertex distribution on both sides of the symmetry axis inside the duct, a sign that the adapted mesh is in a stable state. Compared to the initial mesh that had a non-conformity measure of  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 1.05$ , this mesh considerably reduced this

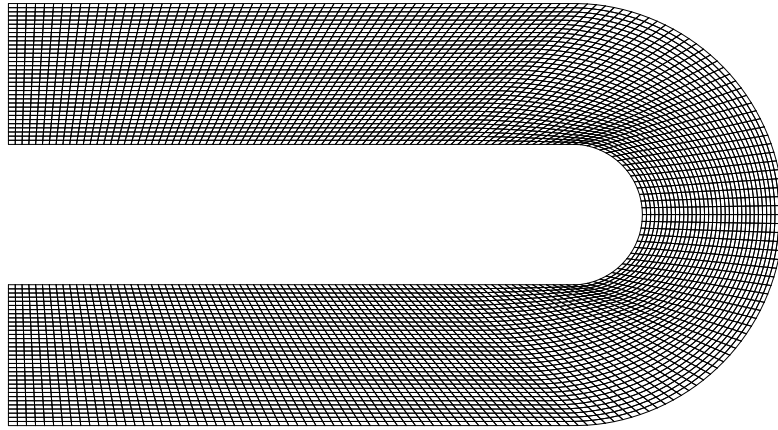


Figure 2: U-duct with a  $199 \times 35$  transfinite interpolation mesh

measure to  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 0.762$  which is a good quality improvement considering the fixed mesh connectivity.

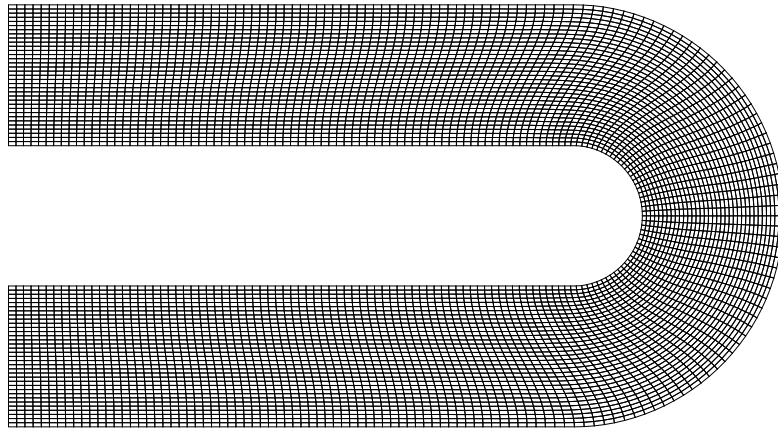


Figure 3: Mesh smoothed using non-conformity minimization and Euclidean metric

One can also notice the orthogonality of the elements at the boundaries. This mesh characteristic is very useful in CFD for example, but is not inherent to methods such as transfinite interpolation. Orthogonality must usually be imposed through special conditions in optimization functions near the boundary. In the case of non-conformity minimization, it is implied in the specification of the reference element. When a boundary vertex needs to be moved, it is almost certain that it cannot reach the desired element size, being restricted to sliding on the boundary. In that case, the cost function tends to minimize shape discrepancy between the reference element and

the actual element to reach the lowest cost function value it can. Since the desired element is a square, the vertex will move to the position where its two adjacent elements become closest to squares, generating orthogonal elements.

### 5.3. Smoothing as an *a posteriori* mesh adaptation process

The next examples shows how the proposed mesh smoothing method reacts to the specification of a more complex target metric that includes anisotropy. For this example, a CFD solution is computed on the concave duct geometry presented previously in order to compute a target metric based on error estimation.

The initial mesh used for this computation is shown in Figure 4. Knowing that there will be boundary layers present, the mesh has been concentrated near the boundary before hand. No other features have been introduced in the mesh in order to anticipate flow characteristics.

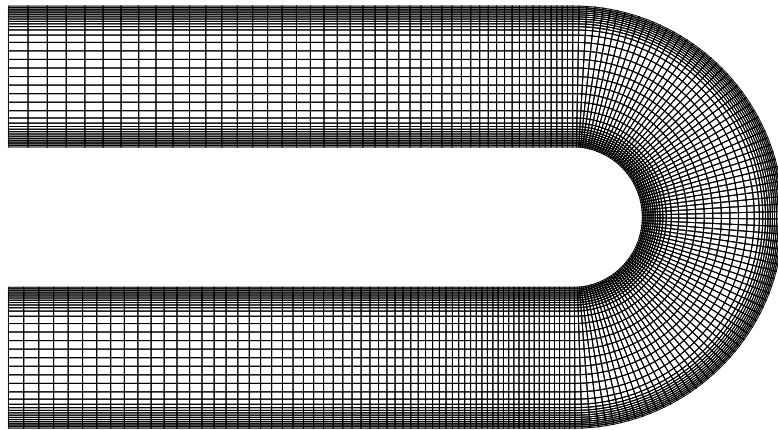


Figure 4: Mesh provided to the CFD solver and also initial mesh used in the smoothing algorithm.

Figure 5 shows the flow velocity solution obtained on the initial mesh. Distinct flow characteristics such as the boundary layers and the detachment of this layer after the elbow are noticeable in the solution. The boundary layer detachment was not anticipated and should be better resolved with an adapted mesh. The metric is constructed using error estimation based on the second order derivatives of the velocity solution shown in Figure 5. This reconstruction process yields an anisotropic metric field defined for each vertex position in the domain that gives the desired size, stretching and orientation. Using this metric, a global non-conformity measure of  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 5.27$  can be evaluated for the initial mesh.

The result of smoothing the mesh of Figure 4 using non-conformity minimization with the *a posteriori* metric field yields the mesh shown in Figure 6. This mesh is well adapted to all flow characteristics, including the detachment of the boundary layer

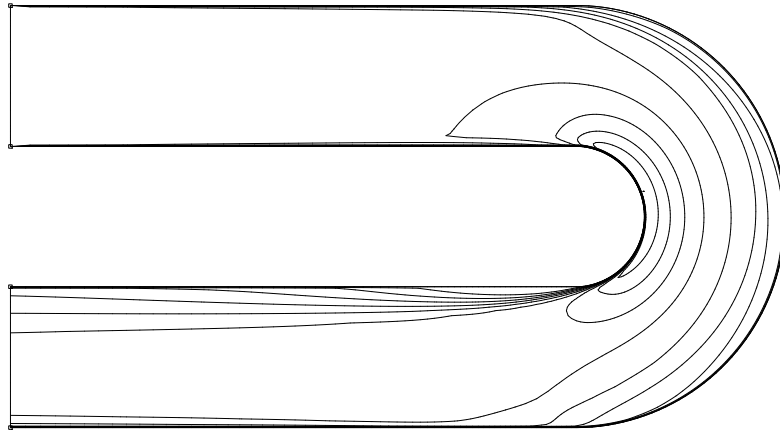


Figure 5: Isovalues of velocity computed on the initial mesh.

which can be easily seen. Again, for the same reasons as in the previous example, orthogonality at the boundaries is preserved, which is good considering the complexity of the metric specified.

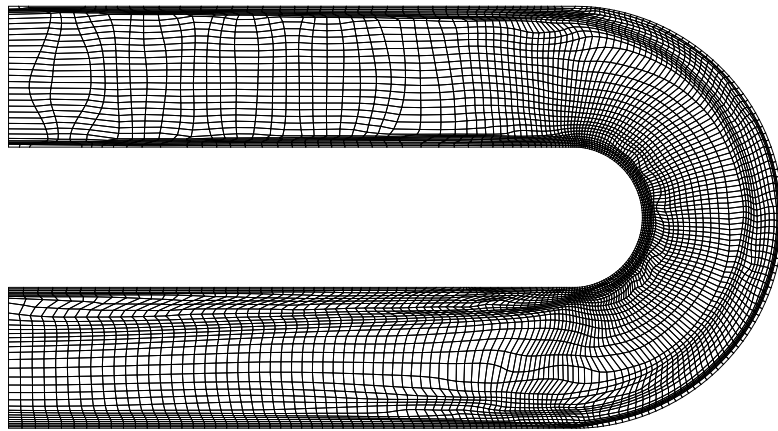


Figure 6: Mesh smoothed using metric constructed from solution

This result can be compared to those obtained using pure spring analogy, shown in Figure 7 and discussed in [28]. This later mesh has an average non-conformity measure of  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 4.20$  compared to  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 2.01$  for the mesh of Figure 6. Compared to non-conformity minimization, the spring analogy tends to concentrate elements in the elbow almost to the point of folding outside the geometry. Moreover, orthogonality near boundaries is not preserved when using spring analogy compared to non-conformity minimization.

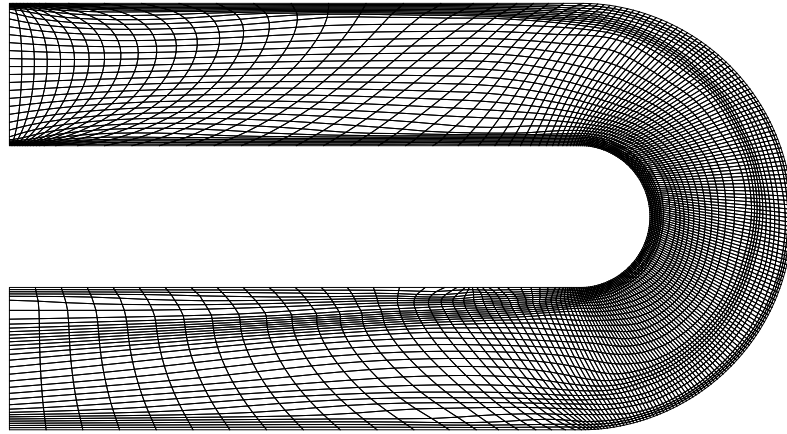


Figure 7: Mesh adapted using pure spring analogy

One can also notice in Figure 6 that in some regions, the element distribution is quite uneven and irregular, forming an odd wavy pattern. This happens mainly in the top left entrance section and on the inside of the elbow, close to the concentration pattern caused by the boundary layer.

In this case, in an attempt to satisfy the specified metric, the non-conformity minimization algorithm tries to distribute the limited number of vertices according to the specified variations, and since there are too few vertices to completely resolve the features in the metric, the result is a wavy pattern that tries to satisfy the shape specification. Even though apparent in the mesh, these patterns have no impact on the quality of the mesh nor on the flow solution.

#### 5.4. Adaptation of 2D hybrid meshes

The example shown here will demonstrate, in two dimensions, that the algorithm can be used to increase the accuracy on real physical cases. This time, a more complex flow analysis has been chosen, the case of the RAE2822 transonic wing profile. This case is well known as a CFD calibration test as it contains many pertinent features, such as shock, stagnation point and trailing vortices and, also because experimental data are available for multiple configurations. From the mesh adaptation point of view, it is a most interesting case as it includes complex flow features that are by definition anisotropic. Hence making anisotropic mesh adaptation the perfect tool to capture and accurately resolve those features.

##### 5.4.1. Definition of an alternative quality measure

In order to help demonstrate how the optimization of the non-conformity coefficient on a hybrid mesh increases quality, the results obtained are compared to a well known quality measure: the form factor  $\eta$ . The form factor is defined in [29] as:



$$\eta = \frac{\left(\prod_{i=1}^d \lambda_i\right)^{1/d}}{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \lambda_i} \quad (10)$$

where the  $\lambda_i$ ,  $i = 1, \dots, d$  are the eigenvalues of the metric that transforms element  $K$  in the reference element in dimension  $d$ . In two dimensions, equation 10 reduces to:

$$\eta = \frac{4\sqrt{3} S_K}{\sum_{1 \leq i < j \leq 3} L_{ij}^2} \quad (11)$$

where  $S_K$  is the area of the two dimensional simplex and  $L_{ij}^2$  the distance between vertices  $i$  and  $j$  of the same simplex (see [29]). This criterion will vary between 0 for a degenerated simplex to 1 for a simplex equal to the reference element.

When adapting using a specified metric, one desires to measure the form factor in the specified metric space. To achieve this, the area of the simplex and distances between its vertices must be calculated in the specified metric space. Distance between vertices  $P_i$  and  $P_j$  is defined as:

$$L_{ij}^{\mathcal{M}_s} = \sqrt{(P_i - P_j)^T \overline{\mathcal{M}_s} (P_j - P_i)}. \quad (12)$$

Area of simplices in the specified metric space ( $S_K^{\mathcal{M}_s}$ ) can similarly be calculated using Heron's formula. However, experience has shown that this formula can be quite unstable when the metric varies sharply within an element. This observation has in fact prompted the present research to define a more stable, universal quality measure not based on edge length measures.

In order to apply the same shape measure  $\eta$  also on non-simplices, a simple method has been used. The form factor is calculated on each corner sub-simplex, and the minimum value over the element is used. To ensure that the shape measures for simplices and non-simplices are compatible and can be compared, the value of  $\eta$  on a sub-simplex is multiplied by a scaling factor, which makes the measure  $\eta$  of a perfect corner sub-simplex be equal to unity [30].

#### 5.4.2. RAE2822 case description

In this paper, the case 9 experiment of reference [31] has been chosen. The specific operating conditions used in the wind tunnel are enumerated in Table 1. Those conditions represent what was tested in a wind tunnel, which was bounded by walls. It is well known that these walls affect the flow around the model and hence the

measures taken. In the case of CFD, the infinite pressure far field is simulated and the wall effects are omitted. So, in order for the simulation results to match the experimental data, corrections to the operating conditions must be applied.

Table 1: RAE2822 case 9 experimental operating conditions

$\alpha$	$3.19^\circ$
$M_\infty$	0.730
$Re$	$6.5 \times 10^6$

In [32], it is said that the angle of attack for CFD must be chosen so that the lift coefficient obtained with a good mesh is the same as the one obtained during experimental testing. In the case studied here, the lift coefficient obtained in [31] for that specific configuration and conditions is 0.803. After a study of the simulations at multiple angles of attack, it was determined that an angle of attack of  $3.04^\circ$  was to be used so that the lift coefficient computed through CFD be the same as the one obtained in the wind tunnel at  $3.19^\circ$ . The choice of angle is dependant on the specific solver and models used. Here, the angle of attack study and the adaptation study were done using the Fluent coupled solver with the Spalart-Allmaras one equation turbulence model.

The initial mesh for this case is shown in Figure 8. It is a hybrid mesh composed of quadrilaterals near wall boundaries and triangles inside the domain. The domain is at least 40 cords long with height of 20 cords. Without further adaptation of the mesh, one can already see that the mesh of figure 8 is too coarse for an accurate solution to be computed. The mesh does not possess high enough mesh density for shock and trailing vortices to be captured. It will be shown that using *a posteriori* adaptation on the solution obtained on this mesh generates accurate results.

#### 5.4.3. RAE2822 results and analysis

The initial solution for mach number obtained on the mesh shown in Figure 8 is presented in Figure 9. One can observe that the initial coarse mesh did not allow an accurate flow solution to be computed. Particularly in the shock region, where one would expect a drastic change in pressure and velocity along a thin shock line. Here the mach number decreases more slowly than expected, creating iso lines that are not densely packed around the shock. To illustrate this, the pressure coefficient curve can be compared to experimental results, as shown in figure 15. The curve shows a shock that is not correctly placed along the profile with a smaller amplitude than the experimental data, as a result of this coarser mesh.

Once the solution has been computed on this initial mesh, the mesh is adapted using error estimation on the calculated mach number field. The mach number is used,

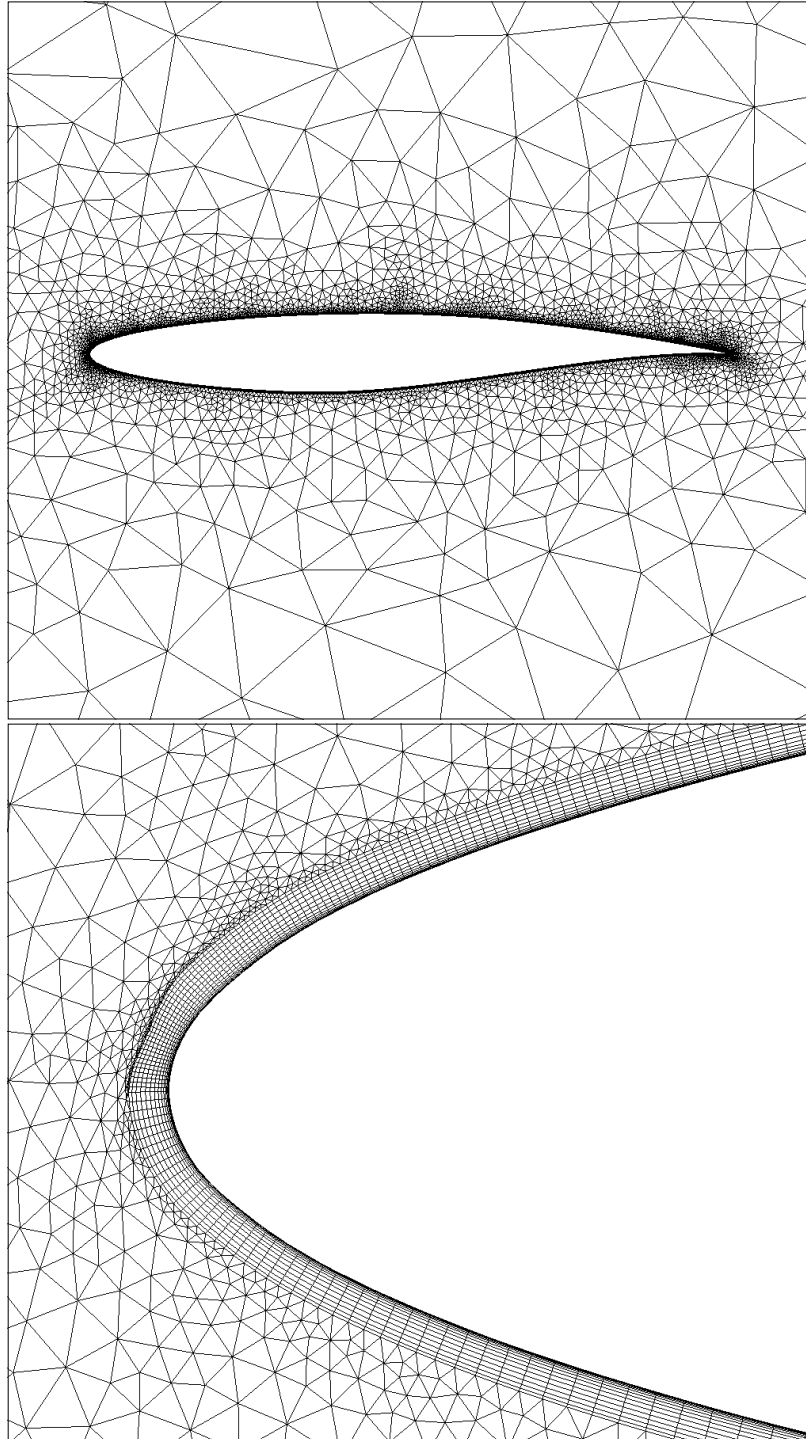


Figure 8: Initial RAE2822 mesh

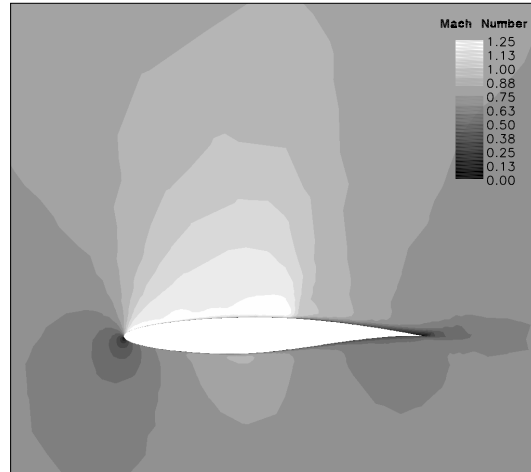


Figure 9: Initial solution RAE2822, mach number

since it is a function of velocity, density and temperature, which are all quantities that vary and characterize transonic flow through specific features. The adaptivity algorithm applied on the RAE2822 uses a combination of mesh refinement, coarsening and edge swapping, in conjunction with non-conformity minimization to adapt the mesh in a sequence of multiple solution-adaptation iterations. Each adaptation step is followed by an interpolation of the previous solution on the new mesh, which is then returned to the solver for a subsequent resolution.

Figures 10 and 11 show the evolution of the non-conformity coefficient compared to the form factor  $\eta$  previously defined, during the tenth global adaptation iteration. It can be seen that both criteria have the same tendency to increase quality as adaptation goes. The discontinuities are caused by topological operations steps that are not based on non-conformity minimization and those occur five times during a global iteration. It is normal to see stagnation, or even some diminution of the form factor as the non-conformity minimization converges since the form factor is not the quantity being optimized through the cost function. But the shape of these curves is undeniable proof that non-conformity minimization at least works in the sense of increasing a general accepted notion of mesh quality defined with a riemannian metric specification. After 10 global iterations of this adaptive process, the final results are shown in figures 12 and 14.

It can be seen that the mesh density has increased drastically in the important regions. Particularly in the shock region, where the mesh clearly defines its position and its anisotropic variations. Adaptation has also increased the accuracy at the front stagnation point and in the trailing edge and wake regions. Figure 13 shows the

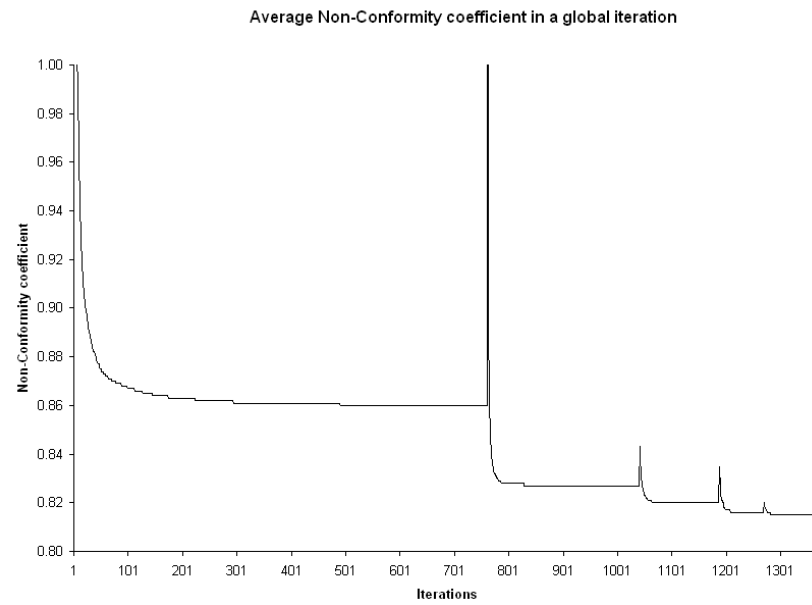


Figure 10: Evolution of the non-conformity during a global adaptative iteration

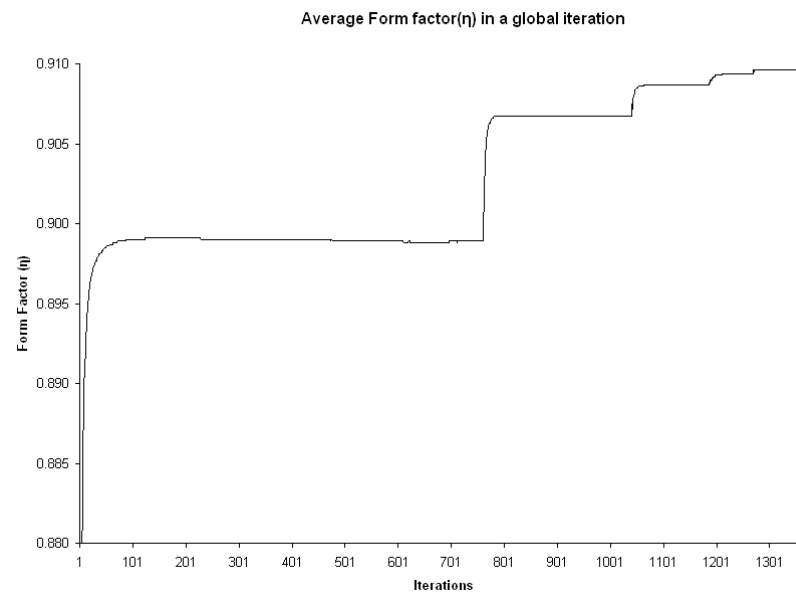


Figure 11: Evolution of the form factor  $\eta$  during a global adaptative iteration

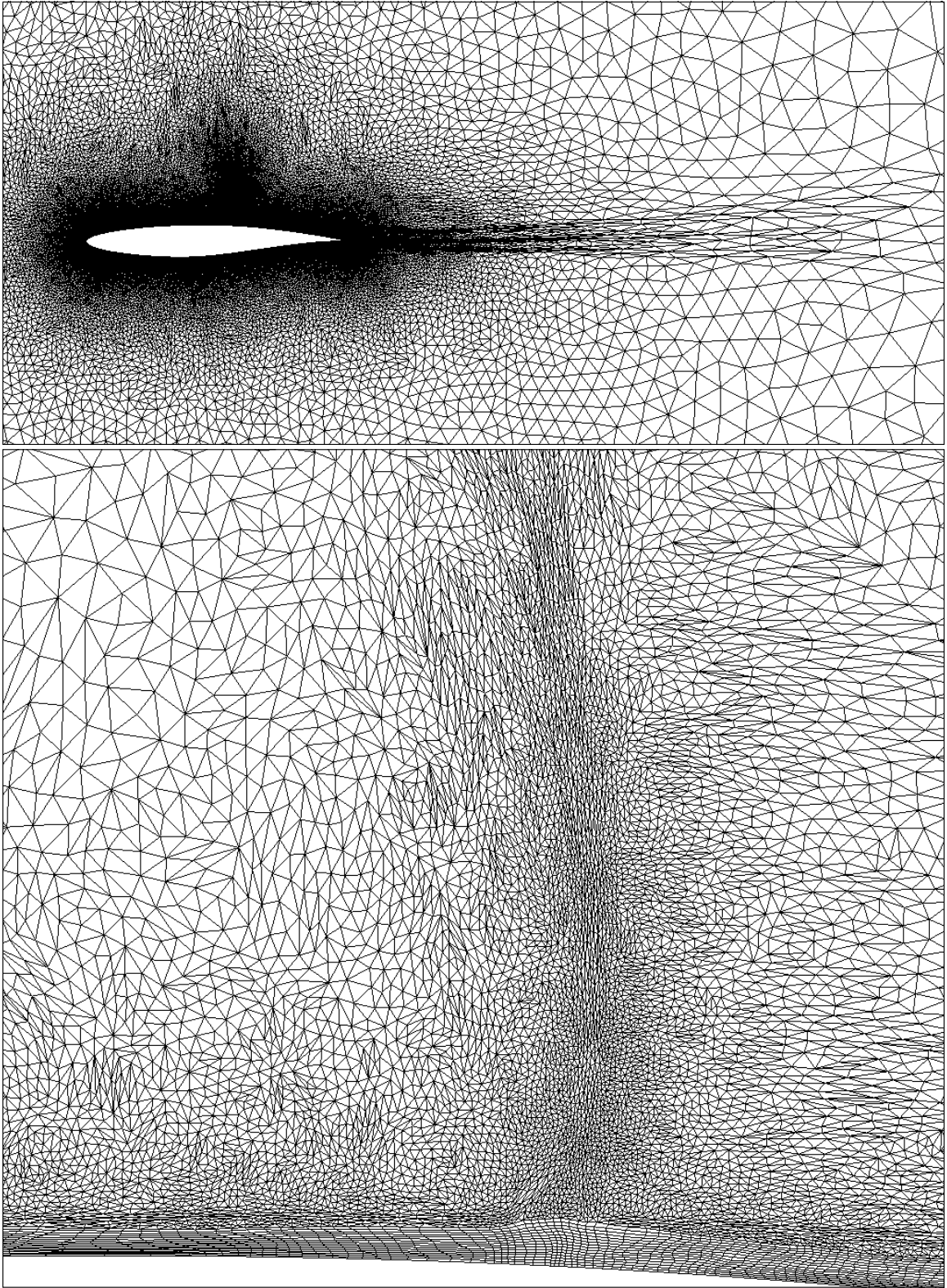


Figure 12: Final RAE2822 mesh, after 10 iterations

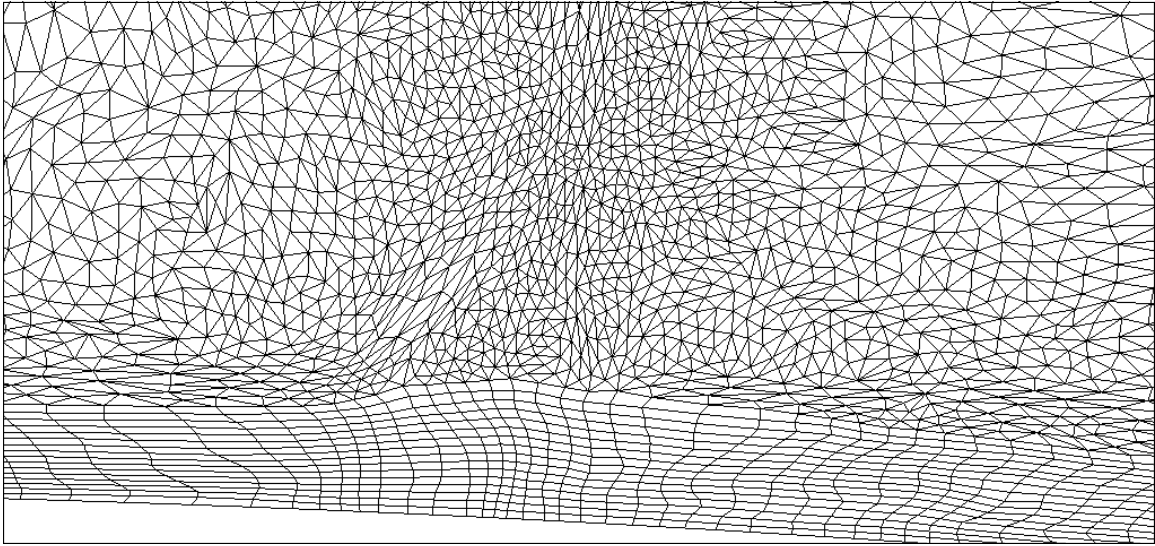


Figure 13: Final RAE2822 mesh, after 10 iterations, orthogonality close to the profile

mesh close to the wing profile right underneath the highly anisotropic shock region. One can notice the natural tendency of non-conformity minimization at preserving orthogonality in the first quadrilateral layer, a feature that will increase the accuracy of the results, mainly for turbulence. With the adapted mesh, the lift coefficient obtained is 0.800, which is very close to the predicted value of 0.803 as opposed to the a value of 0.784 for the initial mesh. Figure 15 shows the pressure coefficient obtained on the profile compared to the experimental values and those of the original mesh. It is evident that adaptation has increased the accuracy of the shock position, but also of the area before the shock on the extrados. The results shown are comparable to those discussed in [32]. The only small difference relates to the amplitude of the shock, which is very hard both to predict numerically and measure accurately.

### 5.5. Smoothing of 3D hybrid meshes

After showing a proof of concept on 2D meshes with the previous examples, it is important to show that the algorithm can be used on 3D meshes containing regions of different types of element with similar results. For this purpose, a test case is used composed of three adjacent cubic regions, one built with tetrahedra, the second one with prisms and the last with hexahedra. This cases adds both the difficulty of a three dimensional mesh and of an hybrid mesh comprising three different types of elements.

Figure 16 shows the initial mesh and geometry used for this example.

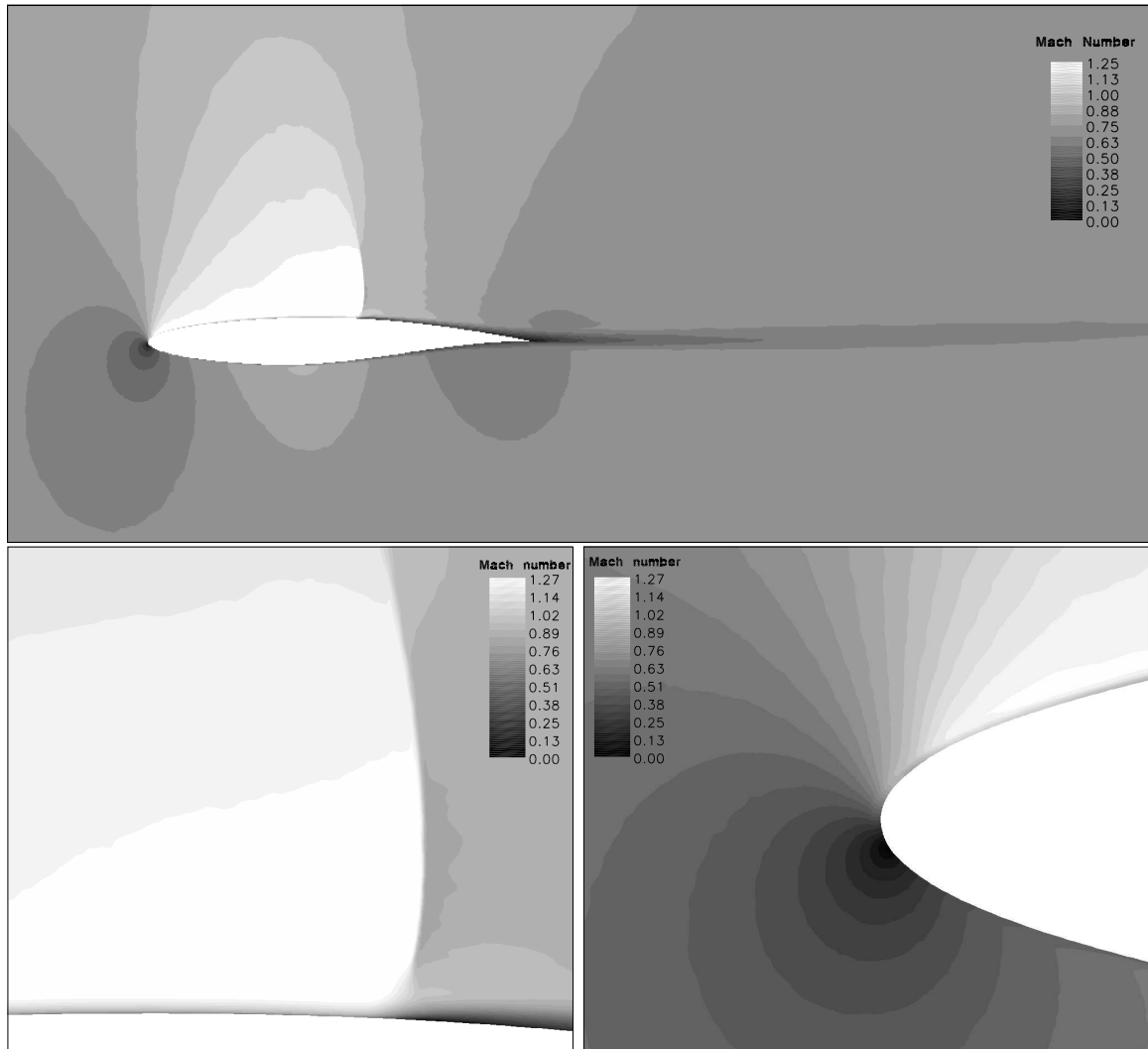


Figure 14: Final solution RAE2822, mach number, after 10 iterations



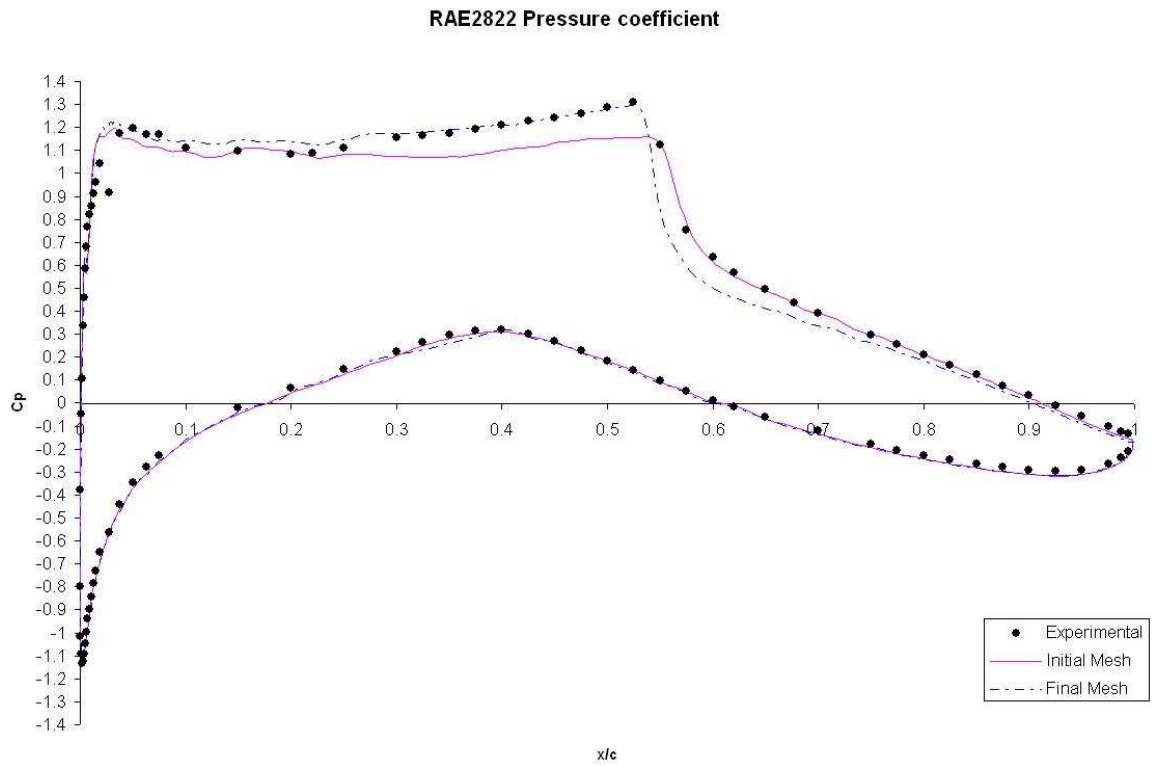


Figure 15: Pressure coefficient on RAE2822 profile,  $M_{\text{inf}} = 0.73$ ,  $\alpha = 3.04^\circ$

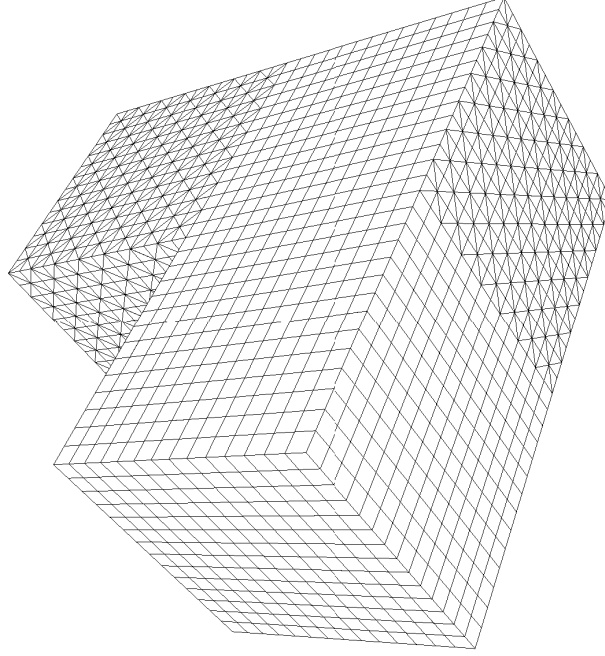


Figure 16: 3D initial hybrid mesh

The mesh is then smoothed using a specified metric constructed from the arctangent test function presented in [33]. The analytical specified metric is derived from the function shown in equation 13, where  $c = 15$  and  $o = 0.25$ .

$$f(x, y, z) = \text{atan}(c((xyz)^3 - o)) \quad (13)$$

For 3D meshes, in order to accelerate the smoothing process, the non-conformity minimization algorithm was implemented in a parallel mesh adaptation framework named *POORT* presented in [34, 35]. The initial mesh presents a non-conformity coefficient of  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 1.71 \times 10^5$  in the previously described metric. The result of the adaptation process using non-conformity minimization is shown in figure 17.

The non-conformity coefficient of the obtained mesh is  $\varepsilon_{\mathcal{T}} = 222$ , a considerable reduction from the initial state. Extremely high non-conformity coefficient values obtained here are the result of the low number of elements in the mesh. The specified metric requires a lot of smaller elements to be satisfied and since only smoothing is used, there is a limit to what can be achieved using only the original number of cells. The non-conformity coefficient can be used to compare meshes that have the same specified metric and it is therefore not a good practice to compare non-conformity values between different cases.

Figure 17 shows vertices highly concentrated around one corner in each zone, as

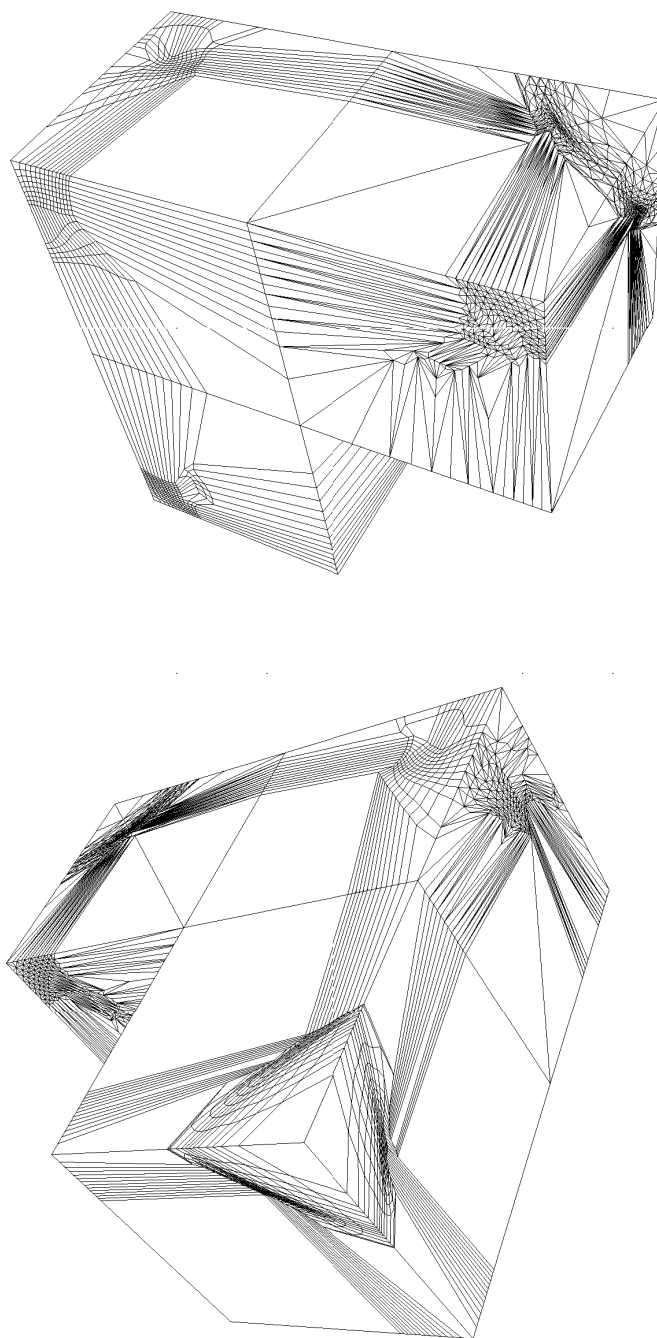


Figure 17: 2 views of the 3D final hybrid mesh

was expected using the arctangent specified metric. One can see that similar result are present with each type of element. But what is important to notice here is the shape and size of the elements at the interfaces between zones. These interfaces are best seen in figure 18, where a cut in the middle of the mesh is displayed.

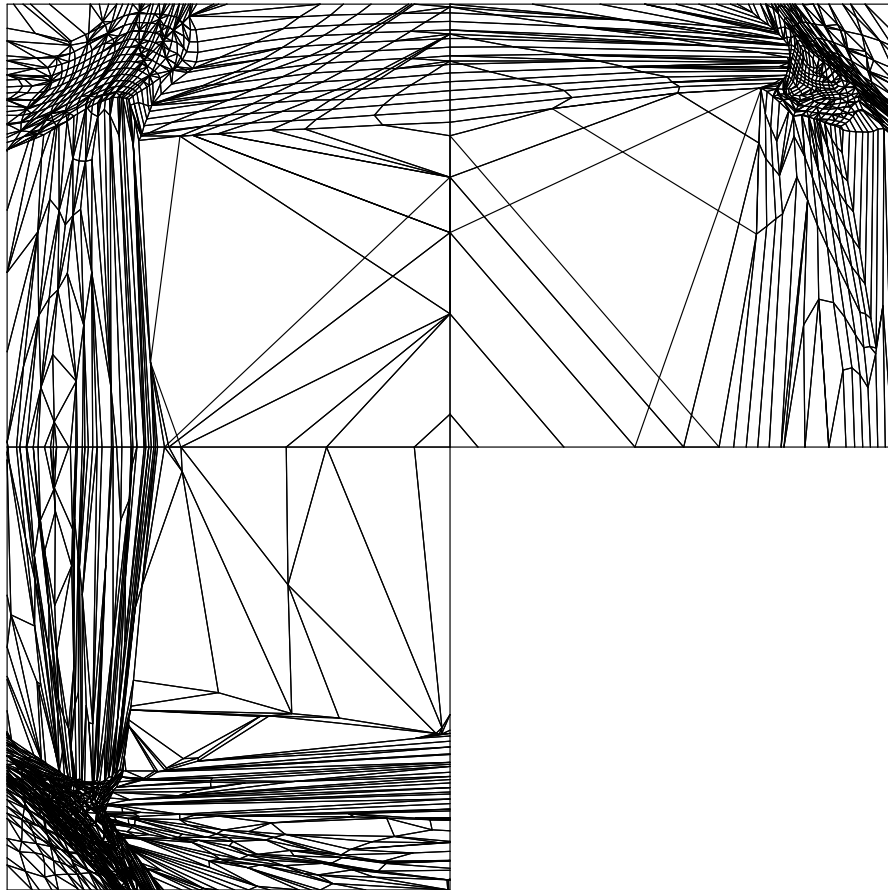


Figure 18: Cut in the final 3D mesh

It can be seen that two neighboring elements of different types globally have the same size and deformation. This means that the position of the vertices on the interface between the two regions is optimized using values of the non-conformity that are similar in both elements for the same deformations. This results in an optimal position that is not influenced by one of the element types in particular, as predicted in 4.2.

## 6. Conclusion

In mesh adaptation for complex flow simulations, it is necessary to have a smoothing method that is able to smooth any type of mesh elements in terms of both size and shape and that allows to locally specify these characteristics in an anisotropic manner. In this paper, a smoothing method based on the minimization of a non-conformity measure has been presented to address this problem. The strong point of this method resides in the definition of a cost function based on metric comparison, metrics that contain in a single matrix entity, information on size, stretching and orientation desired at each specific location. The construction of this single cost function also ensures that the minimization is independent of the type of mesh elements.

Numerical examples have shown that smoothed meshes obtained using the algorithm presented are of high quality and inherently present desired characteristics such as boundary orthogonality and preservation of anisotropic metric features. We have also shown that the presented algorithm is robust and presents excellent continuity characteristics between regions or different element types. Compared to other methods, non conformity minimization does not induce geometric tensions as do length based methods and provides a way to specify shape as well as size.

The optimization algorithm used to prototype the approach, which is based on a brute force approach, is of course not the most elegant way of minimizing a cost function. While most other optimization methods use some type of evaluation of function derivatives to minimize the cost function, and since the cost function based on metric comparison is not easily differentiable, the introduction of a better optimization algorithm, although essential in practice, is left as future work. This will also make possible the testing and validation of the algorithm on real industrial cases, which is the objective of this work.

## Acknowledgments

The authors would like to thank the National Science and Engineering Research Council of Canada (NSERC) for its support of this research, under project CRDPJ 323749-05. They would also like to acknowledge the use of VU (<http://www.invisu.ca>), the package used to draw all the images.

## References

- [1] S. R. Mathur, N. K. Madavan, Solution-adaptive structured-unstructured grid method for unsteady turbomachinery analysis, Part I: Methodology, *Journal of Propulsion and Power* 10 (1994) 576–584.

- [2] M. K. Patel, K. A. Pericleous, S. Baldwin, The development of a structured mesh grid adaption technique for resolving shock discontinuities in upwind Navier-Stokes codes, *International Journal for Numerical Methods for Heat and Fluid Flow* 20 (1995) 1179–1197.
- [3] Y. Sirois, J. Dompierre, M.-G. Vallet, F. Guibault, Mesh smoothing based on Riemannian metric non-conformity minimization, in: 15th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, Birmingham, AL, 2006.
- [4] D. Aït-Ali-Yahia, G. Baruzzi, W. G. Habashi, M. Fortin, J. Dompierre, M.-G. Vallet, Anisotropic mesh adaptation: Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part II: Structured grids, *International Journal for Numerical Methods for Heat and Fluid Flow* 39 (8) (2002) 657–673.
- [5] A. Tam, D. Aït-Ali-Yahia, M. P. Robichaud, M. Moore, V. Kozel, W. G. Habashi, Anisotropic mesh adaptation for 3D flows on structured and unstructured grids, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 189 (2000) 1205–1230.
- [6] F. Bossen, Anisotropic mesh generation with particles, Master's thesis, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, cMU-CS-96-134 (May 1996).
- [7] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, C. W. Mastin, *Numerical Grid Generation, Foundations and Applications*, North-Holland, New York, 1985.
- [8] P. R. Eiseman, Alternating direction adaptive grid generation, *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal* (1983) 1937.
- [9] S. P. Spekreijse, Elliptic grid generation based on Laplace equations and algebraic transformations, *Journal of Computational Physics* 118 (1) (1995) 38–61.
- [10] B. K. Soni, R. Koomullil, D. S. Thompson, H. Thornburg, Solution adaptive grid strategies based on point redistribution, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 189 (2000) 1183–1204.
- [11] P. R. Eiseman, Adaptive grid generation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 64(1–3) (1987) 321–376.
- [12] S. McRae, *r*-refinement grid adaptation algorithms and issues, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 189 (2000) 1161–1182.
- [13] L. A. Freitag, C. Ollivier-Gooch, Tetrahedral mesh improvement using swapping and smoothing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 40 (1997) 3979–4002.

- [14] L. A. Freitag, On combining Laplacian and optimization-based mesh smoothing techniques, *AMD Trends in Unstructured Mesh Generation*, ASME 220 (1997) 37–43.
- [15] A. Oddy, J. Goldak, M. McDill, M. Bibby, A distortion metric for isoparametric finite elements, *Transactions of the CSME* 12 (4) (1988) 213–218.
- [16] S. A. Cannan, J. R. Tristano, M. L. Staten, An approach to combined Laplacian and optimization-based smoothing for triangular, quadrilateral, and quadrilateral dominant meshes, in: *7th International Meshing Roundtable*, Detroit, Michigan, USA, 1998, pp. 479–494.
- [17] P. M. Knupp, Achieving finite element mesh quality via optimization of the Jacobian matrix norm and associated quantities. Part II – a framework for volume mesh optimization and the condition number of the Jacobian matrix, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 48 (2000) 1165–1185.
- [18] M.-G. Vallet, Génération de maillages éléments finis anisotropes et adaptatifs, Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, France (1992).
- [19] P.-L. George, H. Borouchaki, *Delaunay Triangulation and Meshing. Applications to Finite Elements*, Hermès, Paris, 1998.
- [20] P. J. Frey, P.-L. George, *Mesh Generation. Application to Finite Elements*, Hermès, Paris, 2000.
- [21] E. Joubarne, F. Guibault, Anisotropic mesh adaptation for vortex capture, *Mathematics and Computers in Simulation*.
- [22] M.-G. Vallet, C.-M. Manole, J. Dompierre, S. Dufour, F. Guibault, Numerical comparison of some Hessian recovery techniques, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 72 (8) (2007) 987–1007.
- [23] P. Labbé, J. Dompierre, M.-G. Vallet, F. Guibault, J.-Y. Trépanier, A universal measure of the conformity of a mesh with respect to an anisotropic metric field, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 61 (2004) 2675–2695.
- [24] C. L. Bottasso, Anisotropic mesh adaptation by metric-driven optimization, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 60 (3) (2004) 597–639.
- [25] Y. Sirois, J. Dompierre, M.-G. Vallet, F. Guibault, Measuring the conformity of non-simplicial elements to an anisotropic metric field, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 64 (14) (2005) 1944–1958.

- [26] Y. Sirois, J. Dompierre, M.-G. Vallet, P. Labbé, F. Guibault, Progress on vertex relocation schemes for structured grids in a metric space, in: 8th International Conference on Numerical Grid Generation, Honolulu, USA, 2002, pp. 389–398.
- [27] É. Seveno, Génération automatique de maillages tridimensionnels isotropes par une méthode frontale, Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI (Mar. 1998).
- [28] Y. Sirois, J. Dompierre, M.-G. Vallet, F. Guibault, Using a Riemannian metric as a control function for generalized elliptic smoothing, in: Proceedings of the 9th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations, San Jose, CA, 2005.
- [29] J. Dompierre, M.-G. Vallet, P. Labbé, F. Guibault, An analysis of simplex shape measures for anisotropic meshes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194 (48–49) (2005) 4895–4914.
- [30] J. Dompierre, M.-G. Vallet, P. Labbé, F. Guibault, R. Camarero, Indices de qualité d’un maillage, Tech. Rep. R2000-81, CERCA (2000).
- [31] AGARD-AR-138, Experimental data base for computer program assessment, Tech. rep., North Atlantic Treaty Organization (1979).
- [32] L. Martinelli, A. Jameson, Validation of a multigrid method for the reynolds averaged equations, in: AIAA 26<sup>th</sup> Aerospace Sciences Meeting, Reno, USA, 1988, aIAA Paper 88–0414.
- [33] P.-L. George, H. Borouchaki, Delaunay Triangulation and Meshing. Applications to Finite Elements, Hermes, Paris, 1998.
- [34] S. Laflamme, J. Dompierre, F. Guibault, R. Roy, Issues in the parallelization of the OORT remeshing toolkit using MPI-based communications, in: Proceedings of CCECE03, the Canadian Conference on Electrical and Computer Engineering, Montréal, 2003, pp. 1703–1706.
- [35] S. Laflamme, Conception et validation d’algorithmes parallèles pour l’adaptation de maillage, Master’s thesis, École Polytechnique de Montréal (Jan. 2004).



## Annexe C – Hybrid mesh adaptation applied to industrial numerical combustion

Y. Sirois<sup>1\*</sup>, F. McKenty<sup>2</sup>, L. Gravel<sup>2</sup>, F. Guibault<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ecole Polytechnique de Montreal, C.P. 6079 succ. Centre-Ville, Montreal, Canada, H3C 3A7*

<sup>2</sup>*BMA, 144 Barr, Montreal, Canada, H4T 1Y4*

### SUMMARY

This paper presents an anisotropic mesh adaptation method applied to industrial combustion problems. The method is based on a measure of the distance between two Riemannian metrics called metric non-conformity. This measure, which can be used to build a cost function to adapt meshes comprising several types of mesh elements, provides the basis for a generic mesh adaptation approach applicable to various types of physical problems governed by partial differential equations. The approach is shown to be applicable to industrial combustion problems, through the specification of a target metric computed as the intersection of several Hessian matrices reconstructed from the main variables of the governing equations. Numerical results show that the approach is cost effective in that it can drastically improve the prediction of temperature and species distributions in the flame region of a combustor while reducing computational cost. The results can be used as a basis for pollutant prediction models. Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

Received ...

KEY WORDS: Mesh Adaptation; Riemannian Metric; Numerical combustion; Hybrid meshes

### 1. INTRODUCTION

Nowadays, pollutant emissions have become a major concern to society. In answer to these concerns, governments are imposing greater restrictions on emissions thereby forcing the boiler industry to develop new designs and retrofit aging equipment in order to meet the new emission standards. In recent years, computational fluid dynamics (CFD) has become an indispensable tool in the design process of industrial combustion equipment such as utility boilers, see for instance [1, 2, 3].

---

\*Correspondence to: Ecole Polytechnique de Montreal, C.P. 6079 succ. Centre-Ville, Montreal, Canada, H3C 3A7.  
E-mail: yannick.sirois@polymtl.ca

One of the main concerns is the prediction of thermal  $NO_x$  levels. Thermal  $NO_x$  formation occurs in regions where the temperature is high enough to break the triple bond between the two nitrogen atoms of the local  $N_2$  molecules. The models used for thermal  $NO_x$  prediction are based on the well known Zeldovich mechanism [4] and are very sensitive to local temperature variations. As discussed in [5, 6], correct mesh resolution is needed to accurately capture the peak temperatures generated in the extremely thin flame front region of the flow field. In the case of  $CO$ , mesh resolution can also be a concern. Kong [5] has shown that having cells too large close to non-adiabatic low temperature walls will diffuse the cooler region too far inside the combustor and quench the  $CO$  oxydation that might occur close to the wall, thereby generating error in the final  $CO$  prediction.

In the specific domain of industrial boilers, carrying out accurate numerical simulations remains a great challenge. The size of the simulated boiler furnaces can vary from a few meters cubed with a single burner to a few thousand meters cubed with 16 or 20 burners, capable of generating more than 50MW each. In those burners, natural gas is injected at sonic velocity through small injectors and the chemical reaction occurs at the molecular level. Because of the shear difference in scale between the furnace volume and the chemical and physical flow components, it is practically impossible to mesh the entire domain with isotropic single size elements at a satisfactory level. In fact, this would lead to tens of millions, even hundreds of millions of elements, and numerical solutions on such large meshes could not be obtained in a reasonable time frame on a small scale HPC cluster.

Using specific a priori mesh concentration zones during mesh generation also presents a problem as for example in industrial furnaces with impinging flames. It is extremely hard to predict the size and position of flame fronts, where the highest gradients are found and the majority of the mesh cells should be concentrated. The implementation of automatic mesh optimization through *a posteriori* mesh adaptation in the context presented here, would greatly reduce both human and computational costs of such analyses and therefore be extremely useful to the process of optimizing industrial combustion equipment.

To increase accuracy using mesh adaptation methods, Li [7] mentions that there are currently three general approaches that can be used on unstructured meshes: 1) complete remeshing of the domain at each iteration of the solution-adaptation process, 2) mesh refinement through local element subdivision, and 3) local mesh modification procedures. Even if complete remeshing is known to generate accurate anisotropic meshes [8], the cost of automatically remeshing an entire industrial boiler several times during the simulation process would greatly increase the overall simulation cost, especially in the later stages of the adaptation process when both solution and mesh are almost converged and the mesh requires only very small changes.

Currently, the preferred approach in the simulation of reacting flow seems to be mesh refinement through local element subdivision, see [6, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16]. All of these methods use isotropic refinement and coarsening operations on quadrilateral meshes in 2D and hexahedral meshes in 3D. The methods mainly differ in the definition of the criteria which they use to decide where

to locally modify the mesh. Haldenwang [6] employs a heuristic approach to track a flame front in a transient simulation. The criterion used to localize the flame front depends on its known position at the previous time step, and ultimately upon its initial position. This approach is therefore inapplicable to stationary problems where finding the correct position of the flame front, without prior knowledge of its position, is part of the objective. Bennett [9, 10, 11] has developed a method that uses a series of multi-level grids locally refined and unrefined where feature detection is controlled through weight functions based on the gradient of a flow variable. Groth et al. [12, 13, 14, 15] also devised methods based on gradients; but instead of using smooth weight functions that vary over the whole domain so that operations are done everywhere, the mesh is simply refined or coarsened when the gradient is higher or lower than a specific threshold value. Gao, [13], also mentions that gradient based methods are not optimal as they do not directly minimize the error produced by low mesh resolution, even if, by experience, they generally produce acceptable results. Error minimization techniques have been used in conjunction with element subdivision yielding good results by Rendleman et al. [16]. But in general, while they are fast, isotropic methods have a tendency to refine the mesh too much close to anisotropic flow features, which induces larger computational costs during the solution process compared to global remeshing techniques. The third approach, local mesh modification operations, which combine local topological and geometrical operations [17, 7, 18] shows the most promise because it is fast and allows for complete control over both the sizes and shapes of elements.

For structured grids, one must consider vertex relocation methods (r-refinement) such as the one used in [19]. Yuan uses anisotropic mesh smoothing in combustion to accurately resolve the flame front with a method based on Thompson's Poisson elliptic mesh generation technique [20]. It is widely known that the Poisson control functions are hard to implement as they have a strong tendency to fold meshes. Local refinement operations on structured grids are very hard to implement, as grid lines need to propagate along complete parametric mesh lines, which result in adding more elements than really needed, thereby artificially increasing computational costs.

In this paper, we present a new adaptation procedure that aims, in the context of industrial combustion numerical simulation, at increasing accuracy of flow field variables such as temperature and species concentrations that are used in pollutant prediction models, while keeping the number of elements to a minimum. It is specifically designed to be used on hybrid meshes where structured mesh layers are used at the boundaries in conjunction with the  $k$ - $\epsilon$  turbulence model, which requires elements normal to the walls.

The approach presented here uses a metric tensor constructed from an interpolation error estimator as a specification map for the mesh to be obtained. The estimator uses a local reconstruction method, see [21], applied to the calculated fields of the main primitive variables of the problem. In order to get accurate mesh resolution on all types of flow features, velocity components, temperature and mixture fraction are all included in the construction of the control metric. This choice of variables

allow flow dynamics effects, reaction energy output and species changes to all be captured. The metric tensors of each variable are combined using a metric intersection algorithm [22] in order to obtain a single tensor field representing the target map for adaptation. Using local mesh modification operations, the method attempts to minimize a distance norm between the specified metric and the current metric of each element. This norm, called the non-conformity coefficient [23, 24, 25], allows the use of the same criterion on many types of elements. It further results and to in a converging adaptation algorithm on hybrid meshes. To the authors' knowledge, this study constitutes the first application of anisotropic mesh adaptation on hybrid meshes to compute a complete combustion problem in an industrially relevant configuration.

The next section of the paper discusses numerical combustion, its use in the design of industrial combustion equipment and how mesh adaptation can help increase solution accuracy. Then, a discussion on how mesh control is obtained using Riemannian metrics, followed by a presentation of the non-conformity minimization are presented. A numerical example is discussed, followed by concluding remarks.

## 2. NUMERICAL REACTING FLOW SOLUTION

In this paper, emphasis is placed on the use of CFD as a tool for the design of combustion equipment, mainly for industrial boilers. From that standpoint, the choice of models and tools is based on how results, considered accurate enough, can be obtained within strict time and computational power constraints. For the application presented here, CD-Adapco's Star-CD solver was used. It implements the standard transport equations using a Favre decomposition for average values of the variables and allowing for turbulence modeling [26]. In the presentation of the equations, the following notations are used:

$\bar{\cdot}$	Average value
$\tilde{\cdot}$	Mass weighted average value
$'$	Fluctuation
$''$	Mass weighted fluctuation

The equations are, for continuity

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

and for momentum

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i, \quad (2)$$

with  $\rho$  the fluid density,  $u_i$  the  $i$ th component of velocity, and where the stress tensor  $\bar{\tau}_{ij}$  is defined as

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu_{\text{eff}} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}). \quad (3)$$

The viscosity term  $\mu_{\text{eff}}$  must be calculated so that

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (4)$$

where  $\mu$  is the laminar viscosity and  $\mu_t$  the turbulent viscosity which depends on the turbulence model selected.

In this study, the standard two equation  $k - \epsilon$  model [27] is used for turbulence modeling. It has been shown that for combustion simulation, better turbulence models are available, such as large eddy simulations (LES), or even direct numerical simulations (DNS), which do not involve turbulence modeling. But these approaches require significantly greater computational power and time and are highly sensitive to mesh resolution, [12, 28]. In the present context, the computational resources required to run such large scale simulations are not available, and the  $k - \epsilon$  model thus appears as a acceptable compromise. In the context of this model, the turbulent viscosity can be written as:

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\epsilon} \quad (5)$$

and the Reynolds stresses  $(\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''})$  become

$$\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''} = -\mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \delta_{ij} k + \frac{2}{3} \bar{\rho} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \quad (6)$$

where  $\delta_{ij}$  is the Kronecker delta.

The values for  $k$  and  $\epsilon$  are computed through the transport equation for the turbulent kinetic energy:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j k) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \bar{\rho} \epsilon \quad (7)$$

where  $P_k$ , the kinetic energy production, is given by:

$$P_k = 2\mu_t d_{ij} d_{ij} \quad (8)$$

with  $d_{ij}$ :

$$d_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (9)$$

and the transport equation for turbulent dissipation rate:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\epsilon) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right)\frac{\partial\epsilon}{\partial x_j} = (C_{\epsilon 1}P_k - C_{\epsilon 2}\bar{\rho}\epsilon)\frac{\epsilon}{k} \quad (10)$$

with the closure coefficients shown in table I.

$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\epsilon$	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$
0.09	1.0	1.22	1.44	1.92

Table I. Closure coefficients for the  $k - \epsilon$  turbulence model

In the case of numerical combustion, it is more appropriate to transport energy in the form of enthalpy instead of the usual formulation based on temperature, since the local changes in species dictate the change in average mixture enthalpy from which temperature is calculated. The enthalpy transport equation is then:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_h}\right)\frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} = \tilde{S}_h, \quad (11)$$

where  $\tilde{h}$  is the enthalpy and  $\tilde{S}_h$  represents the radiative exchange. Local temperature is computed with the local mixture composition and average mixture enthalpy through:

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left( \sum_{i=1}^N \tilde{c}_{P,i} \tilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^N h_{R_i} \tilde{m}_i \quad (12)$$

where  $\tilde{m}_i$  represents the mass fraction of the  $i$ th species and  $h_{R_i}$  its formation enthalpy at reference temperature  $T_0$ . These equations are solved using a finite volume scheme and the SIMPLE algorithm from Patankar [29].

There are many options available for modeling reacting flows. One must choose wisely depending on the application. For the present study, the chemical equilibrium model of McKenty [30] based on [31, 32] has been used. This model is designed for turbulent non-premixed diffusion flames, such as those generally present in large industrial equipment. Basically, the chemical equilibrium model computes the local concentration of species based on the transported mixture fraction by minimizing Gibbs free energy. The mixture fraction [33] is defined as:

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{\zeta} - \tilde{\zeta}_A}{\tilde{\zeta}_F - \tilde{\zeta}_A} \quad (13)$$

where the indices  $A$  and  $F$  represent respectively the conditions in the air and fuel inlets knowing that

$$\tilde{\zeta} = \tilde{m}_{\text{fu}} - \frac{\tilde{m}_{O_2}}{s} \quad (14)$$

with  $s$ , the stoichiometric coefficient of the reaction. The mixture fraction,  $\tilde{f}$ , is then transported using:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f}) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f}\right)\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} = 0 \quad (15)$$

and solved the same way as the other transport equations.

A presumed probability density function (PPDF) [33] approach is used to include the effects of turbulent mixture fraction fluctuations on the species distribution. This is done by solving the transport equation for the variance of the mixture fraction:

$$g = (f - \tilde{f})^2. \quad (16)$$

The values of  $f$  and  $g$  are used to determine the form of the PPDF (i.e. Beta, Delta or Dirac probability density functions). The species concentrations with respect to the mixture fraction are calculated and tabulated in advance using the chemical equilibrium model. This makes the model very fast as all species concentrations are determined using the lookup table with local mixture fraction and pre-integrated tables for the PPDFs. The model also makes it easy to use different fuel compositions, or even to use multiple fuels from one simulation to the other, when compared to finite rate models that depend on a fixed set of reactions that must be determined for each fuel.

In the type of problem studied here, large geometries, low computing power and  $NO_x$  prediction, it is assumed from the beginning that cells are too large to accurately capture mixture fraction fluctuations at the flame front, where the high temperatures occur and thermal  $NO_x$  is generated. This can lead to large over or under predictions of the  $NO_x$  production rate. Therefore, in order to properly address the adaptation algorithm's capability to identify and increase local mesh quality in regions of sharp temperature gradients in industrial size geometries, it became necessary to prevent the smoothing of temperatures as much as possible in the test case. For this reason, no PPDF averaging was used in the present computations.

### 3. MESH CONTROL

In order to adapt both the initial and subsequent intermediate meshes, a versatile mesh control method must be selected. It has been shown in the works of [34] for example, that anisotropic cells, correctly aligned with flow features can generate better results than isotropic cells even if their aspect ratio is high. In reacting flows, regions of high gradients are present in the flame front.

The flame front is defined as a flow region where most of the fuel oxydation occurs in a highly exothermic manner. For most types of natural gas fuel combustion, local temperatures can change from ambient temperature to above  $2000K$  in a very thin layer where the reaction occurs. Also, as discussed in section 1, using anisotropic adaptation methods will result in fewer degrees of freedom for a given solution accuracy and therefore in lower computational costs. For these reasons, in the present context, the capacity to support anisotropy constitutes a primary requirement of the selected mesh control method.

### 3.1. The Riemannian Metric

One such mesh control technique which naturally supports anisotropy is based on the concept of a Riemannian metric. This approach to specifying target mesh properties has been first introduced in [35]. Such works as [36, 37] have shown that a Riemannian metric allows for complete control of mesh characteristics through the use of a single tensor field defined over the whole domain.

A metric tensor field is defined as a series of symmetric positive definite tensors stored at each vertex of a background mesh, which is typically linearly interpolated over the elements. At each node, the tensor can be diagonalized and written as:

$$\mathcal{M} = \mathcal{R}^T \Lambda \mathcal{R} \quad (17)$$

where  $\Lambda$  is a diagonal matrix, where the main diagonal is made up of the eigenvalues of the original metric tensor while  $\mathcal{R}$  is a rotation matrix composed of the eigenvectors associated with each eigenvalue. Essentially, the metric redefines the notion of distance in a transformed space instead of in the Euclidean space. The distance between two points  $A$  and  $B$  can be calculated using:

$$d_{AB} = \sqrt{\vec{AB}^T \mathcal{M} \vec{AB}}. \quad (18)$$

When the metric is the identity matrix, one finds the Euclidean notion of distance.

A Riemannian metric allows the local properties of an element to be described through its decomposition shown in equation 17. The lengths of the elements in each direction are obtained through the eigenvalues such that:

$$h_i = \frac{1}{\lambda_i^2} \quad (19)$$

where  $h_i$  is the length measured in the direction of the eigenvector associated with the eigenvalue  $\lambda_i$ . Stretching is then defined as the ratio of the maximum and minimum directional lengths.

Two different kinds of metrics are used throughout this paper, the specified and the current metric. The specified metric is used to describe the desired local properties of the mesh. For mesh adaptation, the specified Riemannian metric is constructed so that the desired simplices be unit equilateral



triangles or tetrahedra when transformed into the metric space. Special considerations related to its construction are presented in section 3.2. Furthermore, each simplex element in geometric space may be transformed into a reference unit equilateral element through a linear transformation  $J$ . This transformation can also be expressed as the current metric tensor of element  $K$ :

$$\mathcal{M}_K = J^T J. \quad (20)$$

A simplex element is said to be of perfect shape and size when its current metric  $\mathcal{M}_K$  is equal to the local specified metric  $\mathcal{M}_s$  such that:

$$\mathcal{M}_K = \mathcal{M}_s \quad (21)$$

This concept is called metric conformity and was originally described in [23, 38].

### 3.2. Specified Metric Construction

The specified metric field can be constructed from many sources. It may desired, for example, to adapt the mesh to certain geometric features and use curvature information to build the metric. A metric can also be constructed using analytical functions if an *a priori* knowledge of the exact solution is available. In the present context, the aim of adaptation consists in reducing interpolation error caused by the resolution of the mesh on an unknown solution. Throughout the years, many attempts to evaluate and control the effect of discretization error on the solution have been presented and can be divided in three categories [39]: 1) methods based on the reconstruction of the residual error of the problem's primitive variables, 2) methods based on the resolution of a dual problem aimed at estimating the effects of the mesh on a functional specific to the problem being studied and 3) methods based on interpolation error estimation.

For the purpose of this study, we have decided to use an interpolation error estimation method as they are completely independent of the PDEs being solved, compared to reconstruction of the residual error methods, and they do not require a great deal of computational power, as the solution of dual problem methods do. They only require the input of a scalar field taken from a solution variable or a function of solution variables.

Vallet [35] has shown that for a piecewise linear numerical solution, the error between the linearly interpolated solution and the exact solution is bounded by the second order derivatives of the solution variables. On a piecewise linear solution, the Hessian matrix, containing the second order derivatives, must therefore be estimated. A method of quadratic fitting is used to recover the second order derivatives of the chosen scalar field, because it showed the best results in a study of multiple methods presented in [21]. The matrix obtained is not yet a Riemannian metric, since it is not necessarily positive definite. The matrix is therefore diagonalized into equation 17. The eigenvalues

of  $\Lambda$  are then forced positive such that

$$\Lambda = \begin{pmatrix} |\lambda_1| & 0 & 0 \\ 0 & |\lambda_2| & 0 \\ 0 & 0 & |\lambda_3| \end{pmatrix}. \quad (22)$$

From that point on, the result of equation 17 on the modified  $\Lambda$  matrix is a Riemannian metric  $\mathcal{M}_s$  that can be used to locally control the size and shape of mesh elements.

### 3.3. Specified Metric Treatments

Directly using this newly defined metric for mesh adaptation can yield unintended results. The metric is defined strictly based on estimation of the interpolation error, which is purely mathematical and needs to be bounded so that elements created may be not too large or too small. Bounding is then performed so that

$$\lambda_i = \min \left( \max \left( \lambda_i, \frac{1}{h_{max}^2} \right), \frac{1}{h_{min}^2} \right) \quad (23)$$

where  $h_{max}$  and  $h_{min}$  are chosen depending on the application and the geometry of the domain and  $h_i$  and  $\lambda_i$  are related through equation 19.

The metric is also smoothed in order to reduce the variations of desired size and orientation between two adjacent nodes. In the present study, smoothing according the size and direction is used, following Li et al. [40]. Finally, as a last treatment, Joubarne [39] also implemented a scaling treatment on the metric which allows the user to approximately control the number of elements resulting from the adaption using a specified metric.

### 3.4. Metric intersection

In reacting flow simulations, no single variable can be considered as being most representative of the flow features and of where the largest interpolation error is generated. In that case, many scalar fields and their corresponding Riemannian metrics can and need to be considered in the process of adaptation. Since adaptation is controlled through a single specification map provided as a single Riemannian metric, one must combine metrics from different origins into a single entity. McKenzie [22] proposes an intersection algorithm for metrics using their representation as ellipses or ellipsoids. The goal of intersection is to find the largest area ellipse in the geometric intersection of both metrics' associated ellipses. The result of the intersection of both metrics is a new metric that will generally result in an increase in the number of elements generated, but metric scaling can be applied to the resulting metric. A direct implementation of this algorithm is used here.

### 3.5. Choice of adaptation variables

The choice of variables to be used to control adaptation cannot be taken lightly. The more complex a numerical model is, the more difficult the choice becomes. This choice must be made so that the scalar field selected represents most of the features inside the domain. For the case of reacting flows, one must take into account that there is no such unique variable or function of a unique variable that correctly represents what is happening inside the domain. Brais [41] and later Berzins [42] have both proposed that a precise combination of variables is appropriate for adapting meshes on a reacting flow solution. This combination comprises variables of momentum, temperature and concentration of each chemical species. Momentum  $(\rho u, \rho v)$  will allow capturing viscous flow related effects such as boundary layer, recirculations, stagnation and reattachment points. Temperature will mostly help capture the flame front, where most of the energy is liberated in a layer as the reaction occurs. Each species creation or destruction must also be taken into account as not all of the reactions happen in the flame front. This exercise can become very complex but our choice of a combustion model can greatly reduce the cost of the operation. In the previous section, it was discussed that with the use of the chemical equilibrium model without PDF averaging, all species concentrations are a direct function of the mixture fraction  $f$ . The mixture fraction is therefore the only variable needed to represent the local changes in species concentrations. The specified metric is therefore calculated as the intersection of the metrics computed from each variable.

$$\mathcal{M}_s = (\mathcal{M}_{\rho u} \cap \mathcal{M}_{\rho v}) \cap (\mathcal{M}_T \cap \mathcal{M}_f) \quad (24)$$

From experience, Bélanger [43] has shown that the intersection operation on Riemannian metric tensors is not commutative, contrary to what was believed by McKenzie [22]. Bélanger shows that better results are obtained with adaptation when components of a vector field are intersected before being intersected with the metrics of other quantities. Here, we show that the two velocity components, through the momentum variables, are intersected first and then intersected with the result of the intersection of temperature and the mixture fraction.

## 4. HYBRID MESH ADAPTATION

This section describes the mesh adaptation process. First, a definition is provided of how the quality of an element is determined, compared to its specified metric. Next, a discussion follows on how this measure is optimized within the *ORT* mesh adaptation framework, which is used in this study.

*COORT* is an object oriented remeshing toolkit first developed at CERCA and now at Polytechnique in the MAGNU group<sup>†</sup>.

#### 4.1. Non-Conformity to a Riemannian Metric

In the previous section, it was stated that an element is considered perfect in size and shape when its current metric  $\mathcal{M}_K$ , which transforms it into a specific reference element, is equal to the locally specified metric. Therefore, a whole mesh is of maximum quality when all its elements satisfy equality 21. This provides the grounds to use the distance between the current and specified metrics over an element as the basis for our mesh adaptation process.

*4.1.1. Non-Conformity Coefficient* A method to measure the distance between the current metric of an element and the specified metric will first be introduced. From equation 21, a residual equation can be written:

$$T_{nc} = \mathcal{M}_s \mathcal{M}_K^{-1} + \mathcal{M}_K \mathcal{M}_s^{-1} - 2I \quad (25)$$

where  $T_{nc}$  is the resulting non-conformity tensor and  $I$  the identity tensor. A norm is then taken on the resulting tensor to express the distance between the two original tensors in the form of a single number. Here a Frobenius norm is taken on  $T_{nc}$  to obtain  $\varepsilon_K$ , the non-conformity coefficient of element  $K$ .

$$\varepsilon_K = ||T_{nc}|| = \sqrt{\text{tr}(T_{nc}^T T_{nc})}. \quad (26)$$

A global value of the non-conformity coefficient for a mesh can be defined as the average value of the non-conformity coefficient over all elements

$$\varepsilon_{\mathcal{T}} = \frac{1}{n} \sum_i^n \varepsilon_{K_i}. \quad (27)$$

*4.1.2. Simplex Non-Conformity* In order to apply equation 25, tensor values for the actual and specified metrics must be computed over the elements. In the case of the specified metric  $\mathcal{M}_s$ , a piecewise linear tensor is defined at each vertex. Each component of the tensor over the element's surface or volume is integrated to obtain the average tensor  $\bar{\mathcal{M}}_s$ . Notice that the same process applies for both simplices and non-simplices and will not be repeated in the following section.

The current metric  $\mathcal{M}_K$ , as discussed above, defines the transformation between the actual element in Euclidean space and its reference state. For mesh adaptation purposes, this state is chosen to be the unit equilateral triangle in two dimensions and the unit tetrahedron in three dimensions. The metric of the transformation can be defined according to Eq. 20.  $\mathcal{J}$  is the Jacobian matrix of the

<sup>†</sup><http://www.magnu.polymtl.ca>

transformation. In the case of linear simplices, the Jacobian matrix is constant over the area or volume of each element. It is therefore computed once over each element.

*4.1.3. Non-simplex Non-Conformity* As presented in [24], the reference element for non-simplices is a generalization of the reference simplex. It is always the unit element of what is generally accepted as the perfect shape for that non-simplicial element. In two dimensions, the reference quadrilateral becomes the unit square. In three dimensions, the unit hexahedron with all right angles, and the unit prism with equilateral triangular bases and right angles along the quadrilateral faces are used as reference elements. However, computing the current elementary metric for non-simplices is more complex than for simplices. In fact, the Jacobian matrix of any transformation is not constant on a non-simplex and [23] proposed that the averaged tensor  $\bar{\mathcal{M}}_K$  should be the result of the integration of  $\mathcal{M}_K$  on the element. However, it has been shown in [24] that integration of the actual metric on non-simplices can lead to undetected element degeneracies. An alternative way was proposed through the calculation of the current metric of all corner sub-simplices. Each sub-simplex uses a transformation to a reference element compatible with the reference of the non-simplex element it is a part of. For example, the reference corner sub-triangle of a quadrilateral is the corner of the reference unit square. This sub-triangle is the right angle triangle with both sides of the right angle of unit length. It has been shown that using the sub-simplices method allows the detection of degenerate elements and therefore

#### 4.2. Mesh adaptation procedure

Now that a quality criterion has been defined, a mesh optimization method using that criterion as an objective function must be defined. The procedure presented here is part of the family of mesh adaptation methods that use local operations to improve the mesh as it is both fast and allows for satisfaction of the metric criterion by optimizing both size and shape of elements. The general procedure for mesh adaptation is presented in Fig. 1 and the mesh adaptation algorithm is integrated in the *OORT* framework.

*4.2.1. Topological operations* The first set of operations performed on the mesh are topological modifications. These modifications are very cost effective and rapidly result in a mesh that is much closer to satisfying the non-conformity coefficient than it originally was. At the moment of this writing, topological operations are only implemented on simplices due to the fact that layers of quadrilaterals and prisms at the boundaries are treated as being structured, with fixed topology. The topological modification operations are edge refinement, edge coarsening, edge swapping and face swapping.

Edge refinement and coarsening help in obtaining the desired local vertex concentration. Every edge is measured in the metric space. When the length of an edge is longer then a threshold value

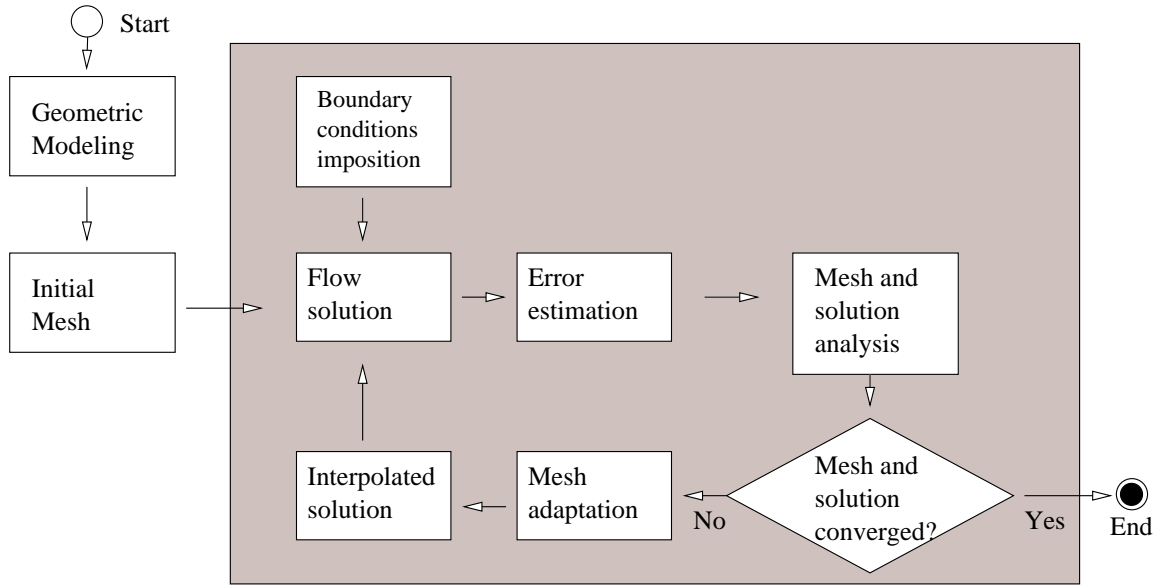


Figure 1. General mesh adaptation scheme

$l_{max}$ , the edge is refined through vertex insertion (Fig. 2, left), and when the edge is shorter than a second threshold value  $l_{min}$ , it is coarsened through vertex fusion (Fig. 2, right).

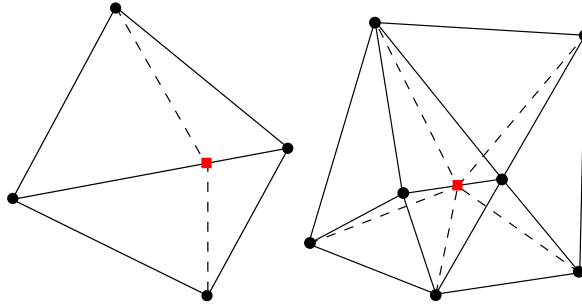


Figure 2. Edge refinement and coarsening operations

Edge and face swapping are then used to generally approach satisfaction of the non-conformity coefficient in terms of shape and orientation. The shape criterion  $\eta$  presented in [44] is used to that effect. When the shape criterion of an element is lower than a threshold value, possible modifications such as those shown in Figs. 3 and 4 are tested for improvement of the local shape. The best configuration is selected.

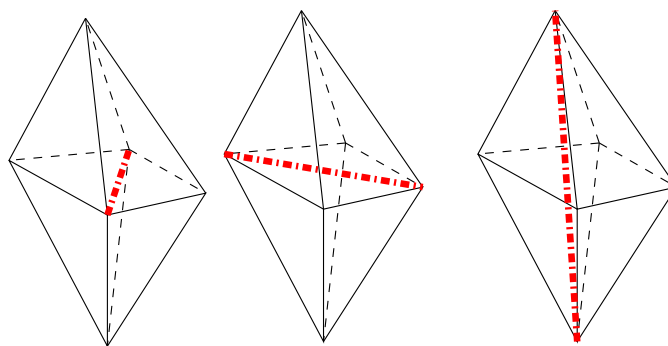


Figure 3. Edge swapping initial configuration and subsequent possible configurations

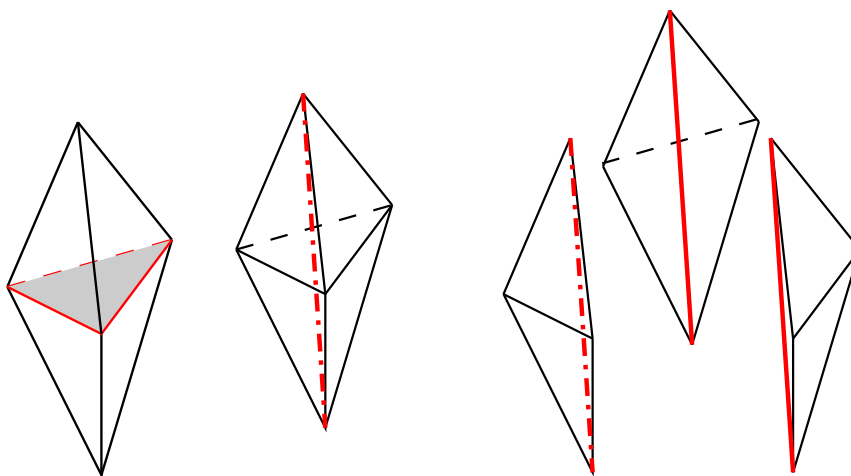


Figure 4. Face swapping initial configuration and subsequent possible configurations

The result of these operations is a mesh that is that much closer to the target, but since none of these operations directly works on the improvement of the non-conformity coefficient, a final step is needed to obtain the best possible mesh.

*4.2.2. Geometric operations* Geometric modification operations, also called adaptive mesh smoothing, r-refinement or vertex relocation method, are used as a final step to improve mesh quality. A cost function based on the elementary non-conformity coefficient is first established.

$$f_V = \sum_{K_i \in N(V)} \varepsilon_{K_i}^2. \quad (28)$$

The optimal position of vertex  $V$  is found at the local minimum of the contribution to the conformity of element  $K_i$  of the vertex neighborhood  $N(V)$ . The choice of this particular form of cost function and its implementation as a Gauss-Seidel type algorithm was presented in [25]. The procedure is applied to all vertices with a neighborhood of any type of element: simplices, non-simplices or both. At the end of this step, the mesh is said to be optimized for a particular specified metric.

## 5. NUMERICAL EXPERIMENTS

In this section the results of applying anisotropic mesh adaptation to an industrial combustion test case are presented. The case is first presented in detail discussing the geometrical model and and selected boundary conditions. A mesh convergence study will then be shown as a baseline comparison for the mesh adaptation results presented thereafter.

### 5.1. Case presentation

The case that was chosen for this particular study is the one of a small scale test combustor presented in [45]. It is true that this type of geometry does not directly represent the scale of the type of problems that generally constitute the core of large industrial boiler furnace designs. However, this case well represents a small section of a larger boiler furnace right in front of a burner, where a flame front is present. This case has been selected because it generates a non-premixed turbulent diffusion flame very similar to the type of flame present in most large scale industrial equipment. Also, experimental results are available [45] and a numerical study of the same combustor was also presented [46]. These previous studies will facilitate the analysis of the results presented in this section.

Since the geometry of the selected combustor is axisymmetric, the initial mesh generation and subsequent mesh adaptation work is performed in two dimensions, while the CFD simulations are run on a 5 degrees section constructed as a circumferential extrusion of the 2D mesh in cylindrical coordinates. Figure 5 shows a not to scale representation of the geometry used throughout this study to generate all the meshes that will be presented.

### 5.2. Boundary Conditions

Table II presents the boundary conditions and characteristics of the fluids used for the tests. The conditions presented are an interpretation of the information that could be gathered from [45, 46]. There is a discrepancy that can be found between the velocities that were used in the numerical experiments of [46] and the associated mass flow rates. If one uses the information given for pressure, temperature and stream compositions to calculate the mass flow from the velocity or vice-versa, they do not match exactly. For this reason a choice between conserving mass or velocity had to be made.



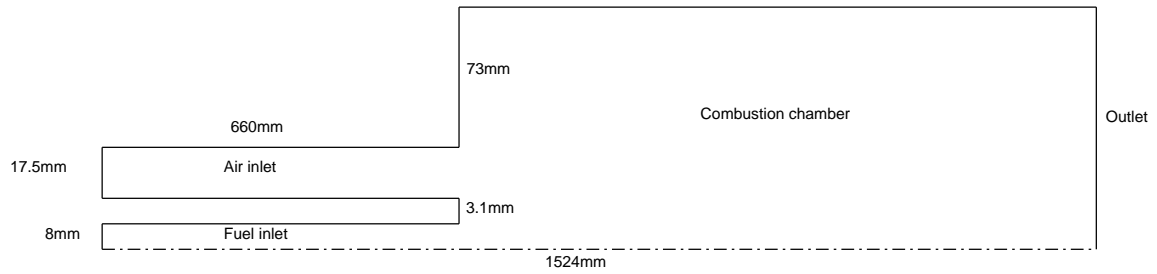


Figure 5. Combustor geometry (not to scale)

McKenty [30] noticed this problem and, after further study, decided to conserve velocity. The same principle was applied here.

Operating conditions		
	fuel	air
Reference pressure (kPa)	93.4	93.4
Turbulence intensity (%)	10	10
Temperature (K)	300	589
Velocity (m/s)	21.3	34.3
Composition ( molar %)		
	fuel	air
$CH_4$	85.8	
$C_2H_6$	6.1	
$Ar$	5.5	
$N_2$	2.6	79.05
$O_2$		21.95

Table II. Combustor operating conditions and fluid characteristics

### 5.3. Mesh Convergence Study

The first step of this numerical study, which aims at determining the accuracy obtained by an anisotropic adapted mesh and the cost of the operation, is to establish a baseline in terms of accuracy and computational costs. This will be done in the form of a mesh convergence study. The combustion simulation of the combustor has been run on isotropically generated hybrid meshes with increasing vertex density until convergence of the solution was obtained. Converged results were also compared to experimental results to determine the level of error caused by the choice of simulation models and boundary conditions.

The results in terms of number of elements and computational costs are presented in Tab. III. These results demonstrate that in order to obtain an accurate solution for reacting flows, a very large

number of elements are required. The study had to be stopped at 825k elements, due to the fact that it was impossible to run a higher number of elements on a single workstation in an acceptable time frame. We will then need to assume that results obtained using mesh adaptation can be considered accurate if they compare well with the results obtained using 825k elements.

Number of elements	Time (1CPU)
50000	3.35h
75000	5.80h
100000	9.75h
125000	18.2h
250000	52.0h
500000	197.1h
825000	265.2h

Table III. Mesh convergence study calculation time

In order to compare the accuracy of the solutions obtained on those meshes, Figs. 6, 7 and 8 present plots of three important quantities to this analysis with respect to each mesh used in the convergence study. In the first figure, the mixture fraction along the symmetry axis ( $y = 0$ ) is presented, while the two other figures show the mixture fraction and temperature on a radial plane at ( $x = 9.5$  cm) downstream from the combustion chamber entrance. It can be observed on each of these figures how the solution gets more precise as the number of elements is increased. One can also see how the radial temperatures evolves through the flame front to generate a thinner peak region with the increase in the number of elements.

It must also be pointed out that the solution does not seem to be in very good agreement with the experimental results, and that the mixture fraction curves are moving away from experiments as the number of elements increases. There are a number of possible explanations as to where that error may come from. As stated previously, the chemical equilibrium model was chosen to solve the reacting components of the flow. This model induces errors as it does not intrinsically consider reaction rates to compute local species concentrations. It has also been shown [46] that the choice of boundary conditions for turbulence has a non negligible effect on the results, as it directly influences the mixing properties of the two jets coming out of the inlet pipes. Many tests with different turbulence intensity settings for both inlets were carried out as part of the present study, all generating different results. The numerical results could have been made to approach the experimental curves by modifying the turbulence intensity settings. However, no theoretical justification exists for using anything other than commonly accepted standard values. It is also important to mention that the unstable nature of the turbulent flame could also be partly responsible for the difference in results, as it may introduce significant uncertainty in the experimental measurements. Consequently, the solution obtained with the largest number of mesh elements was considered to be an accurate solution since the purpose

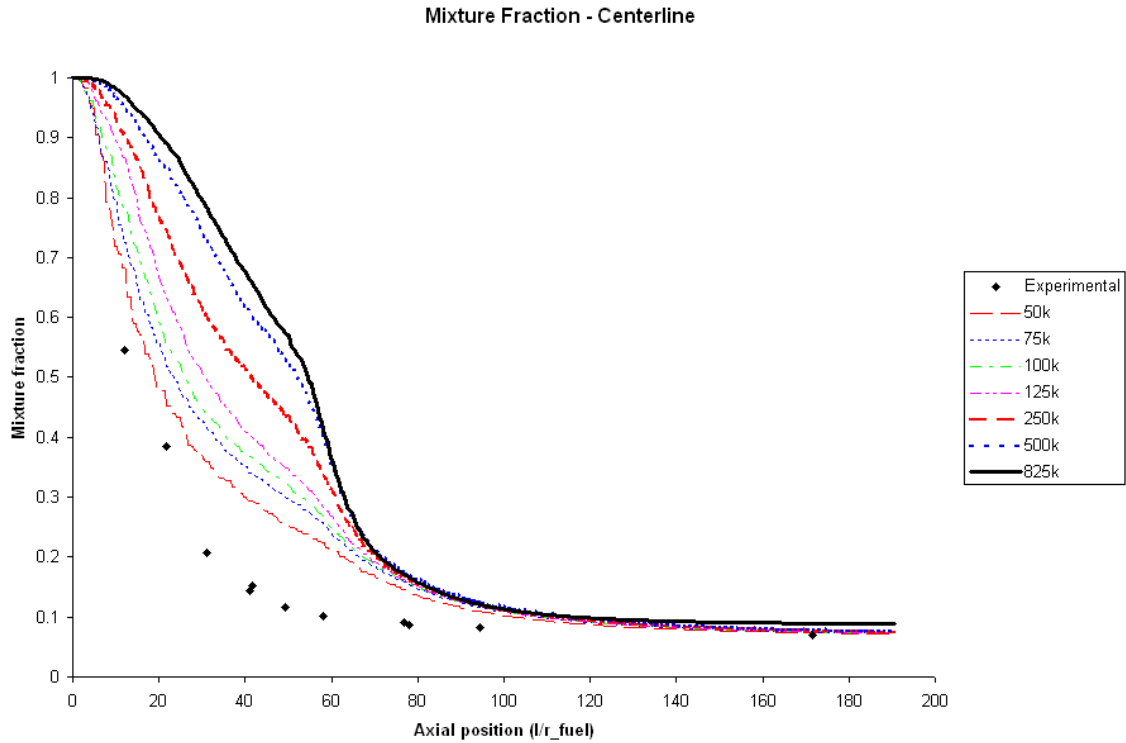


Figure 6. Convergence study graphs, axial mixture fraction

of the this study is to use adaptive meshing to improve CFD results using fewer computational resources, and not to improve general CFD models of reacting flows to better match experimental results. Since the same models and conditions are used for both the mesh convergence study and the adaptation presented in the next section, the results should converge towards the same flow solution.

#### 5.4. Mesh adaptation Results

Having as a target the results obtained using the high node density meshes presented in the previous section, the mesh adaptation of the exact same case will be examined. An initial mesh which is very coarse and is guaranteed to generate an inaccurate solution was generated. This mesh is isotropic and no concentration zones exist because no prior knowledge of flow features were used for its construction. The only exception being the quadrilateral structured zone at the wall boundaries. The initial mesh of 8011 elements is shown in figure 9.

It can be seen that there are a number of small cells at the boundaries. Those were generated with a specific results in mind. It was discussed in section 4 that the remeshing toolkit used (*OORT*)

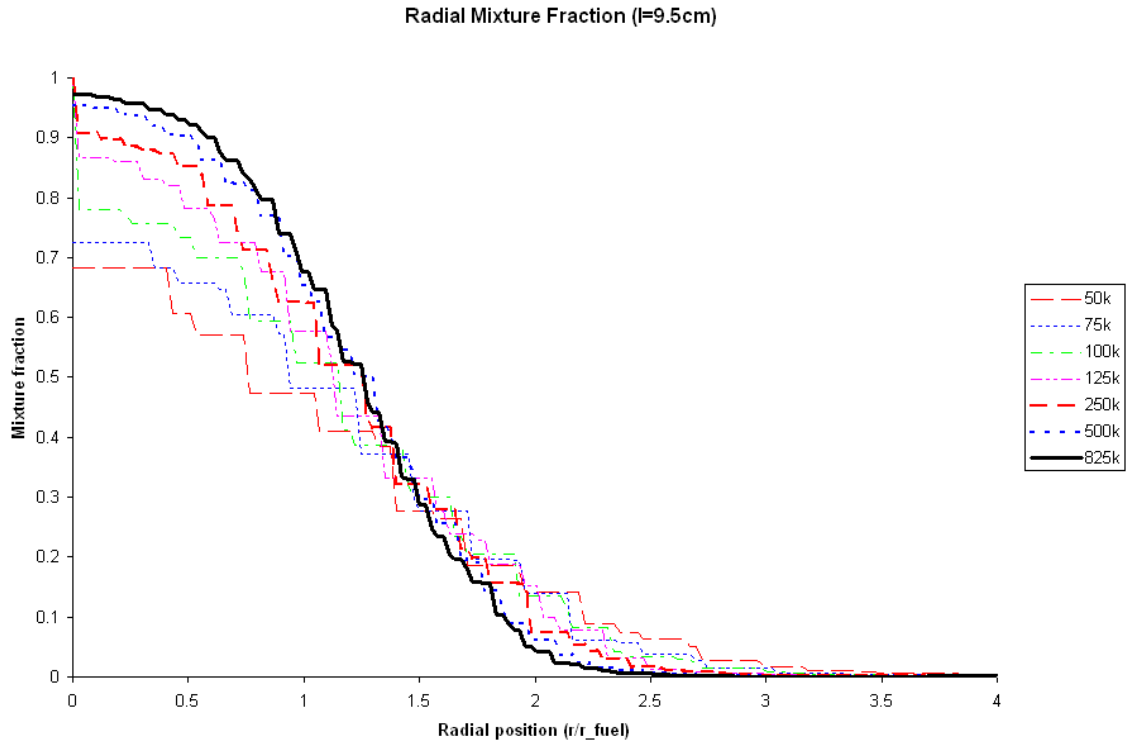


Figure 7. Convergence study graphs, radial mixture fraction

lacks the possibility to refine and coarsen meshes in structured zones of the mesh. It is known, see [23, 24], that the non-conformity coefficient measures both the distortion of an element in size and shape. But when looking at a value of the non-conformity coefficient, it is impossible to discern if the element generating that value is non-conform in terms of size, shape or a combination of both. Experience with the minimization of the metric non-conformity using *OORT* has shown that in the unstructured regions of the mesh, topological operations carried out before non-conformity minimization ensure that the local size and shape are close to ideal values, helping to determine a configuration with minimum non-conformity. This is not the case in structured regions, where no topological operations are defined. In the case where too few elements are present along a boundary edge compared to what is requested by the specified metric, the optimization of size can become impossible and the only way to minimize the non-conformity is to satisfy the metric in terms of shape. This will usually result in good shape but very large quadrilateral elements close to the boundary. In order to minimize that effect, an initial mesh with more elements than needed on the edges has been specified, in anticipation of adaptation shortcomings in the structured region.

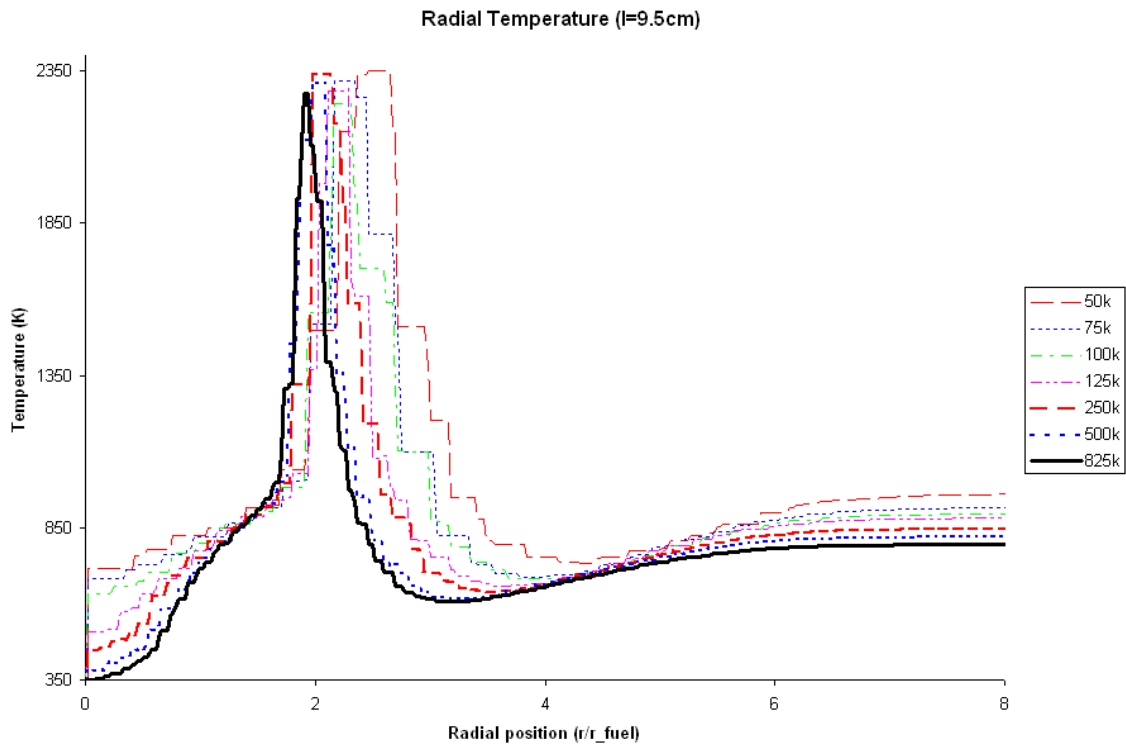


Figure 8. Convergence study graphs, radial temperature

The solution obtained on this initial mesh is presented in Fig. 10. The results are shown for the four variables used to compute the solution-based metric at each iteration of the global process. It can be seen that this initial mesh is not accurate enough to capture the shock type of feature created by the chemical reaction and the temperatures get diffused in the flame region. Also, the recirculation zone at the top, following the inverted step, reattaches itself at 35 cm downstream from the chamber inlet, which is not far enough from the step compared to the reattachment point measured at 42.5 cm for the 825k mesh.

The resulting mesh after five global iterations of the solution-adaptation scheme (Fig. 1) is presented in Figs. 11 and 12 with the corresponding solution for the adaptation variables in Fig. 13. The final mesh is composed of 16450 elements. One can easily observe the anisotropic refinement occurring in the shear zone between the air and fuel jets. Mesh concentration in this area has increased significantly, as the solution exhibits rapid changes in mixture fraction and temperature, which in turn cause a number of changes in the density and velocity fields. The reattachment point has moved to 42 cm which is much closer to the target results of the 825k mesh.

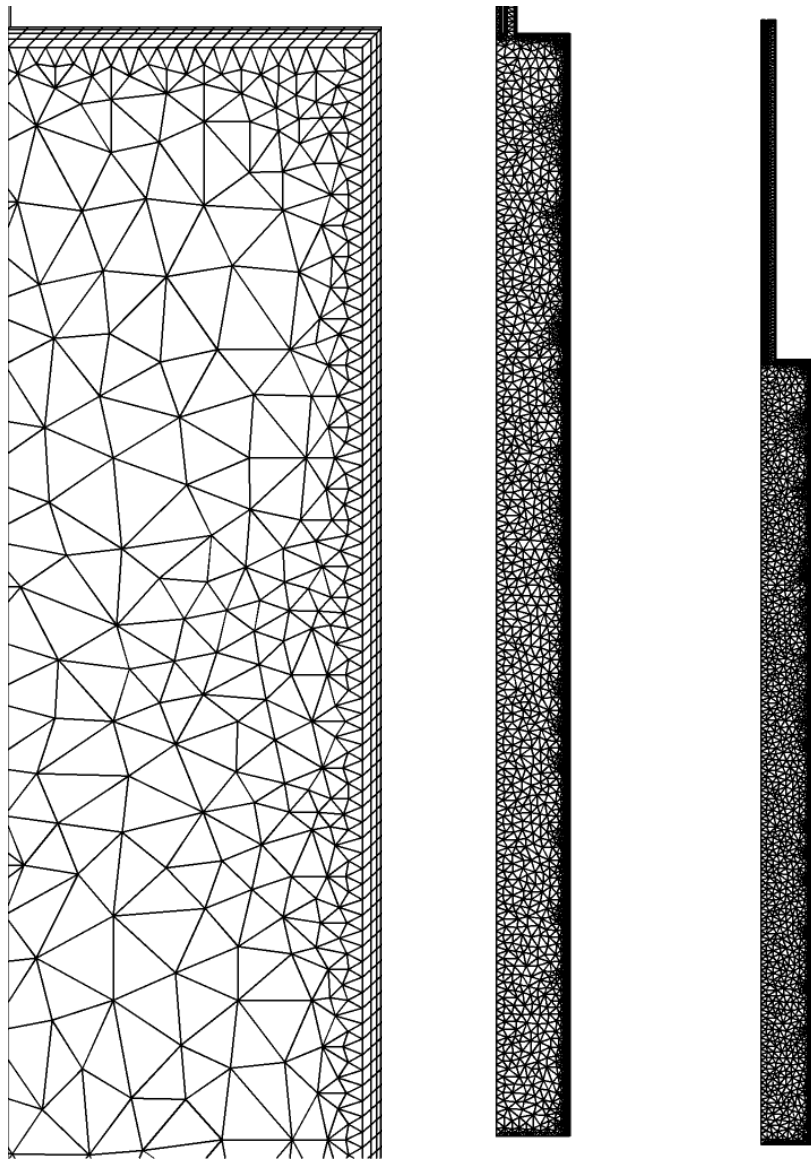


Figure 9. Initial mesh

Figures 14 and 15 show the secondary recirculation zone present at the base of the inverted step using contours of axial velocity for iterations 1 and 5, and their respective meshes. At iteration 1, the recirculation zone is present but clearly limited to the structured part of the mesh. The unstructured mesh elements at the boundary are not small enough to propagate the recirculation into the domain, as would have been the case for a finer mesh such as the 825k element mesh shown in Fig. 16. At

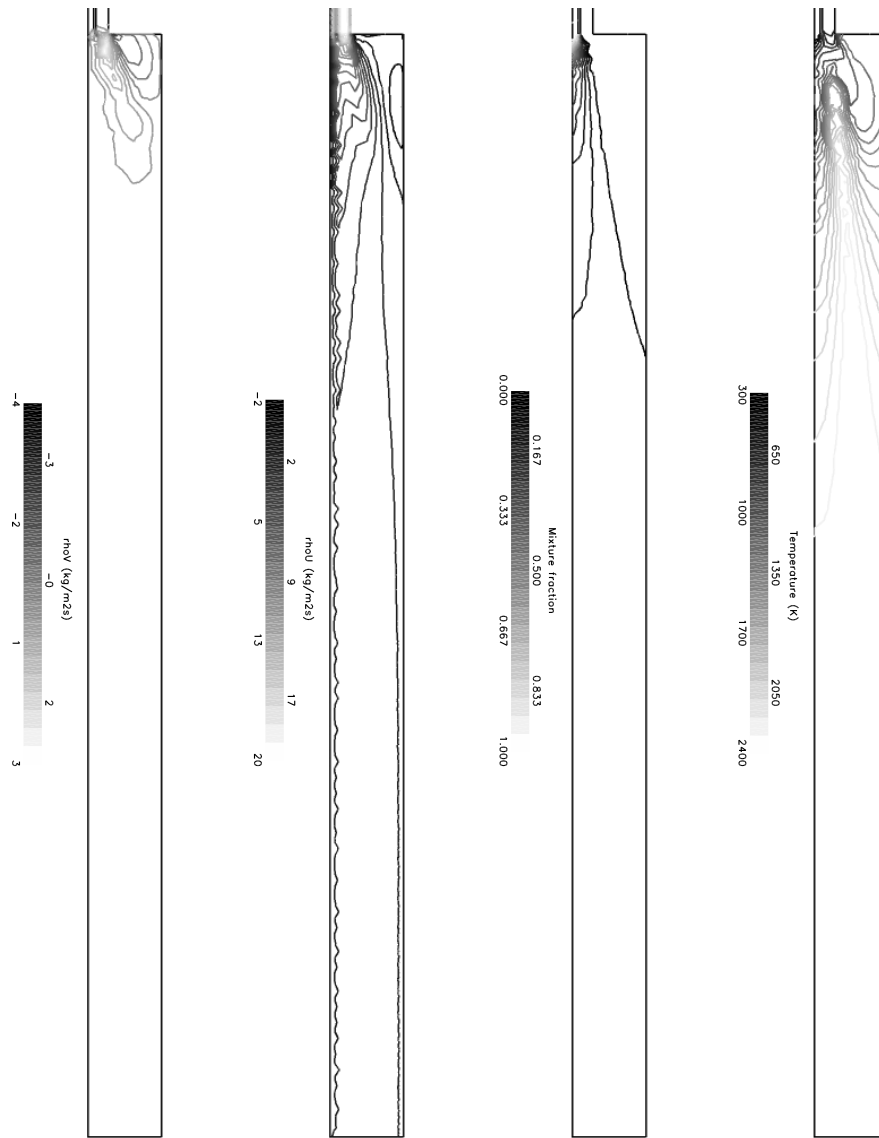


Figure 10. Result of adaptation variables on the initial mesh

iteration 5, the outcome is significantly different. With fewer elements, anisotropic adaptation has added stretching and orientation along the recirculation path, and the secondary recirculation zone is much more defined than on the initial mesh. This time, the zone propagates farther into the domain, past the layer of structured element. It is almost comparable to the 825k in terms of size and position. The capture and resolution of this recirculation zone is a good example of the fact

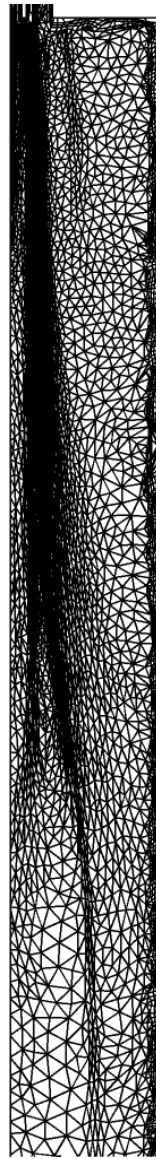


Figure 11. Final mesh, global view

that a high quality mesh may not necessarily be esthetically smooth, but rather be smooth in the space of the Riemannian metric.

In order to compare the results obtained during each iteration of the process and compare them in a more quantitative way to those of the mesh convergence study, the same figures of axial mixture



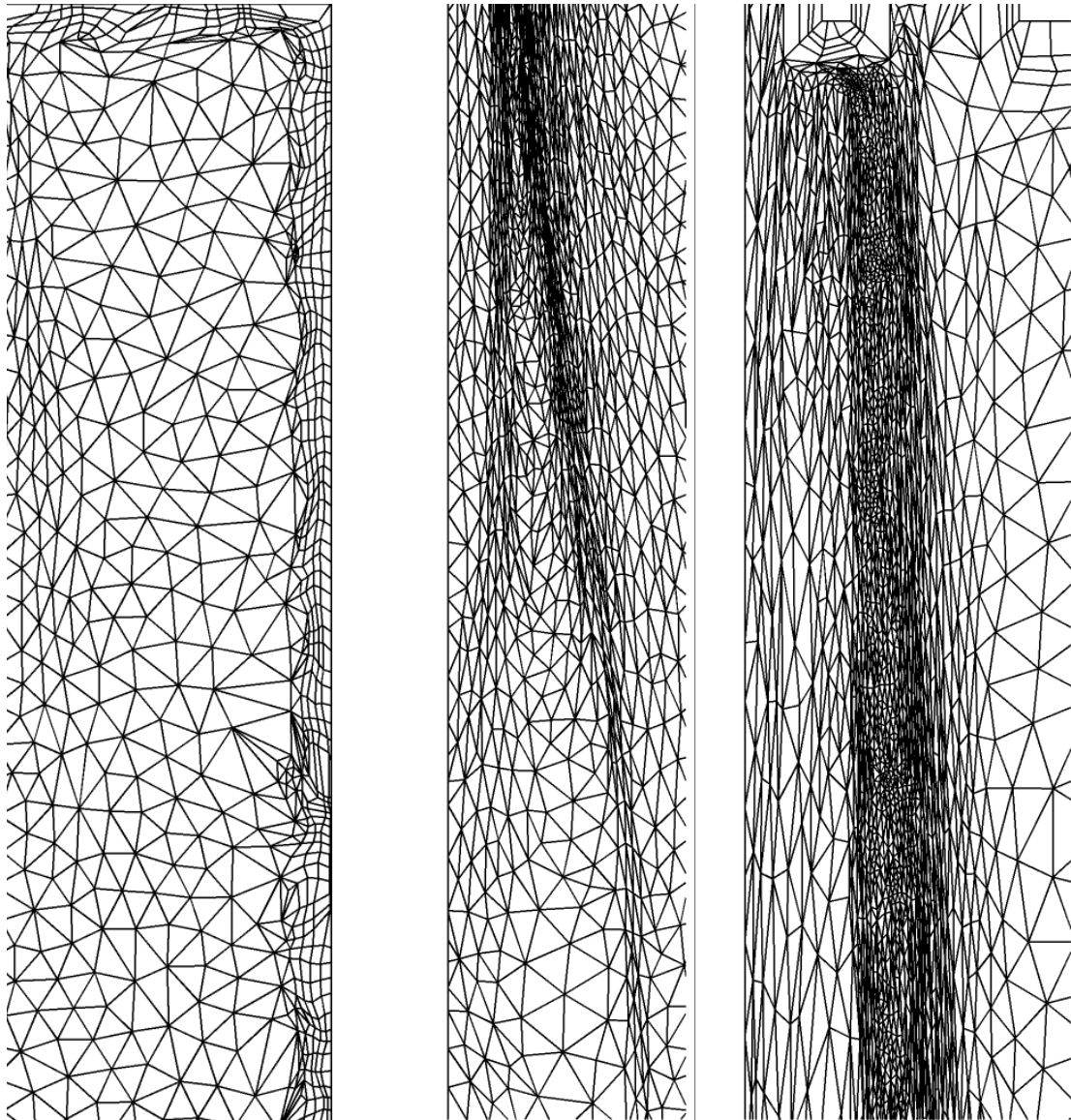


Figure 12. Final mesh, zoomed views

fraction, radial mixture fraction and temperature are shown for each adapted mesh along with solutions for the 825k element mesh, in Figs. 17,18 and 19.

Those curves show that mesh adaptation has increased the accuracy of the solution, producing a result with 16k elements very similar to those obtained on a mesh of 825k isotropic elements. It is also apparent that the curves obtained with the adapted meshes are much rougher than the

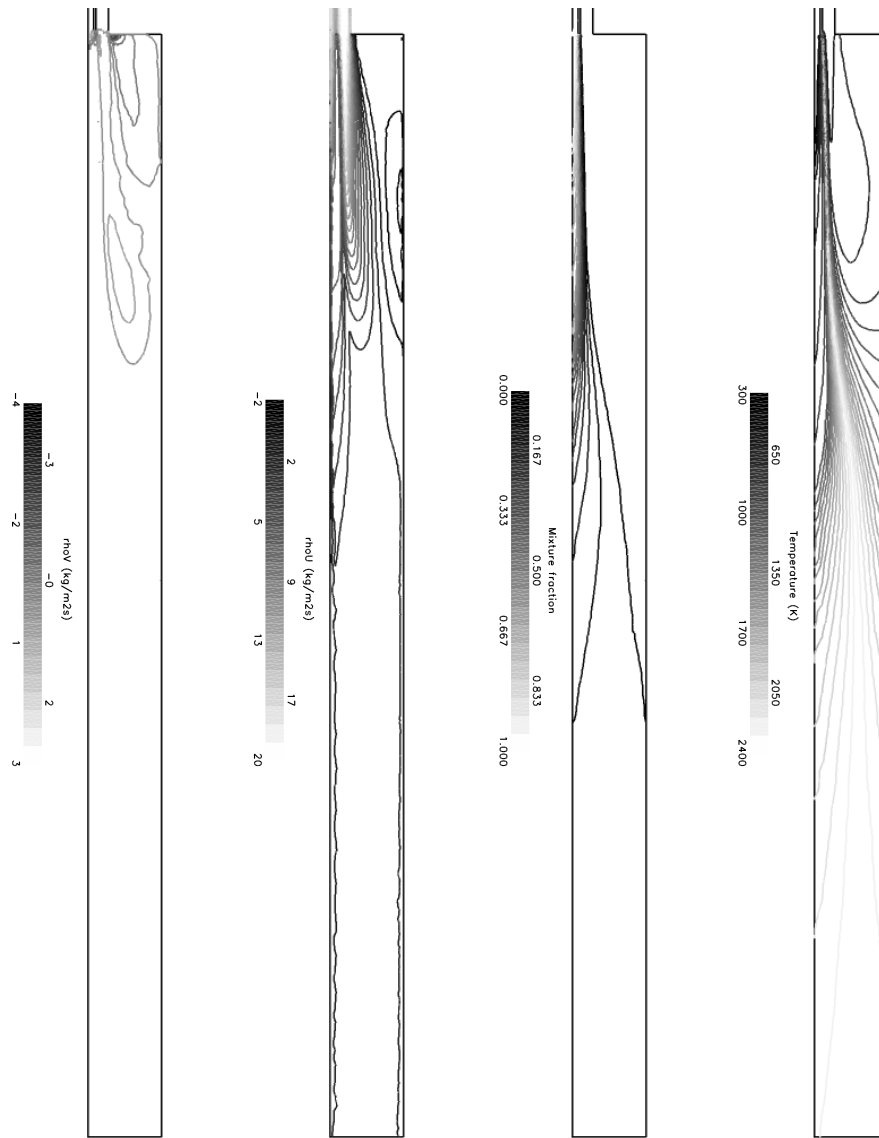


Figure 13. Result of adaptation variables on the final mesh

converged mesh curves. This is caused directly by the number of elements along the sensor lines, the solution being constant over each element. The objective being to increase the accuracy using very limited resources, a sacrifice in solution smoothness is acceptable when trying to keep the number of elements as low as possible using Riemannian metric scaling. This compromise is also apparent in the difference between solutions of iteration 4 and 5. It seems that the solution at iteration 4 is

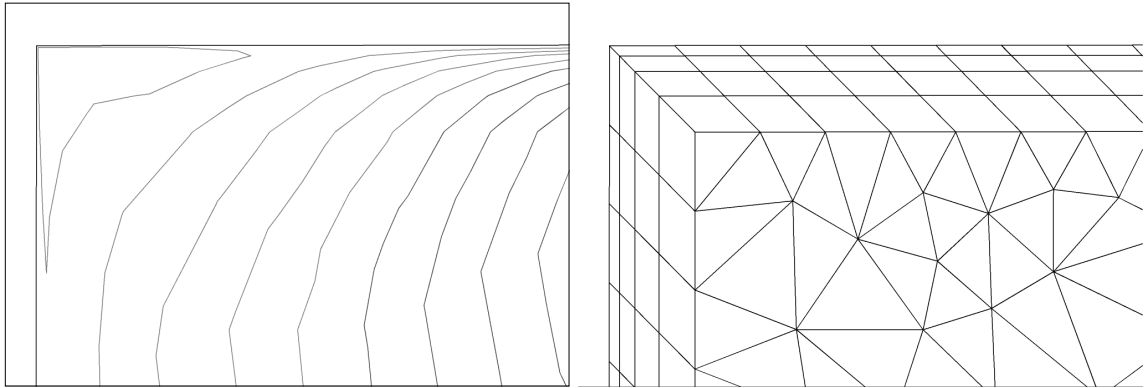


Figure 14. Secondary recirculation zone, iteration 1

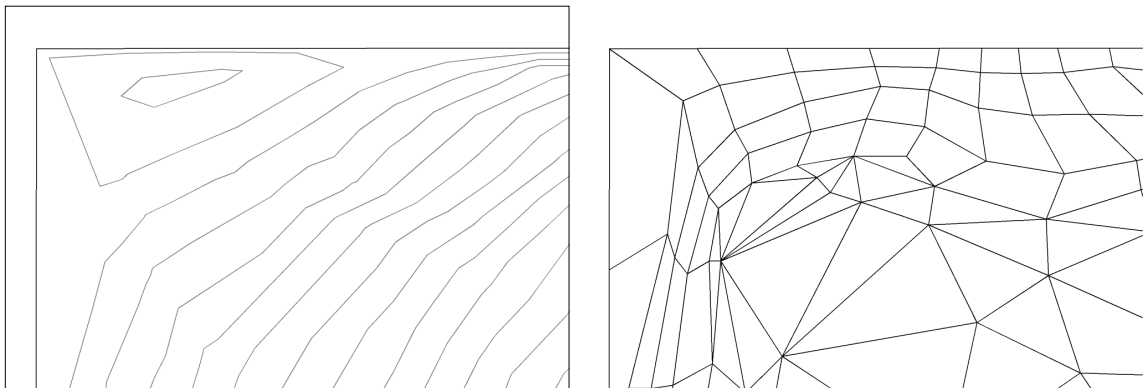


Figure 15. Secondary recirculation zone, iteration 5

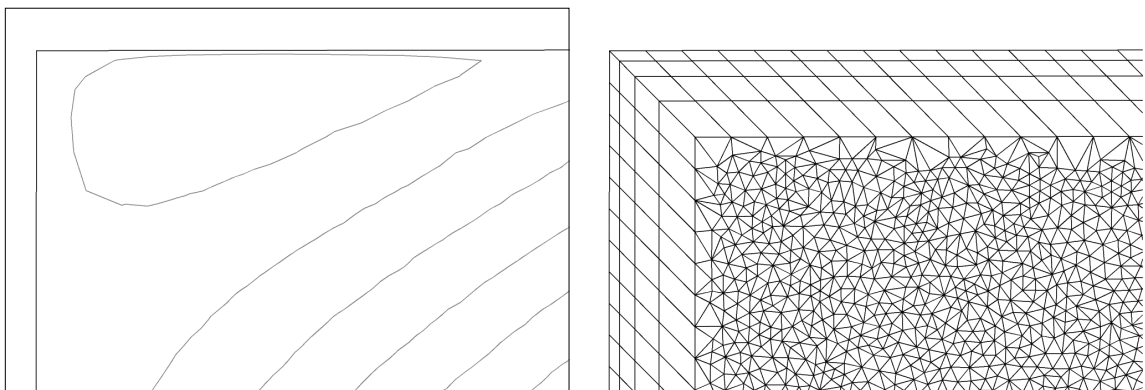


Figure 16. Secondary recirculation zone, 825k mesh

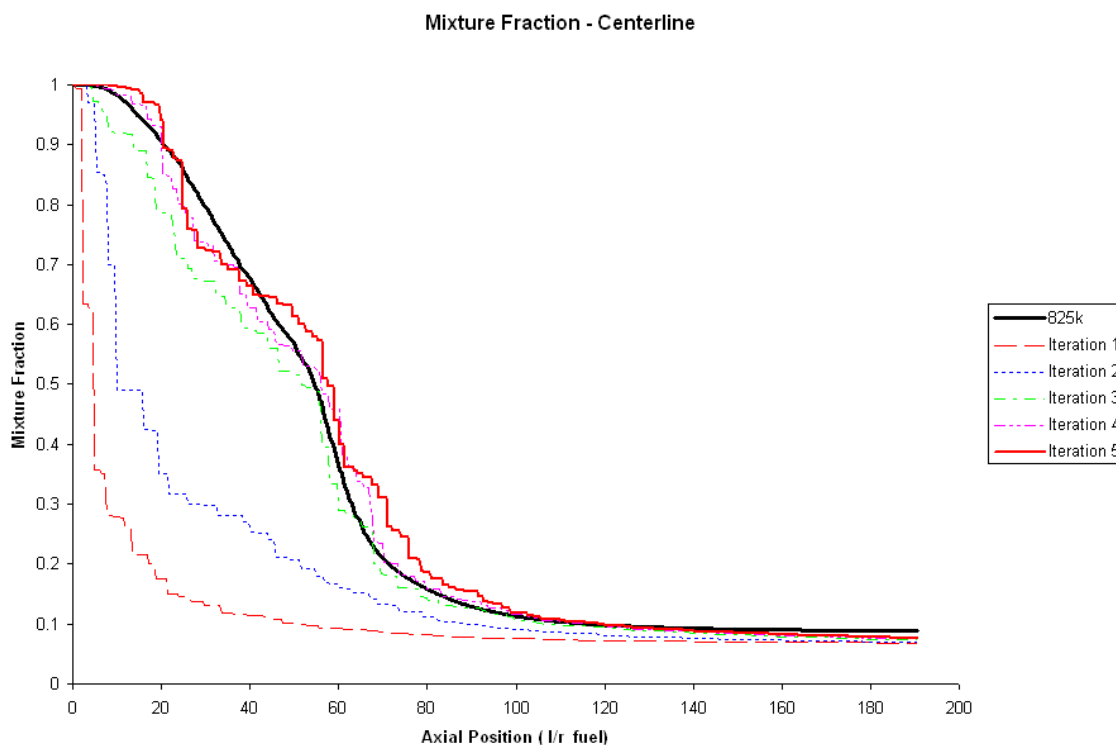


Figure 17. Adaptation graphs, axial mixture fraction

more accurate than the one at iteration 5. In this case, metric scaling has caused the generation of elements that were too large in order to compensate for the necessity of creating smaller elements in the reaction zone. This highlights the fact that a great deal of caution needs to be used in the implementation of metric treatments for these types of cases. The compromise that was made by metric scaling was only good up to a certain point. It is probable that a better solution could have been generated by using larger scaling factors but at the cost of a larger computation time due to the increased number of elements.

Now that it has been shown that the solution obtained after 5 iterations of mesh adaptation is accurate enough with 16k adequately placed anisotropic elements, it becomes important to compare computational performances. As shown in Tab. IV, in the convergence study, it took 265 hours to obtain a converged solution on the 825k element mesh. The complete adaptation process of computing the solution to a converged state on the initial mesh, the three intermediate meshes and the final mesh plus the adaptation time of each of the four adaptation processes was completed in a total of 1.5 hours as shown in Tab. IV. The adaptation process was shown to reach an accuracy

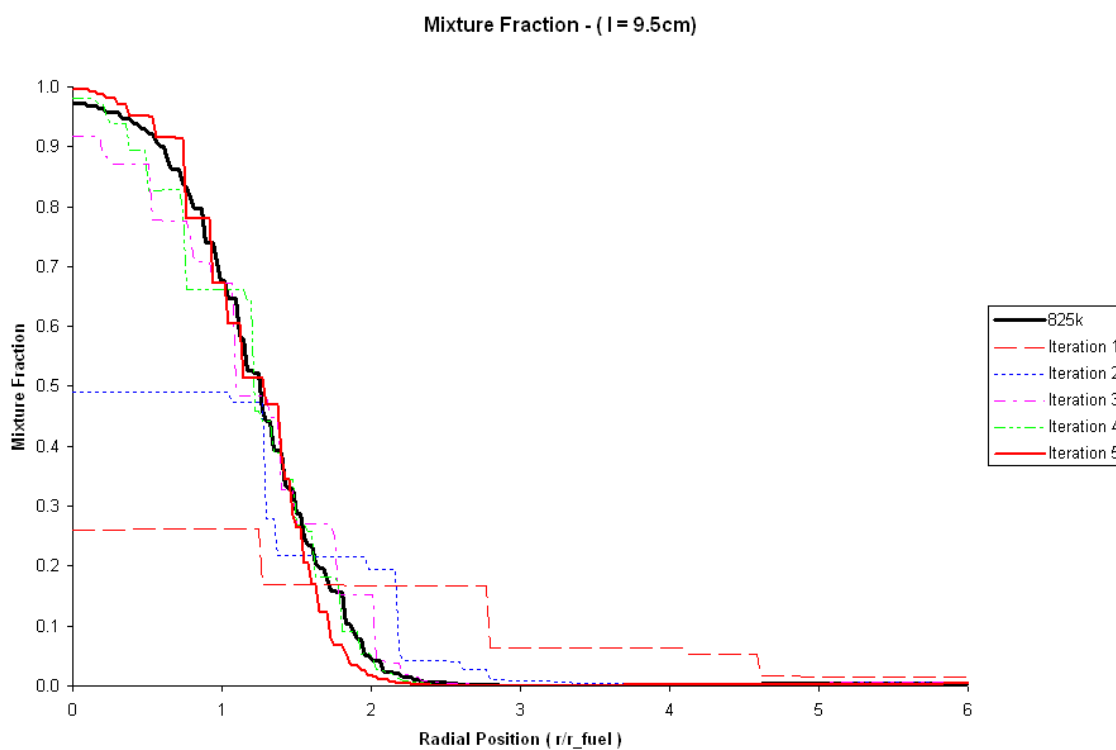


Figure 18. Adaptation graphs, radial mixture fraction

similar to the solution on the finest mesh used in the convergence study, while using a mere 0.5% of the computational resources used to compute the solution on 825k elements.

Global Iteration	Number of elements	CFD time (1CPU)	Adaptation time (1CPU)
1	8011	0.11h	0
2	10393	0.23h	1min 20s
3	11978	0.22h	1min 33s
4	13958	0.33h	1min 35s
5	16450	0.54h	1min 29s
Total		1.32h	5min 57s

Table IV. Mesh adaptation statistics

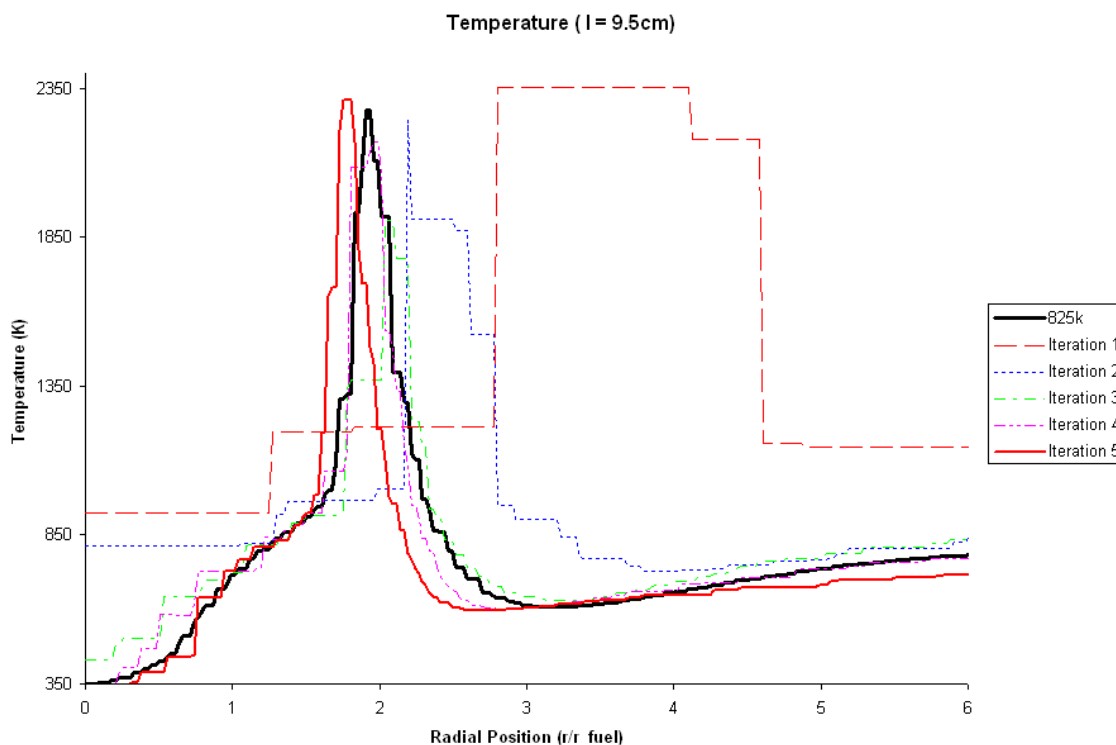


Figure 19. Adaptation graphs, radial temperature

## 6. CONCLUSION

In this paper, an adaptive mesh method using local mesh operations applied to reacting flow simulations has been presented. Specifically in the context of industrial combustion where geometries are very large and where computational power is scarce, computational efficiency is essential to allow the simulation of industrially relevant complex turbulent reacting flows. In such problems, accurate resolution of the flame front is of the highest importance to pollutant prediction and without *a priori* knowledge of the flow dynamics, it becomes almost impossible to generate a good initial mesh. The presented method, based on *a posteriori* interpolation error estimation is implemented in the form of a Riemannian tensor metric field that describes the desired size, stretching and orientation of the elements. Local mesh modification operations allow the local interpolation error to be equally distributed over elements of different types. A measure based on the distance between the specified metric tensor and the actual metric tensor of an element is used as a cost function to drive the anisotropic adaptation of the mesh. The method was shown to generate results using 50 times fewer

elements than in an equivalent isotropic non-adapted mesh, and in a fraction of the computational time. This clearly demonstrates the usefulness of such algorithms in the field of reacting flows and flame front prediction. Better results could have been obtained by implementing topological operations in the structured layers of the mesh to allow for better convergence towards the absolute minimum of the cost function. Gains in accuracy versus computation time could also be obtained by limiting the metric scaling used during adaptation, which generates elements larger than estimated in order to keep the increase in the number of elements manageable. Future work also includes 3D validation on a real industrial combustion problem and the use of pollutant prediction models to verify the gain in accuracy compared with actual measures and previous simulations carried out without adaptation.

## REFERENCES

1. Abdul Majid MAN, Shuaib NH, Hasini H, Boosroh MH. Numerical investigations on the effects of high temperature air combustion in a coal-powered boiler. ICEE 2009 - Proceeding 2009 3rd International Conference on Energy and Environment: Advancement Towards Global Sustainability, IEEE Computer Society: Malacca, Malaysia, 2009; 184–188.
2. Hasini H, Yusoff MZ, Shuaib NH, Boosroh MH, Haniff MA. Analysis of flow and temperature distribution in a full scale utility boiler using cfd. ICEE 2009 - Proceeding 2009 3rd International Conference on Energy and Environment: Advancement Towards Global Sustainability, IEEE Computer Society: Malacca, Malaysia, 2009; 208–214.
3. Razali NM, Boosroh MH, Hasini H, Shuaib NH. Impact of tangential burner firing angle on combustion characteristics of large scale coal-fired boiler. ICEE 2009 - Proceeding 2009 3rd International Conference on Energy and Environment: Advancement Towards Global Sustainability, IEEE Computer Society: Malacca, Malaysia, 2009; 177–183.
4. Zeldovich JB. Oxidation of nitrogen in combustion and explosion. *Academie des Sciences de l'URSS – Comptes Rendus* 1946; **51**(3):217–220.
5. Kong SC, Reitz RD. Numerical study of premixed hcci engine combustion and its sensitivity to computational mesh and model uncertainties. *Combustion Theory and Modelling* 2003; **7**(2):417–433.
6. Haldenwang P, Pignol D. Dynamically adapted mesh refinement for combustion front tracking. *Computers and Fluids* 2002; **31**(4-7):589–606.
7. Li X, Shephard M, Beall M. 3d anisotropic mesh adaptation by mesh modification. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2005; **194**(48-49):4915–4950.
8. Agouzal A, Lipnikov K, Vassilevski Y. Hessian-free metric-based mesh adaptation via geometry of interpolation error. *Computational Mathematics and Mathematical Physics* 2010; **50**(1):124–138.
9. Bennett B, Smooke M. Local rectangular refinement with application to axisymmetric laminar flames. *Combustion Theory and Modelling* 1998; **2**(3):221–258.
10. Bennett B, Smooke M. Local rectangular refinement with application to nonreacting and reacting fluid flow problems. *Journal of Computational Physics* 1999; **151**(2):684–727.
11. Bennett B. Local rectangular refinement in three dimensions (lrr3d): Development of a solution-adaptive gridding technique with application to convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 2007; **52**(1):1–32.



12. Gao X, Groth CPT. Parallel adaptive mesh refinement scheme for turbulent non-premixed combustng flow prediction. American Institute of Aeronautics and Astronautics Inc.: Reno, NV, United states, 2006; 17 450–17 463.
13. Gao X, Groth C. A parallel solution-adaptive method for three-dimensional turbulent non-premixed combustng flows. *Journal of Computational Physics* 2010; .
14. Northrup S, Groth C. Solution of laminar diffusion flames using a parallel adaptive mesh refinement algorithm. *AIAA Pap* 2005; :20050547.
15. Sachdev J, Groth C, Gottlieb J. A parallel solution-adaptive scheme for multi-phase core flows in solid propellant rocket motors. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 2005; **19**(2):159–177.
16. Rendleman C, Beckner V, Lijewski M. Parallelization of an adaptive mesh refinement method for low mach number combustion. *Computational Science ICCS 2001* 2001; :1117–1126.
17. Dompierre J, Vallet MG, Bourgault Y, Fortin M, Habashi WG. Anisotropic mesh adaptation: Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent cfd. part iii. unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 2002; **39**(8):675–702.
18. Alauzet F, Li X, Seol ES, Shephard MS. Parallel anisotropic 3d mesh adaptation by mesh modification. *Engineering with Computers* 2006; **21**(3):247–258.
19. Yuan L, Tang T. Resolving the shock-induced combustion by an adaptive mesh redistribution method. *Journal of Computational Physics* 2007; **224**(2):587–600.
20. Thompson JF, Warsi ZUA, Mastin CW. *Numerical grid generation, foundations and applications*. North Holland: New York, 1985.
21. Vallet MG, Manole CM, Dompierre J, Dufour S, Guibault F. Numerical comparison of some hessian recovery techniques. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2007; **72**(8):987–1007.
22. McKenzie S, Dompierre J, Turcotte A, Meng E. On metric tensor representation, intersection and union 2009.
23. Labbe P, Dompierre J, Vallet MG, Guibault F, Trepanier JY. A universal measure of the conformity of a mesh with respect to an anisotropic metric field. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2004; **61**(15):2675–2695.
24. Sirois Y, Dompierre J, Vallet MG, Guibault F. Measuring the conformity of non-simplicial elements to an anisotropic metric field. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2005; **64**(14):1944–1958.
25. Sirois Y, Dompierre J, Vallet MG, Guibault F. Hybrid mesh smoothing based on riemannian metric non-conformity minimization. *Finite Elements in Analysis and Design* 2009; **46**(1-2):47–60.
26. Ferziger JH, Peric M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Second edn., Springer: Berlin, 1999.
27. Jones W, Launder B. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1972; **15**(2):301–314.
28. Boudier G, Gicquel LYM, Poinot TJ. Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combustion and Flame* 2008; **155**(1-2):196–214.
29. Patankar SV. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences, Hemisphere Pub. Corp. ; McGraw-Hill: Washington New York, 1980.
30. McKenty F. Modeles de combustion pour la simulation numerique d'écoulements reactifs en atmosphere confinee. Ph.d., École Polytechnique de Montral 1992.
31. Gordon S, McBride B. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium composition, rocket performance, incident and reflected shock and chapman jouguet detonation. *Technical Report*, NASA 1971.
32. Jones W, Whitelaw J. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review. *Combustion and Flame* 1982; **48**:1–26.
33. Khalil EE. *Modelling of furnaces and combustors*. Energy and engineering science series, Abacus Press: Tunbridge Wells, Kent, 1982.
34. McRae DS. r-refinement grid adaptation algorithms and issues. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2000; **189**(4):1161–1182.
35. Vallet MG. Gnration de maillages lments finis anisotropes et adaptatifs. Thse de doctorat, Universit Pierre et Marie Curie 1992.



36. George PL, Borouchaki H. *Triangulation de Delaunay et maillage : applications aux éléments finis*. Hermès: Paris, 1997.
37. Frey PJ, George PL. *Maillages : applications aux éléments finis*. Hermès Science: Paris, 1999.
38. Bottasso CL. Anisotropic mesh adaption by metric-driven optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2004; **60**(3):597–639.
39. Joubarne E. Adaptation de maillage pour la simulation numérique du tourbillon marginal sur une aile tridimensionnelle. PhD Thesis, École Polytechnique de Montréal 2008.
40. Li X, Remacle J, Chevaugnon N, Shephard M. Anisotropic mesh gradation control. *13th International meshing roundtable*, Williamsburg, VA, 2004; 401–412.
41. Brais N. Simulation numérique d'écoulements réactifs utilisant un maillage adaptatif. Ph.d., École Polytechnique de Montréal 1993.
42. Berzins M. Mesh quality: A function of geometry, error estimates or both? *Engineering with Computers* 1999; **15**(3):236–247.
43. Bélanger S. Adaptation de maillages anisotropes. PhD Thesis, École Polytechnique de Montréal 2010.
44. Dompierre J, Vallet MG, Labbé P, Guibault F. An analysis of simplex shape measures for anisotropic meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2005; **194**(48-49):4895–4914.
45. Lewis MH, Smoot LD. Turbulent gaseous combustion - 1. local species concentration measurements. *Combustion and Flame* 1981; **42**(2):183–196.
46. Smith PJ, Smoot LD. Turbulent gaseous combustion - 2. theory and evaluation for local properties. *Combustion and Flame* 1981; **42**(3):277–285.