NOTE TO USERS

This reproduction is the best copy available

UMI

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

GÉNÉRALISATION DE LA RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES EN TROIS DIMENSIONS PAR LA MÉTHODE DES VOLUMES FINIS UTILISANT UN ENVIRONNEMENT ORIENTÉ OBJET

STÉPHANE THIENOT
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES (M.Sc.A.)
(GÉNIE MÉCANIQUE)
DECEMBRE 1998

© Stéphane Thienot, 1998.

National Library of Canada
Bibliothèque nationale du Canada

Acquisitions and Bibliographic Services
Acquisitions et services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

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

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-38712-7

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

GÉNÉRALISATION DE LA RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES EN TROIS DIMENSIONS PAR LA MÉTHODE DES VOLUMES FINIS UTILISANT UN ENVIRONNEMENT ORIENTÉ OBJET

présenté par: THIENOT Stéphane

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. REGGIO Marcelo, Ph.D. , président

M. CAMARERO Ricardo, Ph.D. , membre et directeur de recherche

M. GARON André, Ph.D. , membre

Remerciements

Je désire remercier en premier lieu mon directeur de recherche, M. Ricardo Camarero, pour son support sur les plans scientifique et humain et pour la confiance qu'il m'a témoignée. Je veux aussi adresser mes plus vifs remerciements à Juan Abanto, étudiant au doctorat, qui a beaucoup contribué à l'aboutissement de cette étude.

Je remercie aussi les autres membres du Groupe de recherche en mathématiques de l'ingénierie assistée par ordinateur (GRMIAO), professeurs et étudiants, qui n'ont pas hésité à me conseiller, à me fournir de l'aide et à répondre à mes questions. Ils ont rendu mon séjour agréable et motivant.

J'adresse aussi mes remerciements au fonds pour la formation de chercheurs et l'aide à la recherche (Fonds FCAR) pour son soutien financier.

Je veux enfin souligner le support que j'ai reçu des membres de ma famille, de mes amis et amies, par leur amitié, leur amour et leur compréhension.

Résumé

Ce mémoire s'inscrit dans le cadre d'un projet de généralisation de la méthode des volumes finis. L'outil informatique utilisé est un environnement appelé $\boldsymbol{VF}^{++}$ dans lequel les principes de base de la méthode des volumes finis ont été implantés de manière générique. La présente recherche a pour but de contribuer au développement et à la généralisation de la résolution des équations de Navier-Stokes en trois dimensions utilisant $\boldsymbol{VF}^{++}$.

Les écoulements modélisés sont laminaires, permanents et incompressibles. La formulation en variables primitives est adoptée. La discrétisation des équations de base se fait en fonction d'un maillage tétraédrique et hexahédrique. La méthode de résolution utilise la notion de schéma décalé. Deux variantes du schéma sont implantées. La première utilise un stockage des vitesses aux faces des éléments et la deuxième, aux sommets. La pression est toujours localisée au centre de l'élément. La discrétisation des termes de convection se fait à l'aide de deux fonctions d'interpolation. D'une part, la fonction FOUS qui varie exponentiellement dans la direction de l'écoulement et, d'autre part, la fonction MWUS basée sur la pondération par la masse dont la généralisation pour les cas tridimensionnels a dû être développée. Le couplage des équations se fait par la méthode SIMPLER.

La validation de la méthode a été effectuée pour des cas tests analytiques permettant de mesurer la diffusion numérique des schémas 'upwind' et de comparer le comportement de la méthode avec les deux formes de maillage et les stockages aux sommets et aux faces. Le comportement du schéma FOUS s'est avéré supérieur à MWUS. La capacité de ce schéma à prendre en compte la direction de l'écoulement de façon plus précise le rend moins sujet à la diffusion numérique. Son application est cependant limitée par la forme de stockage aux sommets et par le régime de l'écoulement. Le schéma MWUS possède de bonnes propriétés, mais est affecté par une importante diffusion numérique. L'ordre de l'erreur de cette méthode est assez faible lorsque le schéma est utilisé sur un maillage non structuré et peut s'expliquer par l'orientation aléatoire des faces dans le cas d'un maillage tétraédrique. Dans le cas d'un maillage structuré, la performance du schéma est supérieure lorsque le maillage est orienté en fonction de l'écoulement.

La procédure de calcul a, par la suite, été appliquée à des problèmes d'écoulements dans des tubes à fortes courbures dont on possède des mesures expérimentales. Les simulations numériques ont donné, dans l'ensemble, des résultats qui s'apparentent assez bien aux valeurs expérimentales, bien qu'il y ait des écarts relativement importants dans certains cas. Le principal point faible de la méthode vient du couplage pression-vitesse. Le fait de considérer la pression constante par élément et de l'intégrer telle quelle dans le terme source, ne donne pas à la méthode une grande versatilité. Le raffinement du maillage revêt donc une importance particulière, car c'est ce qui déterminera la capacité de la méthode à capter un fort gradient de pression.

Abstract

This thesis is part of a project aiming the generalization of the finite volume method. For this purpose, a computing environment called $\boldsymbol{VF}^{++}$ is used. The main advantage of this generic environment is its great flexibility with respect to possible discretization configuration and formulation for the integration of the conserved variables. The present research contributes to the development of this environment by implementing various tools for the resolution of the Navier-Stokes equations in three dimensions.

The modelised flow is laminar, permanent and incompressible with a primitive variable formulation (u,v,w,p). The equations are discretized on both hexahedral and unstructured tetrahedral grids. The numerical scheme in this study is an adaptation of the staggered grid methodology. Two variant of this scheme are developped. For the first scheme, the velocity components are stored at the sides whereas for the second scheme these velocities are stored at the vertices. The pressure is piecewise constant by element in both cases. Two interpolation function are implemented for the discretization of the convection terms: the Flow Oriented Upwind Scheme (FOUS), a function varying exponentially in the direction of the local averaged flow and linearly in the perpendicular direction; and Mass Weighted Upwind Scheme (MWUS) and upwinding interpolation function based on the mass flow in witch a generalization

in three dimensions is proposed. The pressure correction strategy (SIMPLER) is adopted for the coupling of the equations.

The validation of the method is first performed on analytical test cases allowing the measurements of numerical diffusion of the upwind schemes and the comparison of the results obtained with the two different grids and with the two forms of velocity storage. In general, FOUS scheme has been proved to be more acurate than MWUS. The capacity of this scheme to take into acount more precisely the direction of the flow reduces the numerical diffusion. However, its applicability is limited to the vertices storage and to a range of flow rate. The MWUS has better properties in term of stability but is much more affected by numerical diffusion. On an unstructured grid, the order of this scheme is relatively low considering that the refinement of the mesh did not affect significantly the precision of the results. In the case of an exahedral meshes the performance of the scheme is greatly increased when the mesh is aligned with the flow direction. The use of hybrid grids is to be considered when the flow can be predicted.

The resolution method is then applied to classic validation problems consisting of flow in square duct with strong curvature. The numerical results have given good agreement with experimental data with although some cases show important discrepancies. The weak link of the method come from the coupling between velocity and pressure. The fact of having constant element pressure added to the equation of movement doesn't give the scheme the capacity to reproduce strong gradient of pressure unless the grid is sufficiently refined.

Table des matières

Remerciements iv

Résumé v

Abstract vii

Table des matières ix

Liste des tableaux xiii

Listes des figures xiv

Liste des sigles et abréviations xix

Liste des notations xx

Introduction 1

Chapitre 1 Étude bibliographique 4

1.1 Méthodes numériques 4

1.2 Traitement de la convection et de la diffusion 5

1.2.1 Schémas d'ordre un 7

1.2.2 Schémas d'ordre supérieur 9

1.2.3 Évaluation des schémas 10

1.3 Résolution du système d'équation 11

1.3.1 La méthode SIMPLE et ses dérivées 12

1.3.2 Méthode multigrille et couplage des équations 14

1.3.3 Schémas en collocation 15

Chapitre 2 La méthode des volumes finis et l'environnement VF^{++} **17**

2.1 La méthode des volumes finis 18

2.1.1 L'équation de transport 18

2.1.2 Formulation de la méthode 20

2.2 L'environnement VF^{++} 22

2.2.1 L'interface géométrique 23

2.2.2 L'interface numérique 29

Chapitre 3 Modélisation et méthode de résolution **37**

3.1 Équations de Navier-Stokes 38

3.1.1 Forme primitive 39

3.1.2 Adimensionnement 40

3.1.3 Intégrale de surface 40

3.2 Discrétisation du domaine 42

3.2.1 Volumes de contrôle 42

3.2.2 Stencil de reconstruction 45

3.3 Discrétisation de l'équation de mouvement 47

3.3.1 Calcul du flux $\boldsymbol{J}$ avec le schéma FOUS 50

3.3.2 Calcul du flux $\boldsymbol{J}$ avec le schéma MWUS 54

3.3.3 Assemblage de l'équation de mouvement 57

3.3.4 Traitement des conditions frontières 58

3.4 Discrétisation de l'équation de continuité 60

3.4.1 Équation de pression 61

3.4.2 Équations de correction 63

3.4.3 Traitement des conditions frontières 66

3.5 Résolution du système d'équation 67

3.6 Algorithme de résolution SIMPLER 67

Chapitre 4 Validation **69**

4.1 Le problème de convection pure 70

4.2 Le problème de Smith et Hutton 83

4.3 Test de l'écoulement dans un tube de section carré 95

4.4 Remarques 106

Chapitre 5 Applications **107**

5.1 Écoulement dans un canal avec coude à **90°** 107

5.2 L'écoulement de Dean 120

5.3 Synthèse 126

Conclusion **128**

Bibliographie **134**

Liste des tableaux

Tableau 4.1 Volumes de contrôle et stockage 73

Tableau 4.2 Ordre de l'erreur 76

Tableau 4.3 Résultats des calculs, $\theta = 15.8°$ 79

Tableau 4.4 Résultats des calculs, $\theta = 35.3°$ 79

Tableau 4.5 Influence de la géométrie sur MWUS, maillage 11x11x11 . . 81

Tableau 4.6 Ordre de l'erreur, raffinement selon l'axe X 102

Tableau 4.7 Ordre de l'erreur 102

Listes des figures

Figure 2.1 Discrétisation des volumes de contrôle 21

Figure 2.2 Interaction des modules de $\boldsymbol{VF}^{++}$ 22

Figure 2.3 Transformation du maillage initial 23

Figure 2.4 Entités topologiques 24

Figure 2.5 Volumes de contrôle 2D sur des polygones 25

Figure 2.6 Volumes de contrôle 3D sur des tétraèdres 26

Figure 2.7 Propriétés des bords 27

Figure 2.8 Stencils du protocole un 28

Figure 2.9 Stencils du protocole deux 28

Figure 2.10 Autres stencils de reconstruction possible 29

Figure 2.11 Structure de *vfSolver* 30

Figure 2.12 Maillage utilisé pour la résolution d'un Laplacien 33

Figure 2.13 Structure de données pour la résolution d'un Laplacien 33

Figure 3.1 Emplacement des variables 43

Figure 3.2 Bords des volumes des contrôles 44

Figure 3.3 Stencils de reconstruction pour la vitesse 45

Figure 3.4 Domaine de validité de la fonction d'interpolation selon le type de stockage 46

Figure 3.5 Stencils de reconstruction pour la pression 47

Figure 3.6 Intégration de l'équation de convection-diffusion 49

Figure 3.7 Système local et global de coordonnées 50

Figure 3.8 Calcul du flux massique 54

Figure 3.9 Couplage vitesse-Pression 61

Figure 3.10 Intégration de l'équation de continuité 62

Figure 4.1 Géométrie de base 71

Figure 4.2 Conditions frontières 71

Figure 4.3 Maillage 5x5x5 72

Figure 4.4 Volumes de contrôle 72

Figure 4.5 Exemples de solution, courbes iso-concentration 74

Figure 4.6 Profil de concentration pour différents schémas, $\theta = 15.8°$ . . . 80

Figure 4.7 Profil de concentration pour différents schémas, $\theta = 35.3°$ . . . 80

Figure 4.8 Influence de la géométrie sur MWUS, $\theta = 35.3°$ 81

Figure 4.9 Influence de la géométrie sur MWUS, $\theta = 18.4°$ 82

Figure 4.10 Influence de la géométrie sur MWUS, $\theta = 0°$ 82

Figure 4.11 Géométrie du problème de Smith et Hutton 84

Figure 4.12 Extension en trois dimensions 85

Figure 4.13 Stockage VCCV, schéma MWUS, Reynolds 1000 86

Figure 4.14 Maillage 20x9x9, Stockage *FCCV*, Reynolds 10 89

Figure 4.15 Maillage 30x15x15, Stockage *VCCV*, Reynolds 10 89

Figure 4.16 Comparaison des schémas à Reynolds 10 90

Figure 4.17 Comparaison des schémas à Reynolds 100 90

Figure 4.18 Comparaison des schémas à Reynolds 1000 91

Figure 4.19 Comparaison des schémas à Reynolds 10^6 91

Figure 4.20 Maillage 20x9x9, Stockage *VCCV*, Schéma MWUS 92

Figure 4.21 Maillage 30x15x15, Stockage *VCCV*, Schéma MWUS 92

Figure 4.22 Comportement de MWUS avec l'augmentation du nombre de Reynolds 93

Figure 4.23 Influence de la géométrie sur MWUS à Reynolds 1000 94

Figure 4.24 Influence de la géométrie sur MWUS à Reynolds 10^6 94

Figure 4.25 Géométrie du tube de section carré 96

Figure 4.26 Solution analytique de l'écoulement développé 97

Figure 4.27 Vitesse axiale en sortie, FCCV-MWUS 102

Figure 4.28 Vitesse axiale en sortie, VCCV-FOUS 103

Figure 4.29 Convergence du calcul, maillage 56x7x7, schéma FCCV, MWUS 103

Figure 4.30 Maillage concentré, 72x9x9 104

Figure 4.31 Vitesse axiale en sortie, maillage 72x9x9 104

Figure 4.32 Vitesse axiale en sortie, maillage 56x7x7 105

Figure 5.1 Géométrie du coude à 90° 108

Figure 5.2 Maillage tétraédrique de 5x5x40 109

Figure 5.3 Comparaisons des schémas à $\theta = 90°$, $z = 0.25$ 111

Figure 5.4 Profil de vitesse longitudinale 113

Figure 5.5 Profil de vitesse longitudinale 114

Figure 5.6 Profil de vitesse longitudinale 115

Figure 5.7 Profil de vitesse longitudinale 116

Figure 5.8 Distribution de la vitesse, $\theta = 60°$ 117

Figure 5.9 Champ de vitesse transversal à la section $\theta = 90°$ 118

Figure 5.10 Contour de pression à différentes sections 118

Figure 5.11 Convergence du calcul, maillage 7x15x50, FCCV, schéma MWUS119

Figure 5.12 Géométrie du problème de Dean 121

Figure 5.13 Maillage tétraédrique de 5x5x70 122

Figure 5.14 Visualisation de l'écoulement transversal, $\theta = 240°$ 124

Figure 5.15 Champ de vitesse transversal à la section $\theta = 240°$ 124

Figure 5.16 Distribution de la vitesse longitudinale, $Dean = 125$ 125

Figure 5.17 Distribution de la vitesse longitudinale, $Dean = 150$ 125

Liste des sigles et abréviations

CCCV	Cell Centered Control Volume
ECCV	Edge Centered Control Volume
FCCV	Face Centered Control Volume
FOUS	Flow Oriented Upwind Scheme
LUSS	LU Stockage Symétrique
MWUS	Mass Weighted Upwind Scheme
QUICK	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation
SIMPLER	SIMPLE Revised
SUDS	Skew Upwind Difference Scheme
UDS	Upwind Difference Scheme
VCCV	Vertex Centered Control Volume

Liste des notations

Caractères usuels

a	coefficient de discrétisation de l'équation de mouvement
c	coefficient de discrétisation de l'équation de continuité
E	facteur de relaxation
$\boldsymbol{f}$	force volumique
$\boldsymbol{J}$	flux de convection-diffusion
l	longueur de référence
$\dot{m}$	débit massique
$\boldsymbol{n}$	normale sortante du bord d'un volume de contrôle
p	pression
Pe_Δ	nombre de Peclet local
Re	nombre de Reynolds
s	surface du bord
S^Φ	terme source de l'équation de transport de Φ
T	température
t	temps

U_∞	vitesse de référence
u, v, w	composantes de la vitesse
$\boldsymbol{V}$	vecteur vitesse
x, y, z	coordonnées cartésiennes
X, Y, Z	coordonnées locales

Caractères grecs

θ	angle de l'coulement par rapport au plan x-z
Φ	variable scalaire
$\tilde{\Phi}$	variable associée à un stencil de reconstruction
$\boldsymbol{\Phi}$	variable vectorielle
Γ^Φ	coefficient de diffusion de l'équation de transport de Φ
μ	viscosité
ρ	densité
σ	bord d'un volume de contrôle
$\sum$	symbole de sommation
τ	cisaillement à la paroi
$\boldsymbol{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuses
Ω	volume de contrôle
ξ	fonction d'interpolation exponentielle
ζ	constante de bdit

Indices et exposants

i, j, k	valeur nodale associée au noeud
m	nombre de bords
moy	valeur moyenne
n	numéro de l'itération, nombre d'éléments adjacents
nb	nombre de bords
nt	nombre de termes du stencil de reconstruction
O, P, Q	valeur nodale associée au bord
T	transposé
x, y, z	composantes selon le repère cartésien

Symboles

$\nabla\cdot$	gradient
∇	divergence
$\otimes$	produit tensoriel
$\{\ \}$	vecteur
$[\ \ ]$	matrice
$\|\ \|$	norme

Introduction

La simulation numérique a connu un essor considérable depuis le développement des ordinateurs et aujourd'hui la conception de la plupart des systèmes complexes se fait avec l'aide de la modélisation. Le besoin de développer des logiciels de simulation robustes et efficaces est donc essentiel. La modélisation numérique permet de prédire le comportement des paramètres physiques nécessaires à l'amélioration et à l'optimisation des systèmes. Elle permet aussi de réduire les temps de conception et les coûts d'expérimentation.

La simulation des écoulements occupe une place importante dans le monde de la modélisation et c'est pourquoi beaucoup d'efforts ont été mis dans la recherche de méthodes numériques pour la résolution des équations de transport. Ce travail s'inscrit dans le cadre de la généralisation de la méthode des volumes finis et se veut une poursuite de la recherche effectuée par ABANTO (1997c). L'objet de son étude consistait à implanter de manière générique les principes de base de la méthode des volumes finis. C'est en ce sens qu'un environnement informatique appelé $\boldsymbol{VF}^{++}$ a été développé. L'essence et l'originalité de cet environnement reposent sur le fait que n'importe quel modèle mathématique utilisant les équations de transport peut potentiellement être développé avec $\boldsymbol{VF}^{++}$. Pour ce faire, l'environnement met à profit la

souplesse de la méthode des volumes finis en terme de choix de topologie de volumes de contrôle et de choix pour le schéma de discrétisation des équations. La souplesse et la puissance de cet environnement informatique permettent donc le développement rapide de nouvelles applications. ***VF***$^{++}$ a été concue suivant une approche orientée objet et programmé en C++.

La présente recherche a pour but de contribuer au développement et à la généralisation de la résolution des équations de Navier-Stokes utilisant l'environnement ***VF***$^{++}$. Pour ce faire, l'adaptation du schéma de volumes finis utilisant un maillage de volumes de contrôle décalé, développé par RIDA (1993), a été réalisée et le schéma étendu à trois dimensions.

Dans ce travail, les écoulements modélisés sont permanents, laminaires et incompressibles. Les équations tridimensionnelles de Navier-Stokes sont formulées en variables primitives (u, v, w, p). La discrétisation des équations se fait avec des maillages non structurés sur des éléments tétraédriques. Deux variantes utilisant des volumes de contrôle différents sont comparées. Dans la première variante, les composantes de la vitesse sont localisées aux faces du tétraèdre alors que dans la seconde variante, les composantes de la vitesse sont stockées aux sommets. Le stockage de la pression se fait aux centre des tétraèdres pour pour les deux variantes. La discrétisation des termes de convection et de diffusion des équations se fait à l'aide de deux fonctions d'interpolation. La première est basée sur la fonction exponentielle (FOUS) de BALIGA et PATANKAR (1983) et la deuxième est la fonction d'interpolation basée sur la pondération par la masse (MWUS) de SCHNEIDER et RAW (1986). Ces fonctions d'interpolation ont été implantées de manière générique et s'appliquent à différentes configurations de volumes de contrôle. La généralisation du schéma MWUS pour des cas tridimensionnels a dû être développée et sera décrite en détail. La résolution des

équations se fait par la méthode SIMPLER de PATANKAR (1981). La résolution de la vitesse est donc découplée avec la pression. Chaque variable scalaire est résolue implicitement et l'inversion de la matrice se fait à l'aide d'une méthode de décomposition LU développée pour les matrices creuses. Les calculs sont effectués avec des variables adimensionnelles.

La structure du mémoire est la suivante. Le chapitre 1 contient une revue bibliographique des outils numériques développés pour la résolution des équations de Navier-Stokes en mode stationnaire incompressible. Le chapitre 2 porte sur la modélisation par la méthode des volumes finis et fait la présentation de $\boldsymbol{VF}^{++}$ comme outil générique de résolution des équations de transport. Le chapitre 3 se consacre aux aspects mathématiques de la modélisation des équations de Naviers-Stokes et à l'implantation dans $\boldsymbol{VF}^{++}$ du schéma développé par RIDA (1993). Les techniques de discrétisation et de résolution du système d'équation sont introduites. La généralisation du schéma MWUS en trois dimensions est présentée. Dans le chapitre 4, le modèle est appliqué sur quelques cas tests simples permettant de vérifier le bon fonctionnement du résoluteur et de mesurer la diffusion numérique des schémas FOUS et MWUS. On utilise pour cela des problèmes possédant une solution analytique connue. Au chapitre 5, le modèle est testé sur des problèmes classiques et comparé à des mesures expérimentales disponibles dans la littérature. En conclusion, un regard critique est posé sur l'environnement $\boldsymbol{VF}^{++}$ et plusieurs axes de recherche sont proposés. En ce qui concerne les modèles utilisés, des suggestions sont faites pour l'amélioration de la précision des schémas.

Chapitre 1

Étude bibliographique

Le but de ce chapitre est de faire un survol des différentes techniques numériques élaborées au cours des deux dernières décennies pour la résolutions des équations de convection-diffusion. Les méthodes présentées sont celles qui ont été développées pour résoudre les équations de Navier-Stokes en régime laminaire, incompressible et stationnaire bien que certaines techniques proviennent de méthodes utilisées pour la résolution des équations d'Euler. Les modèles abordés sont ceux qui touchent particulièrement les applications en volumes finis.

1.1 Méthodes numériques

Les problèmes d'écoulement de fluides et de transfert de chaleur sont gouvernés par des principes de conservation de la masse, du mouvement et de l'énergie. Ces principes sont traduits mathématiquement par des équations de transport qui prennent la forme générale d'une équation de convection diffusion avec terme source.

Pour la majorité, les méthodes numériques utilisées dans la simulation des phénomènes de convection-diffusion sont les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Ces méthodes ont connu un essor considérable depuis leur mise en œuvre et d'importantes recherches ont été entreprises pour améliorer la discrétisation des équations et optimiser la résolution du système d'équation.

Le but d'une méthode numérique est l'obtention des valeurs de variables telles que la vitesse, la pression et la température à un certain nombre d'endroits appelés nœuds, points ou volumes de contrôle. Ces valeurs proviennent d'équations algébriques ou équations discrétisées qui sont issues des équations de transport. La précision des la résolution dépend du modèle choisi pour la discrétisation. Certaines règles, définies dans PATANKAR (1980), doivent être observées lors de la discrétisation des équations afin d'obtenir un système algébrique cohérent.

1.2 Traitement de la convection et de la diffusion

La principale considération dans la discrétisation des équations est la formulation des termes de convection et de diffusion. Une des difficultés dans la construction des fonctions d'interpolation est d'inclure toutes les propriétés physiques des équations de transport. Dans un problème de convection-diffusion, une quantité scalaire est transportée par convection avec le fluide et le gradient de cette quantité cause un transport par diffusion. La valeur du scalaire transporté peut donc changer de façon non linéaire parallèlement et perpendiculairement à l'écoulement. Le régime entre les deux flux et la géométrie du domaine détermine l'allure de l'écoulement. La discrétisation doit s'approcher le plus possible des propriétés physiques pour pouvoir refléter un com-

portement réel de l'écoulement. On observe par exemple que beaucoup de schémas numériques deviennent instables à haut régime. Le traitement du flux de convection, particulièrement pour des écoulements dominés par ce phénomène, joue un rôle crucial en ce qui concerne la stabilité d'un schéma numérique. La possibilité d'obtenir une solution qui a convergé dépend de la formulation des fonctions d'interpolation.

Il est reconnu que la convection est un phénomène asymétrique. Les conditions en amont ayant plus d'influence que celles en aval, il est essentiel que le schéma de discrétisation reflète cette réalité. D'un autre coté, des schémas simples de discrétisation en amont causent d'importantes erreurs de diffusion numérique dans des cas multidimensionnels. Cela se produit en particulier lorsque le maillage n'est pas aligné avec l'écoulement. Si la solution est affectée par une trop grande diffusion numérique, les résultats peuvent masquer la diffusion physique du modèle.

Il est de plus souvent impossible de raffiner suffisamment le maillage pour que les erreurs numériques soient réduites à un niveau acceptable. Il est donc nécessaire de discrétiser les flux de convection et de diffusion de façon à obtenir un système stable et convergent tout en utilisant un maillage raisonnable.

Les premiers schémas à avoir été développés sont le 'Central Difference Scheme', le 'Upwind Difference Scheme' (UDS, COURANT *et al.* (1952)), le 'Exponential Difference Scheme' (EDS, SPALDING (1972)) et le 'Power Law Difference Scheme' (PLDS, PATANKAR (1980)). LEONARD et DRUMMOND (1995) ont fait une analyse exhaustive de ces schémas. L'insuffisance de ces méthodes en termes de précision et de convergence, ont nécéssité la recherche de nouveaux schémas.

1.2.1 Schémas d'ordre un

Plusieurs nouvelles approches se sont basées sur le concept de RAITHBY (1976b) dans lequel la direction de l'écoulement est utilisée pour modéliser la convection (SUDS: Skew Upwind Difference Scheme). Dans cette formulation, la diffusion est évaluée à l'aide d'un schéma centré du deuxième ordre et la convection est estimée par un schéma du premier ordre dans la direction de l'écoulement, ce qui atténue le problème de diffusion artificielle. LILLINGTON (1981) reprend ce concept et y ajoute l'influence du terme source. SCANLON *et al.* (1993) font l'extension en trois dimensions du schéma. Un des problèmes de cette approche est qu'elle génère parfois des coefficients négatifs lors de la discrétisation des équations, qui peuvent conduire à une divergence de la solution. Un des désavantages de cette méthode est qu'elle n'est applicable qu'à des maillages structurés, ce qui limite son usage.

Une nouvelle méthode inspiré du schéma SUDS a été proposée par BALIGA et PATANKAR (1980). Elle repose sur la solution unidimensionnelle d'une équation de convection-diffusion basée sur le vecteur vitesse local (FOUS: Flow Oriented Upwind Scheme). La reconstruction est non linéaire dans le sens de l'écoulement et linéaire dans le sens perpendiculaire à l'écoulement. Un des avantages de cette méthode est qu'elle peut s'appliquer à des maillages non structurés pour des éléments triangulaires et quadrilatéraux en deux et trois dimensions. PRAKASH (1986) et HOOKEY *et al.* (1988a) reprennent cette formulation en ajoutant l'influence d'un terme source dans la direction parallèle et perpendiculaire à l'écoulement. Le fait d'ajouter un terme source permet d'utiliser un schéma en collocation (collocated scheme) en évitant le problème de pression en damier. Ces schémas réduisent sensiblement le problème de diffusion artificielle mais souffrent également de la présence de coefficients négatifs

dans le cas de certaines configurations géométriques et découlements à haut régime. Plus récemment, WIROGO et RAJAGOPALAN (1992a) proposent une nouvelle modification qui prend en compte la non-linéarité des écoulements perpendiculaires à l'écoulement en plus des termes sources.

Pour pallier au problème des coefficients négatifs de SUDS, un autre modèle a été développé par HASSAN *et al.* (1983) puis adapté à la méthode des volumes finis par SCHNEIDER et RAW (1986). Il s'agit d'une technique de différenciation en amont basée sur une pondération par la masse dans le sens de l'écoulement (MWUS: Mass Weighted Upwind Scheme). Cette procédure assure au niveau élémentaire que les approximations algébriques de la convection contribuent positivement aux coefficients des équations discrétisées. La diffusion est calculée à l'aide d'un schéma centré. Cette formulation élimine les oscillations et facilite la convergence mais augmente, à un degré moindre, la diffusion numérique. Ce schéma est moins précis que FOUS car il ne prend pas en compte aussi fidèlement la direction de l'écoulement. Cette approche a été reprise et développé par plusieurs chercheurs (SAABAS, 1991), (SAABAS et BALIGA, 1994a).

Avec la méthode des éléments finis, BROOKS et HUGHES (1982) ont développé un schéma basé sur les lignes de courant (SUPG: Streamline Upwind Petrov Galerkin). Le principe de base de cette méthode est d'ajouter une perturbation aux fonctions d'interpolation de la méthode standard de Galerkin. Cette perturbation prend la forme d'un terme de diffusion et agit dans la direction de l'écoulement ce qui donne plus de poids aux nœuds en amont. RICE et SCHNIPKE (1985) ont démontré comment la méthode SUPG peut être appliquée de façon à éliminer les oscillations. SWAMINATHAN et VOLLER (1992a) ont adapté ce schéma à la méthode des volumes finis.

1.2.2 Schémas d'ordre supérieur

D'autres approches sont basées sur des schémas d'ordre supérieur. L'idée qui sous-tend ces schémas est qu'une meilleure fonction d'interpolation représente plus fidèlement les propriétés physiques des équations de transport. LEONARD (1979) a développé un schéma en amont du deuxième ordre (QUICK: Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) qui calcule la convection du scalaire en utilisant deux nœuds en amont et un en aval. Cette méthode permet de diminuer fortement la diffusion numérique mais en retour produit des oscillations près de gradients importants. Ce comportement, propre aux schémas d'ordre supérieur, peut causer d'importantes erreurs et parfois faire diverger la solution (LI et RUDMAN, 1995). Une attention particulière doit être portée à l'extrapolation des conditions frontières. Plusieurs améliorations à ce schéma ont été apportées pour en améliorer la précision et la convergence (HAYASE *et al.*, 1992). À l'instar du schéma SUDS, cette méthode n'est applicable qu'à des maillages structurés.

Les schémas d'ordre supérieur sont affectés d'un terme d'erreur dispersif causant les oscillations. L'utilisation de ces schémas implique donc un compromis entre précision et stabilité car pour assurer la convergence de la solution, un mécanisme de lissage diffusif est employé ce qui augmente la diffusion numérique (LEONARD et DRUMMOND, 1995).

Un des mécanismes utilisés consiste à corriger le flux de convection (FCT: Flux Corrected Transport) par un terme de diffusion pour amortir les oscillations (DARWISH, 1993). La détermination du facteur de lissage, basé sur le comportement local de la solution, est critique pour l'obtention d'une solution. L'application de cette méthode est limitée car il est difficile de trouver un facteur optimal et la résolution

se fait à un coût informatique élevé.

Un autre mécanisme utilisé pour le contrôle des oscillations est l'approche composite 'flux limitors'. Celle-ci s'inspire de la famille des schémas pour la capture de choc (TVD: Total Variationnal Diminishing flux limitors), utilisée pour les équations d'Euler où les minima et maxima de la solution sont supprimés (LI et RUDMAN, 1995). Le flux numérique à l'interface des volumes de contrôle est modifié par un limiteur de flux qui renforce le critère de monotonicité (boundedness criteria).

D'autres schémas basés sur le calcul des équations d'Euler ont été développés. La méthode de répartition des flux (FDS: Flux Difference Splitting) est utilisée par VON LAVANTE (1990), DICK et LINDEN (1992) et OOSTERLEE et RITZDORF (1986). L'introduction d'un terme de dissipation artificiel atténue les oscillations. En contrepartie, des mesures de stabilisation doivent être introduites ce qui affecte la précision de la solution.

Une méthode de pseudo-compressibilité est utilisée dans LIN et SOTIROPOULOS (1997). En ajoutant un terme de pression instationnaire dans l'équation de continuité, les équations de Navier-Stokes en régime incompressible peuvent être abordées avec des méthodes permettant de résoudre les équations d'Euler. Une des difficultés de cette approche est d'obtenir la conservation de la masse.

1.2.3 Évaluation des schémas

Face à une telle variété de schémas pour la formulation de la convection-diffusion, plusieurs travaux ont tenté des les comparer. SMITH et HUTTON (1982) ont examiné les résultats d'une vingtaine de groupes pour un problème standard dans

lequel un écoulement spécifié faisait un virage de 180 degrés. SHYY (1983) compare les résultats de cinq schémas du premier et deuxième ordre. PATEL *et al.* (1985) et PATEL et MARKATOS (1986) ont testé plusieurs modèles sur des problèmes unidimensionnels et bidimensionels. D'autres articles ont été présentés par PRAKASH (1987), VANKA (1987) et TSUI (1991). Les évaluations des schémas s'inspirant des méthodes d'Euler ont été faites par LI et RUDMAN (1995), LIN et SOTIROPOULOS (1997) et VON LAVANTE (1990). Un grand nombre de ces études sont peu concluantes et plusieurs divergent quant aux conclusions qui sont avancées.

Il est possible cependant de dégager deux tendances. Les schémas du premier ordre sont stables et bien bornés mais sont affectés de diffusion numérique de façon plus ou moins marquée. Les schémas d'ordre supérieur éliminent la diffusion numérique mais produisent des oscillations et peuvent diverger. Les récents schémas développés pour supprimer les oscillations ne sont pas encore satisfaisants. Le modèle parfait de discrétisation de la convection-diffusion n'a pas encore été trouvé.

1.3 Résolution du système d'équation

Une fois le modèle de discrétisation des termes de convection-diffusion des équations de transport choisi, la principale difficulté consiste au couplage des équations de mouvement et continuité. Dans la formulation des équations de Navier-Stokes, il faut résoudre les équations de mouvement sujettes à la contrainte de continuité. Le champ de pression s'ajuste de façon à ce que le champ de vitesse satisfaisant les équations de mouvement soit celui d'un fluide respectant la continuité. Le calcul de la pression passe alors par la contrainte de continuité. La difficulté vient du fait que la pression

n'apparaît pas explicitement dans l'équation de continuité.

Le traitement du couplage doit se faire de façon à empêcher une solution comportant un champ de pression en damier (Checkboard pressure field). Si on ne fait pas attention à la discrétisation dans le choix de la méthode de couplage, la solution du système d'équation peut admettre comme résultat un champ de pression en damier. PATANKAR (1980) cite le cas d'une discrétisation en différences finies où les vitesses et la pression sont localisées au même nœud de calcul. Il y démontre que la contribution de la pression à l'équation de mouvement est la même, que le champ de pression soit uniforme ou qu'il soit alterné sous la forme d'un damier.

Ce type de problème touche uniquement les méthodes numériques qui emploient une formulation en variables primitives. Le recours à la formulation vorticité-courant assure implicitement la contrainte d'incompressibilité et permet d'éviter ce problème. Cependant cette méthode comporte des inconvénients en ce qui concerne l'imposition des conditions frontières sur la vorticité.

Plusieurs méthodes ont donc été développées pour assurer le couplage des équations tout en évitant le problème de pression en damier. Les familles de méthodes abordées sont: SIMPLE, multigrille, couplage direct et schémas en collocation (collocated schemes). Les autres méthodes de couplage appartenant plus spécifiquement aux éléments finis et différences finies ne seront pas touchées.

1.3.1 La méthode SIMPLE et ses dérivées

Une des solutions aux problèmes de couplage des équations réside dans l'utilisation d'un schéma à maillage décalé. Dans un tel schéma, le stockage des vitesses est décalé

par rapport à celui de la pression, ce qui empêche le problème de pression en damier de survenir. L'idée de base est de construire une fonction d'interpolation pour la pression à l'aide de l'équation de continuité. Le schéma à maillage décalé a été utilisé par PATANKAR et SPALDING (1972) qui ont développé la méthode SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation). Plusieurs variantes ont depuis été faites afin d'améliorer la convergence du schéma. PATANKAR (1980, 1981) introduit la méthode SIMPLER (SIMPLE Revised) dans laquelle une équation supplémentaire pour la pression est résolue. Une autre variante, SIMPLEC (SIMPLE Consistant approximation) de VAN DOORMAAL et RAITHBY (1984), consiste à faire une sous-relaxation des corrections de vitesse et pression.

Ce type de schéma requiert l'utilisation de maillages différents pour la vitesse et la pression avec une superposition adéquate. L'équation de continuité est résolue avec le maillage de la pression et l'équation de mouvement avec le maillage des vitesses. La superposition des deux maillages permet de prendre directement les valeurs de vitesse et de pression aux nœuds sans avoir à les interpoler. Cette disposition a l'avantage de permettre une interprétation physique des termes intervenant dans les équations de transport. Sur l'équation de mouvement par exemple, la différence de pression entre deux nœuds est utilisée pour "forcer" les termes de vitesses.

Un des désavantages de cette méthode est que l'ordre du schéma pour la pression est moins élevé que celui pour la vitesse ce qui affecte la précision globale du schéma. Cette différence est causé par le décalage des volumes de contrôle qui donne un maillage plus grossier pour la pression que pour la vitesse.

1.3.2 Méthode multigrille et couplage des équations

Une autre façon d'effectuer le couplage est de résoudre la vitesse et la pression simultanément sur un nœud de contrôle. Cette approche mène à un schéma point par point qui converge très lentement, particulièrement sur des maillages fins. Vanka démontre que le couplage point par point utilisé avec la méthode multigrille abouti à une technique beaucoup plus efficace. L'algorithme de la méthode est présenté dans VANKA (1986b). Des applications en deux et trois dimensions sont présentées dans VANKA (1987, 1986c). Un des avantages de la technique multigrille est qu'elle permet de raffiner localement le maillage dans des régions de fort gradient (PHILLIPS et SCHMIDT, 1985). La méthode multigrille a aussi été utilisée pour des schémas de discrétisation d'ordre supérieur par GHIA *el al.* (1982).

D'autres techniques basées sur le couplage des équations ont été développées. La méthode 'Strongly Implicit Procedure' de STONE (1968), par exemple, a été utilisée par ZEDAN et SCHNEIDER (1985) pour résoudre la pression et la vitesse de manière couplée. Cette technique donne des résultats semblables à la méthode SIMPLE.

Plus récemment, avec le développement de la capacité des ordinateurs, plusieurs utilisent la résolution directe des équations couplées avec un résoluteur de matrice creuse. Cette méthode est attrayante pour des problèmes ayant un nombre modeste de nœuds mais reste difficilement accessible pour des maillages très fins car elle demande une quantité excessive de mémoire et de temps de calcul. Une analyse intéressante des méthodes itératives de résolution des matrices creuses est effectuée dans PAGE (1985).

1.3.3 Schémas en collocation

Si la méthode SIMPLE et ses dérivées ont permis de régler certains problèmes associés au couplage des équations, elles ont aussi leurs difficultés et inconvénients. Ces méthodes sont par exemple difficilement applicables pour des coordonnées curvilinéaires non-orthogonales. De plus, le décalage donne un maillage plus grossier pour la pression que pour la vitesse. La pression est donc interpolée par une fonction d'ordre moins élevé que la vitesse ce qui entraîne une diminution de la précision de toute la solution au maillage le plus grossier (PATANKAR, 1988). Ces inconvénients ont incité les chercheurs à développer une nouvelle méthode utilisant un seul maillage (schémas en collocation) tout en évitant le problème de pression en damier.

BALIGA et PATANKAR (1983) ont développé un schéma volumes finis en collocation dont la pression est calculée sur moins de nœuds que pour la vitesse. Le traitement de la pression par l'équation de continuité se fait de façon semblable à la méthode SIMPLE. PRAKASH et PATANKAR (1983) poursuivent l'idée et se servant des mêmes fonctions d'interpolation pour la vitesse et la pression, rendu possible en utilisant des fonctions plus complexes.

PRAKASH (1986) améliore la méthode en incorporant à la fonction d'interpolation FOUS un terme source. Le gradient de pression est incorporé dans le calcul de la vitesse de l'équation de mouvement ce qui empêche le problème de pression en damier de se manifester de manière directe. Une autre méthode de volumes finis à ordres égaux a été développée par SCHNEIDER et RAW (1987a). Une extension en trois dimensions pour des écoulements incompressible a été faite par SAABAS et BALIGA (1994a). Une synthèse des différents modèles existant a été publiée récemment par BALIGA (1996).

Les schémas en collocation apparaissent satisfaisants mais certains posent des problèmes. La convergence est plus difficile qu'avec le schéma décalé car les valeurs de pression et de vitesse doivent être interpolés aux interfaces. Dans le cas du schéma décalé, ces valeurs sont directement disponibles aux interfaces. Un bon facteur de relaxation doit être appliqué. Un autre problème concerne l'imposition des conditions frontières. Pour certains type d'écoulement, comme le cas des écoulements continus, la sur-spécification des conditions frontières peut causer des problèmes de convergence.

Chapitre 2

La méthode des volumes finis et l'environnement VF^{++}

La majorité des méthodes numériques utilisées pour la résolution d'équations différentielles partielles sont les différences finis, les éléments finis et les volumes finis. Dans ce travail, la méthode des volumes finis, largement utilisée en modélisation pour son interprétation physique simple et sa flexibilité, est abordée dans une perspective de généralisation.

Les codes scientifiques basés sur cette méthode ne profitent pas, en général, des multiples approches possibles qui peuvent être prises pour résoudre un problème. La flexibilité de la méthode s'exprime tant au niveau géométrique, en terme de configuration des volumes de contrôle et qu'au niveau numérique, par le choix des schémas utilisés pour la discrétisation des équations. Généralement, chaque configuration spécifique requiert un programme différent. Afin de combler cette lacune, des travaux de recherche sur la généralisation de la méthode des volumes finis ont été effectués

par ABANTO (1997c). Ses travaux ont abouti à la création d'un environnement informatique appelé $\boldsymbol{VF}^{++}$ qui intègre ce concept de souplesse de la méthode. L'approche orientée-objet a été utilisée pour la conception de $\boldsymbol{VF}^{++}$ qui a été programmé C++.

Ce chapitre présente la méthode des volumes finis en tant que technique générique permettant de résoudre les équations de transport. Par la suite, les principales caractéristiques de l'environnement $\boldsymbol{VF}^{++}$ sont présentées.

2.1 La méthode des volumes finis

2.1.1 L'équation de transport

La méthode des volumes finis est une technique de discrétisation des équations basée sur la formulation intégrale des équations aux dérivées partielles reformulées avec le théorème de la divergence. Les phénomènes de transport d'une propriété quelconque en mécanique des fluides sont gouvernés par les principes de conservation de la masse, du mouvement et de l'énergie. Cet ensemble de propriétés peut être représenté par une équation de transport scalaire générique dépendante du temps :

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\Phi\boldsymbol{V}) = \nabla\cdot\left(\Gamma^{\Phi}\nabla\Phi\right) + S^{\Phi} \tag{2.1}$$

où Φ est un scalaire représentant les diverses propriétés transportées (u, v, w, T, etc), $\boldsymbol{V}$ est le vecteur vitesse et ρ est la masse volumique. L'expression $\nabla\cdot(\rho\Phi\boldsymbol{V})$ représente un terme de transport par convection, $\nabla\cdot\left(\Gamma^{\Phi}\nabla\Phi\right)$ un flux de diffusion où Γ^{Φ} est le coefficient de diffusion et S^{Φ} exprime le terme source. Dans le cas où la diffusion de Φ ne serait pas gouverné par une relation linéaire, tous les termes qui n'utilisent pas l'expression du gradient sont inclus dans le terme source.

L'équation (2.1) peut être reformulée de la façon suivante:

$$\frac{\partial\,(\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J} \;=\; S^{\Phi} \tag{2.2}$$

avec $\boldsymbol{J} = \rho\Phi\boldsymbol{V} - \Gamma^{\Phi}\,\nabla\Phi$, le flux de convection et de diffusion de Φ.

En appliquant le principe de conservation dans un volume de contrôle fixe dans l'espace et en utilisant le théorème de la divergence de Gauss, l'équation (2.2) devient:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega} \rho\,\Phi\,d\Omega + \oint_{\sigma} \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}\;d\sigma \;=\; \int_{\Omega} S^{\Phi}\,d\Omega \tag{2.3}$$

où σ est le bord limitant le volume de contrôle Ω et $\boldsymbol{n}$ est le vecteur normal sortant associé à la frontière $d\sigma$. La variation de la propriété Φ dépend donc du *flux* net $\boldsymbol{J}$ traversant la frontière σ et du terme source. Ce principe est à la base de la méthode des volumes finis. La résolution des équations repose donc sur l'évaluation des flux aux interfaces des volumes de contrôle. Cette formulation des équations permet une interprétation physique simple d'un problème d'écoulement. Il n'y a pas de restriction concernant la géométrie des frontières des volumes de contrôle.

Si on considère le scalaire Φ et le terme source comme étant constant sur l'élément Ω, la discrétisation implicite de l'équation (2.3) sur un volume de contrôle Ω_i avec m bords frontière donne :

$$[(\rho\Phi)_i^{n+1} - (\rho\Phi)_i^{n}]\Omega_i + \sum_{j=1}^{m} \mathbf{J}_j^{n+1}\mathbf{n}_j\Delta s_j\Delta t \;=\; (S_i^{\Phi})^{n+1}\Omega_i\Delta t \tag{2.4}$$

Le stockage de la valeur de Φ se fait généralement au centre du volume de contrôle. L'évaluation des flux aux bords se fait à l'aide de fonctions d'interpolations basées sur les volumes de contrôle situés au voisinage du bord. Il n'y a pas de restriction

quant au nombre de volumes de contrôle utilisés pour le calcul de la fonction. Les schémas FOUS et MWUS sont des exemples de fonctions d'interpolation. Après un assemblage bord par bord des termes de flux, une formulation discrète de (2.4) est obtenue :

$$a_i\Phi_i^{n+1} - a_i^0\Phi_i^n + \sum_{k=1}^{n}(a_k\Phi_k^{n+1}) \quad = \quad b_i \tag{2.5}$$

où n dépend du nombre de volumes de contrôle Φ_k utilisé pour l'évaluation du flux à chaque bord. Les coefficients a_i,a_k dépendent du schéma utilisé pour les fonctions d'interpolation et b_i est un terme provenant de la linéarisation du terme source. Les solutions de ces équations satisfont la conservation locale et globale de l'équation de transport.

2.1.2 Formulation de la méthode

Le processus numérique de la méthode des volumes finis peut être divisé en quatre étapes consécutives. La *première étape* consiste en la discrétisation du domaine en volumes de contrôle. Les différentes configurations sont obtenues à partir du choix de l'emplacement du volume de contrôle par rapport à un maillage initial. En deux dimensions par exemple, les possibilités sont le stockage aux centres des éléments du maillage primaire (*CCCV: Cell Centered Control Volume*), le stockage aux arêtes des éléments (*ECCV: Edge Centered Control Volume*) et le stockage aux sommets des éléments (*VCCV: Vertex Centered Control Volume*). En trois dimensions, il faut aussi ajouter le stockage aux faces (*FCCV: Face Centered Control Volume*). Le choix du type de volume de contrôle à un impact sur la qualité de la solution (ABANTO *et al.*, 1998). Un code de volumes finis doit donc permettre de choisir la forme de stockage. La figure 2.1 montre un exemple de maillage primaire et de volumes de

contrôle en deux dimensions. Dans le premier cas, les volumes de contrôle sont construit autour des sommets (*VCCV*) du maillage primaire et dans le deuxième cas autour des arêtes (*ECCV*).

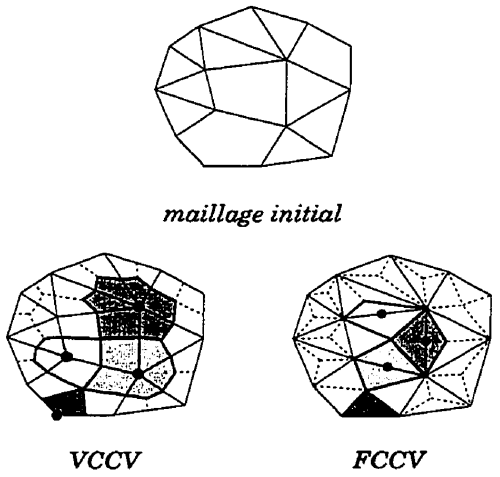


Figure 2.1: Discrétisation des volumes de contrôle

La *deuxième étape* comprend le calcul des flux de convection et de diffusion de la propriété Φ sur les bords de chaque volume de contrôle. Plusieurs schémas numériques peuvent être utilisés pour le calcul du flux J de convection et de diffusion. Il n'y a pas de restriction concernant le nombre de volumes de contrôle ou la méthode choisie pour le calcul de J. Seuls comptent la précision désirée et le phénomène physique traité. Cette caractéristique est un avantage de la méthode des volumes finis et cette flexibilité doit se retrouver dans l'implantation d'un code afin de trouver le schéma approprié pour un problème physique donné. Une fois les flux calculés, ceux-ci sont distribués de chaque coté des bords en respectant le principe de conservation du flux: ce qui entre doit être égal à ce qui sort. Les équations algébriques sont par la suite assemblées et le système matriciel résolu.

Deux caractéristiques importantes sont à retenir de la méthode des volumes finis:

la flexibilité quant au choix de discrétisation des volumes de contrôle et quant au choix du schéma pour la discrétisation des flux de convection et de diffusion. Cette flexibilité, lorsqu'implanté dans un code de volumes finis, permet d'améliorer la résolution des équations aux dérivées partielles.

2.2 L'environnement VF^{++}

La structure du système est faite de trois modules soit *vfParser, vfGeo* et *vfSolver.* Les deux premiers modules s'occupent de la partie géométrique et le dernier de la partie physique. *vfParser* interprète le maillage initial et envoie l'information au second module. *vfGeo* construit la topologie de volume de contrôle, prépare les stencils de reconstruction pour le calcul des fonctions d'interpolation et envoie la nouvelle topologie au module suivant. *vfSolver* discrétise et résout les équations de transport. Les trois systèmes interagissent selon la figure 2.2.

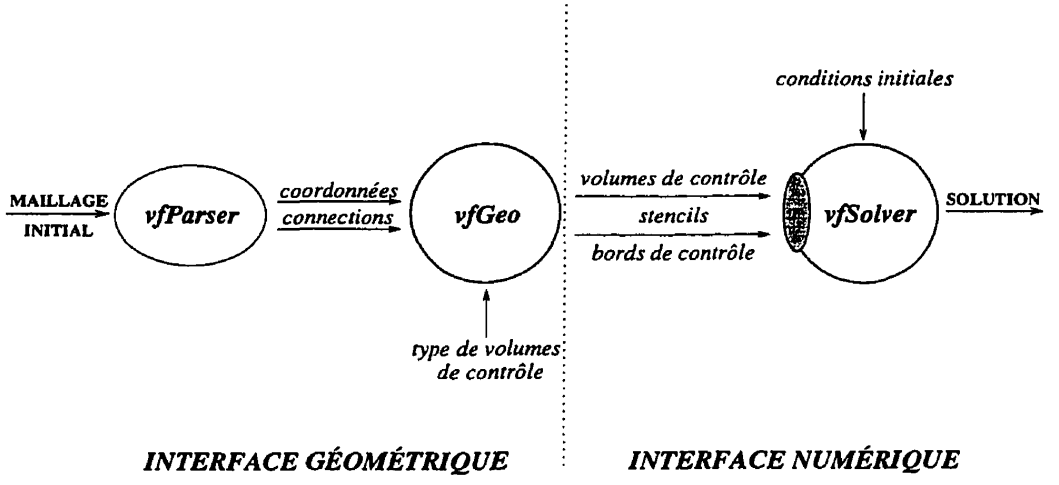


Figure 2.2: Interaction des modules de VF^{++}

Pour *implanter* efficacement une méthode générique de volumes finis et compte tenu du processus intrinsèque de la méthode, le travail effectué par $\boldsymbol{VF}^{++}$ a été séparé en deux étapes distinctes. La première étape consiste à construire l'environnement spécifique dont la méthode des volumes finis a besoin. Il s'agit véritablement d'un préprocesseur géométrique qui ne traite aucune information sur la nature physique du problème abordé. La seconde étape consiste en la discrétisation des équations en utilisant le support géométrique et la physique du problème. Cette partie gère aussi la résolution du système d'équations. L'aspect géométrique du problème est donc traité indépendamment de l'aspect physique des équations.

2.2.1 L'interface géométrique

Le but de l'interface géométrique est de construire l'environnement spécifique dont la méthode des volumes finis a besoin. Le maillage primaire, décomposé en entités élémentaires, est transformé en un maillage de volumes de contrôle. Cette transformation est illustrée à la figure 2.3.

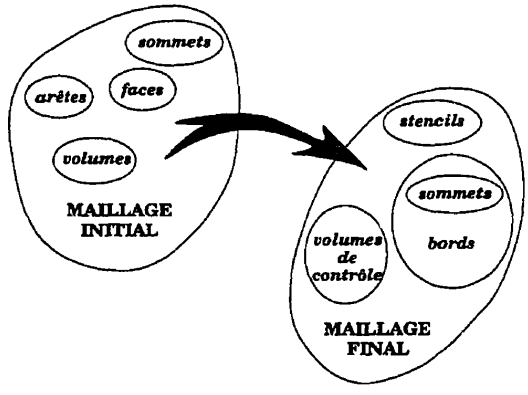


Figure 2.3: Transformation du maillage initial

Maillage initial

Le fichier contenant le maillage initial est lu et interprété par *vfParser*. Il doit être écrit suivant une syntaxe spécifique dont la description complète du format est disponible dans le guide de l'usager de ***VF***$^{++}$ (ABANTO, 1997b). Le fichier contient la position des points, leurs connections respectives et des codes indiquant les frontières. En deux dimensions, le maillage initial peut être fait de polygones de n'importe quel nombre de cotés. En trois dimensions, le maillage doit être constitué de tétraèdres, prismes ou hexaèdres. *vfParser* accepte plusieurs configurations d'éléments de base dans le même maillage (maillage hybride).

Les données sont ensuite envoyées à *VfGeo* qui décompose le maillage en entités topologiques élémentaires. Elles se répartissent en sommets, arêtes, faces et volumes et sont fixées au barycentre des éléments topologiques du maillage initial. Ces entités supporteront le passage du maillage primaire à celui des volumes de contrôle. La figure 2.4 donne un exemple d'entités élémentaires sur un maillage en deux dimensions.

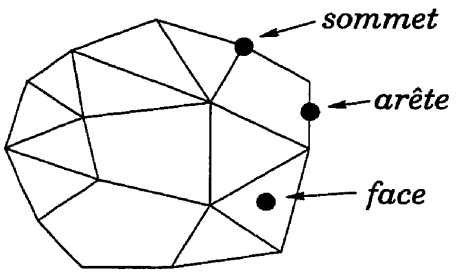


Figure 2.4: Entités topologiques

Maillage Final

Le nouveau maillage est construit en utilisant les entités élémentaires et leurs connections respectives. N'importe quel type de volume de contrôle peut être choisi. La discrétisation finale est composée de trois entités : volumes de contrôle, bords et stencils de reconstruction.

Un volume de contrôle est un polygone fermé ou un polyèdre convexe, dont les bords forment la frontière. Un stencil de reconstruction contient un ensemble de volumes de contrôle voisins et un ensemble de bords voisins. Il est important de noter que ces entités ne sont pas encore liées à une variable spécifique. La transformation du maillage est validée par plusieurs tests qui assurent la conservation du volume domaine original.

Le **volume de contrôle** est une entité très simple. La seule information qu'il contient est la position du centre et son volume. Le nom du volume de contrôle (*VCCV, ECCV, FCCV, CCCV*) provient de l'entité élémentaire autour de laquelle un volume de contrôle a été choisi. Les figures 2.5 et 2.6 montre quelques possibilités de volumes de contrôle en deux et trois dimensions.

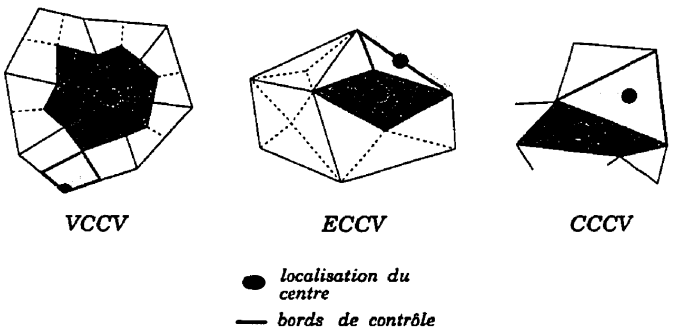


Figure 2.5: Volumes de contrôle 2D sur des polygones

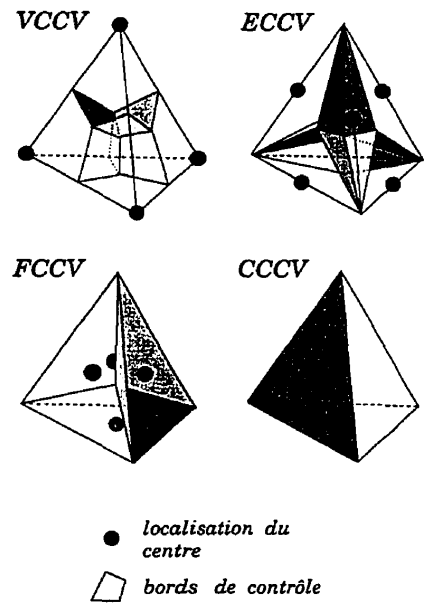


Figure 2.6: Volumes de contrôle 3D sur des tétraèdres

Le **bord** de contrôle est l'entité la plus importante dans la définition de la nouvelle géométrie. Ils discrétisent le domaine en volumes de contrôle. Un bord détient beaucoup d'informations. En plus de sa position, de sa taille et de sa normale, il pointe vers les volumes de contrôle adjacent définis comme *gauche* et *droit*. La normale du bord pointe toujours vers le volume de contrôle *droit* pour un bord intérieur et vers l'extérieur pour un bord frontière. Ces informations sont nécessaires pour assurer la distribution adéquate du flux $\boldsymbol{J}$ et s'assurer de la conservation de la propriété Φ sur le domaine. La figure 2.7 illustre les propriétés des bords.

La dernière entité créée par *vfGeo* est le **stencil de reconstruction**. L'objet de cette entité est de fournir les outils pour le calcul des flux de convection et de diffusion aux bords de contrôle. Cette entité contient un stencil intégral et un groupe de bords. Le stencil intégral est constitué d'un certain nombre de volumes de contrôle voisins

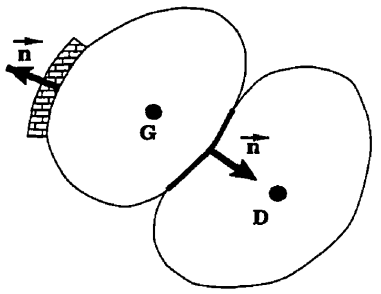


Figure 2.7: Propriétés des bords

qui seront utilisés pour calculer une *fonction d'interpolation* de Φ lors du calcul de $\boldsymbol{J}$. Le deuxième stencil contient des bords voisins qui utiliseront cette fonction. Pour des besoins pratiques, on associe un lieu de résidence aux stencils de reconstruction appelé $\tilde{\Phi}$ dont le lieu de résidence peut être *VCCV, ECCV, FCCV* ou *CCCV*. Les stencils de reconstruction couvrent tous les bords et tous les volumes de contrôle du domaine.

Il est possible d'imaginer une grande variété de combinaisons de stencils. La seule restriction est qu'un bord de contrôle ne peut faire partie que d'un seul stencil de reconstruction. Si cette condition n'est pas respectée, un bord peut avoir plusieurs fonctions d'interpolation et contribuer plusieurs fois au flux $\boldsymbol{J}$. Un volume de contrôle peut, quant à, lui faire partie de plusieurs stencils de reconstruction.

Dans la version actuelle de $\boldsymbol{VF}^{++}$, les combinaisons de stencils sont limitées à des configurations particulières appelées *protocoles*. La première configuration, la plus simple, contient deux volumes de contrôle et un bord. La figure 2.8 montre ce type de stencil pour deux volumes de contrôle différents.

Le deuxième protocole est plus élaboré. Le stencil de reconstruction est formé en utilisant les volumes de contrôle et les bords qui sont rattachés au polygone du

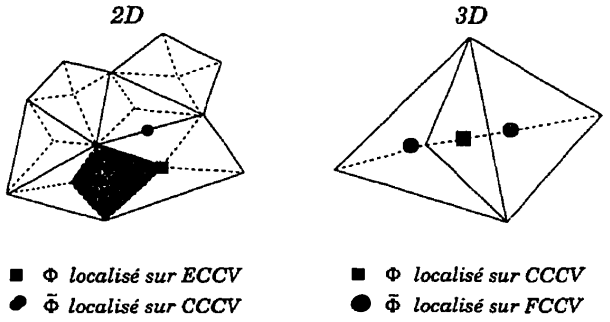


Figure 2.8: Stencils du protocole un

maillage original. La figure 2.9 montre le stencil obtenu pour deux volumes de contrôle différents.

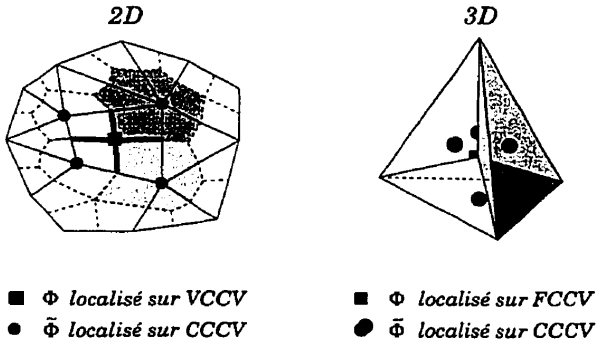


Figure 2.9: Stencils du protocole deux

Ces deux protocoles ont été choisis pour la facilité de leur implantation au niveau informatique. Il serait cependant possible de développer des algorithmes pour élaborer des combinaisons de stencils plus complexes. Un exemple de tels stencils est présenté à la figure 2.10.

Les trois entités créées forment l'environnement dont la méthode des volumes finis à besoin. Aucune information sur le maillage primaire n'est conservée. *VCCV, ECCV, FCCV* et *CCCV* ne sont plus que des étiquettes servant à identifier les volumes de contrôle. Il est possible de demander plusieurs configurations de volumes

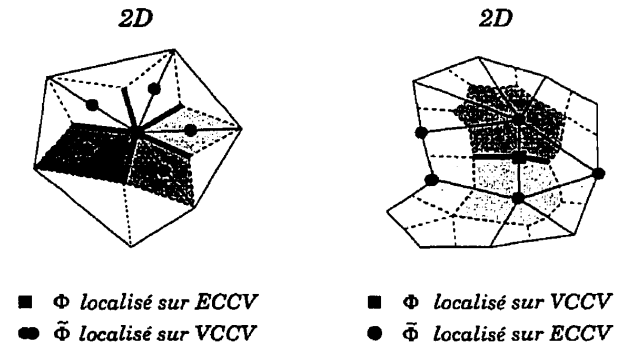


Figure 2.10: Autres stencils de reconstruction possible

de contrôle, bords et stencils en même temps dans le cas où, par exemple, le schéma numérique requérerait un maillage décalé. Une fois constituées, les entités sont transmises au module numérique pour la résolution des équations de transport.

2.2.2 L'interface numérique

La tâche de *vfSolver* est d'effectuer la discrétisation des équations de transport pour un problème spécifique. Le module numérique est schématisé par la figure 2.11. Le cœur du système s'occupe de créer et de gérer les structures de données et contrôle le flot d'informations. Le support opérationnel contient des méthodes génériques qui contrôlent le processus numérique de discrétisation des équations. Ce processus comprend entre autres le calcul des fonctions d'interpolation et la distribution des flux. Les applications sont en périphérie du système. Les applications regroupent divers processus numériques qui résolvent un problème particulier. L'approche orientée-objet fournit les méthodes nécessaires à une telle organisation hiérarchique.

Les deux couches internes peuvent être assimilées à des outils génériques dont un

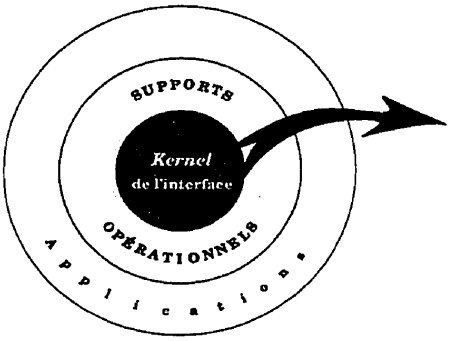


***Figure 2.11: Structure de** vfSolver*

agencement particulier est fait pour créer une application. $\boldsymbol{VF}^{++}$ est en ce sens un outil de travail qui facilite le développement d'applications de type volumes finis. Il existe présentement des applications pour la résolution des équations d'Euler et pour les équations de Navier-Stokes dont la généralisation en trois dimensions a fait l'objet de ce travail.

Cœur de l'interface

Le cœur du système s'occupe de la création et de la gestion des structures de données nécessaires à la résolution d'un problème donné. La mise en place de la structure de données passe par trois processus soit la création des variables, des volumes de contrôle et des inconnues. *Une variable est rattaché au problème, à l'équation à résoudre*, alors que *les inconnues sont associées aux volumes de contrôle sur le domaine.* À partir de cette approche, à une variable est associé une liste de volumes de contrôle qui couvrent le domaine. Chaque volume de contrôle contient une où plusieurs inconnues de variables différentes.

Variables et inconnues peuvent être classifiées selon la nature de leur stockage et le support mathématique associé. Il existe trois types de variables :

- **Variable scalaire**: Associé à un scalaire Φ appartenant à un type de volume de contrôle.
- **Variable vectorielle**: Associé à un vecteur $\mathbf{\Phi} = \{\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, ..., \Phi_n\}$ appartenant à un seul type de volume de contrôle.
- **Variable projection**: Associé à une variable de reconstruction. Ces variables servent au calcul des flux aux bords. Pour chaque variable scalaire ou vectorielle, une variable de reconstruction est créée. Ces variables sont classifiées en deux types : la variable projection scalaire ($\tilde{\Phi}$) et la variable projection vectorielle ($\tilde{\mathbf{\Phi}}$).

De même que pour les variables, les inconnues ont une classification biunivoque avec les variables auxquelles elles sont associées. Pour le i-ème volume de contrôle, cette classification est:

- **Inconnue scalaire**: Représentée par Φ_i. Elle a comme attributs principaux :
  - une valeur réelle
  - un type de conditions aux frontières
  - l'équation algébrique (2.5).
- **Inconnue vectorielle**: Représentée par $\mathbf{\Phi}_i$ et contenant une liste d'inconnue scalaire $\{\Phi_i^1, \Phi_i^2, \Phi_i^3, ..., \Phi_i^n\}$

- **Inconnue Projection**: les inconnues de projection sont divisées en deux types: inconnue projection scalaire ($\tilde{\Phi}_i$) et inconnue projection vectorielle ($\tilde{\mathbf{\Phi}}_i$). Elles contiennent l'information suivante :
  - un stencil de volumes de contrôle voisin servant à constituer une fonction d'interpolation de Φ_i
  - un stencil de bords où la fonction d'interpolation sera appliquée pour le calcul du flux de convection et de diffusion.

Le dernier processus est la création des *volumes de contrôle.* Ces éléments font le lien entre les variables et les inconnues. À chaque variable est associée une liste de volumes de contrôle et chaque volume de contrôle contient un ou des inconnues. Les autres attributs de ces éléments sont le lieu de résidence (*VCCV, ECCV, FCCV, CCCV*), sa position dans l'espace et sa taille.

Le fonctionnement de la structure de données s'illustre bien à l'aide d'un exemple simple représentant la résolution d'un Laplacien. L'équation à résoudre pour un tel problème est la suivante :

$$\oint_{\sigma} \nabla\Phi \cdot \mathbf{n} \ \ d\sigma = 0 \tag{2.6}$$

qui représente le calcul d'un flux de diffusion pure aux bords des volumes de contrôle. La variable à résoudre est une variable scalaire.

Le maillage utilisé dans ce cas-ci est un maillage triangulaire avec des volumes de contrôle centrés aux arêtes (*ECCV*). Le stencil de reconstruction choisi est centré à la face et utilise le protocole *deux.* Le maillage est illustré à la figure 2.12 :

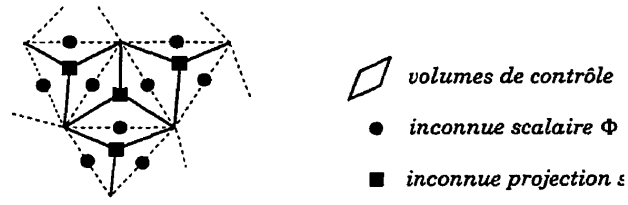


Figure 2.12: Maillage utilisé pour la résolution d'un Laplacien

Les entités construites sont donc : une variable scalaire Φ, une variable de reconstruction scalaire $\tilde{\Phi}$, deux listes de volumes de contrôle ECCV et CCCV et les inconnues associées. La figure 2.13 représente ces données.

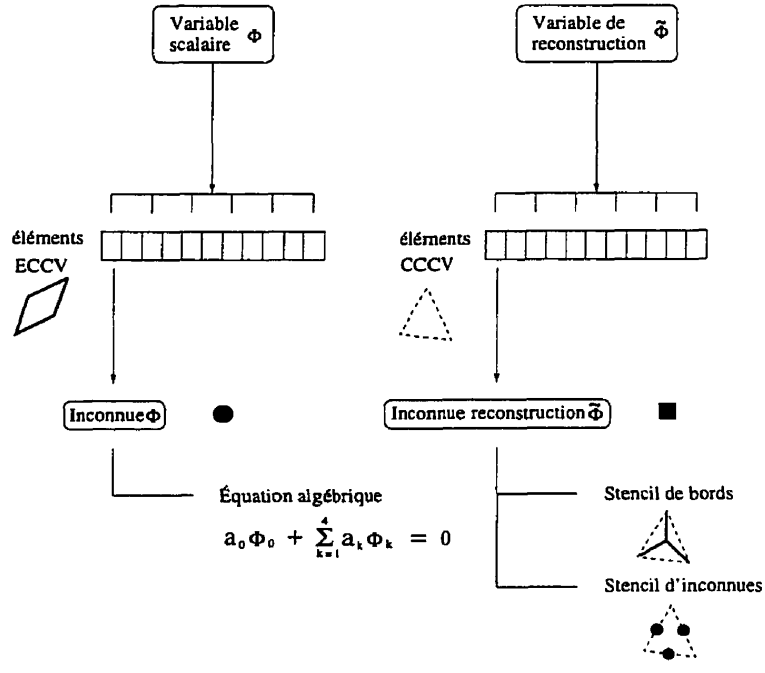


Figure 2.13: Structure de données pour la résolution d'un Laplacien

Support opérationnel

Le support opérationnel contient des outils génériques qui permettent le calcul des coefficients des équations algébriques. Les différents outils disponibles sont l'intégration des équations, le calcul des fonctions d'interpolation et la distribution des flux.

L'intégration des équations se fait en calculant une *matrice de flux* $\boldsymbol{J}$ pour chaque $\tilde{\Phi}$. Les rangées de cette matrice représentent les *bords* couverts par le stencil et les colonnes, les *coefficients* a_i des inconnues Φ_i du stencil de volume de contrôle. La matrice des flux représente la convection et la diffusion de Φ sur les bords.

La manière dont ces coefficients sont calculés dépend du nombre de volumes de contrôle utilisé dans le stencil et du schéma choisi pour l'interpolation. Il y a de multiples façons de construire une fonction d'interpolation. Les fonctions disponibles présentement sont celles qui ont été implantées pour la résolution des équations d'Euler et Navier-Stokes. Le développement de nouveaux schémas se fait facilement en utilisant les outils du cœur du système.

Le dernier outil important du support opérationnel est la distribution des flux. Une fois calculé, le flux aux bords doit être ajouté ou soustrait aux volumes de contrôle gauche et droit. Une distribution correcte du flux assure la conservation de Φ à travers le domaine.

Applications

Jusqu'à maintenant, deux applications ont été implantées dans $\boldsymbol{VF}^{++}$. Il s'agit de la résolution des équations de Navier-Stokes et des équations d'Euler.

La résolution des équations non-permanentes d'Euler en régime compressible utilisent le schéma de Roe pour le traitement de la convection. Les schémas du premier et second ordre sont disponibles pour les fonctions d'interpolation. Cette application utilise le stencil de reconstruction du protocole un, figure 2.8, qui contient deux volumes de contrôle et un bord. Ces équations peuvent être appliquées à une géométrie en deux et trois dimensions pour tous les types de volumes de contrôle.

La résolution des équations de Navier-Stokes incompressible et stationnaire utilise la stratégie SIMPLER pour le couplage des équations et les schémas en amont FOUS et MWUS pour le calcul des fonctions d'interpolations. Cette application utilise le stencil de reconstruction du protocole deux présenté à la figure 2.9. Les configurations des volumes de contrôle sont restreintes pour la vitesse à *VCCV* et *ECCV* en deux dimensions et *VCCV*,*FCCV* en trois dimensions. Pour la pression, la seule possibilité est *CCCV*.

Des tests préliminaires ont été faits auparavant afin de valider le code. Ils ont été implantés pour vérifier la conservation de la variable sur le domaine et pour analyser le comportement numérique du système. Les tests sont tirés de problèmes simples dont on connaît la solution comme par exemple la résolution d'un Laplacien et du problème de SMITH et HUTTON (1982).

Les principales caractéristiques de $\boldsymbol{VF}^{++}$ ont maintenant été présentées. Une implantation flexible de la méthode des volumes finis permet de mettre à profit les avantages qu'offre cette méthode. Du point de vue géométrique, les différentes configurations de volumes de contrôle et l'utilisation de maillages hybrides permet de réduire la diffusion numérique. Du point de vue numérique, la possibilité d'utiliser différents stencils de reconstruction permet le développement de schémas plus effi-

caces pour le calcul du flux $\boldsymbol{J}$ aux bords des volumes de contrôle. La structure du code permet aussi de modifier et de créer rapidement des applications. $\boldsymbol{VF}^{++}$ est donc un outil de travail qui facilite réellement le développement d'applications en volumes finis.

Chapitre 3

Modélisation et méthode de résolution

L'objectif de ce travail est de généraliser en trois dimensions l'application d'une méthode de résolution des équations de Navier-Stokes en utilisant l'environnement $\boldsymbol{VF}^{++}$. La méthode de résolution est basée sur la notion de maillage décalé et utilise les schémas d'interpolation FOUS et MWUS pour le calcul des flux de convection et de diffusion.

Les équations de Navier-Stokes sont utilisées dans des géométries tridimensionnelles pour modéliser des écoulements permanents, incompressibles, visqueux et laminaires. Les équations sont discrétisées selon une technique de volumes de contrôle décalés basée sur un algorithme de résolution développé par RIDA (1993). Cet algorithme constitue une extension de la méthode de PATANKAR (1980) aux maillages non-structurés. L'intégration des équations aboutit à une série de systèmes algébriques implicites qui sont résolus par une décomposition LU.

L'algorithme de résolution a été modifié par rapport à sa forme originale. Des problèmes de diffusion numérique et de conservation de masse sur le domaine ont entraîné une révision du schéma de RIDA (1993). L'introduction d'une troisième dimension a amplifié ces problèmes causés par l'emploi de maillages beaucoup plus grossiers que sur des géométries à deux dimensions. De la diffusion numérique se manifestait près des frontières entrée et sortie probablement due à une déficience dans le calcul du gradient de pression à ces endroits. De plus, le problème de conservation de masse rendait la convergence du schéma difficile. Le nouvel algorithme reprend fidèlement la méthode SIMPLER, qui avait été quelque peut modifiée. La reconstruction du gradient de pression a été abandonnée et remplacée par une différence de pression. Une étape de correction des vitesses a été ajoutée pour s'assurer de la conservation de la masse à chaque étape de calcul.

Ce chapitre examine en détails le modèle mathématique utilisé et le processus de discrétisation des équations par la méthode des volumes finis. Le tout est présenté dans l'optique d'une implantation dans l'environnement $\boldsymbol{VF}^{++}$.

3.1 Équations de Navier-Stokes

Les équations qui modélisent le comportement des fluides incompressibles visqueux et laminaires sont les équations de Navier-Stokes en régime permanent. Elles forment un système d'équations couplées qui expriment la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. L'équation d'énergie n'est pas résolue car les problèmes abordés sont isothermes. Les équations sont écrites en formulation primitive utilisant les variables de vitesse et de pression.

3.1.1 Forme primitive

Les équations de Navier-Stokes, lorsqu'intégrées sur un volume de contrôle fixe dans l'espace, prennent la forme suivante pour un fluide à masse volumique constante:

- équation de continuité :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{V} \, d\Omega \;=\; 0 \tag{3.1}$$

- équation de mouvement :

$$\int_{\Omega} \rho \nabla \cdot (\boldsymbol{V} \otimes \boldsymbol{V}) \; d\Omega \;=\; -\int_{\Omega} \nabla p \; d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \; d\Omega + \int_{\Omega} \rho \boldsymbol{f} \; d\Omega \tag{3.2}$$

où $\boldsymbol{V}$ est le vecteur vitesse, ρ est la masse volumique et p est la pression. $\boldsymbol{\tau}$ représente le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\boldsymbol{\tau} \;=\; \mu \left(\nabla \boldsymbol{V} + (\nabla \boldsymbol{V})^T \right) \tag{3.3}$$

et μ est le coefficient de viscosité dynamique qui est ici supposé constant. On peut écrire le terme visqueux de l'équation de mouvement à l'aide d'un laplacien vectoriel grâce à l'incompressibilité:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \;=\; \mu \nabla^2 \boldsymbol{V} \tag{3.4}$$

Le terme $\boldsymbol{f}$ représente une force volumique qui peut être associé à la force due à la gravité ou à des forces magnétiques. Dans la présente étude, ce terme est considéré nul.

3.1.2 Adimensionnement

On rend généralement les équations sans dimension en rapportant chaque quantité à sa valeur de référence. Dans notre cas, la viscosité et la masse volumique du fluide sont constantes et la longeur l ainsi que la vitesse U_∞ de référence sont celles définies en fonction de la géométrie. Avec ces dimensions, le nombre de Reynolds traduisant le rapport des effets convectifs sur les effets visqueux est défini par:

$$Re = \frac{\rho U_\infty l}{\mu} \tag{3.5}$$

Les équations de Navier-Stokes écrites en variables adimensionnées deviennent:

$$\int_\Omega \nabla \cdot \boldsymbol{V} \, d\Omega = 0 \tag{3.6}$$

$$\int_\Omega (\boldsymbol{V} \cdot \nabla) \, \boldsymbol{V} \, d\Omega = -\int_\Omega \nabla p_s \, d\Omega + \int_\Omega \frac{1}{Re} \nabla^2 \boldsymbol{V} \Omega \tag{3.7}$$

avec $p_s = p \,/\, \rho U_\infty^2$ que l'on notera par p pour alléger la notation.

3.1.3 Intégrale de surface

Le théorème de la divergence de Gauss permet de réécrire le système d'équations sous la forme d'une intégrale de surface nécessaire à la méthode des volumes finis. Le système d'équations prend alors la forme suivante :

$$\oint_\sigma \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma = 0 \tag{3.8}$$

$$\oint_\sigma \boldsymbol{V}(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \, d\sigma = -\int_\Omega \nabla p \, d\Omega + \oint_\sigma \frac{1}{Re} \nabla \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma \tag{3.9}$$

Les équations sont résolues dans le repère cartésien (x, y, z). Les composantes du vecteur vitesse associées à ces directions sont respectivement u, v et w. Les équations scalaires s'écrivent finalement sous la forme suivante:

-équation de continuité :

$$\oint_\sigma \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma \;=\; 0 \tag{3.10}$$

-équation de mouvement suivant x :

$$\oint_\sigma u \, (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \; d\sigma \;=\; -\int_\Omega \frac{\partial p}{\partial x} \; d\Omega + \oint_\sigma \frac{1}{Re} \, (\nabla u \cdot \boldsymbol{n}) \;\; d\sigma \tag{3.11}$$

-équation de mouvement suivant y :

$$\oint_\sigma v \, (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \; d\sigma \;=\; -\int_\Omega \frac{\partial p}{\partial y} \; d\Omega + \oint_\sigma \frac{1}{Re} \, (\nabla v \cdot \boldsymbol{n}) \;\; d\sigma \tag{3.12}$$

-équation de mouvement suivant z :

$$\oint_\sigma w \, (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \; d\sigma \;=\; -\int_\Omega \frac{\partial p}{\partial z} \; d\Omega + \oint_\sigma \frac{1}{Re} \, (\nabla w \cdot \boldsymbol{n}) \;\; d\sigma \tag{3.13}$$

Dans ces équations, on aura reconnu les termes génériques de l'équation de transport. Le flux de convection de l'équation de mouvement suivant la direction x correspond à $u\boldsymbol{V}$, le flux de diffusion à $\frac{1}{Re}\nabla u$ et le terme source de pression à $\partial p \,/\, \partial x$. Dans le cas de l'équation de continuité, seul le terme de convection est présent.

Les équations sont appliquées aux volumes de contrôle du domaine. Pour chacun de ceux-ci, il y a quatres équations à résoudre pour quatres scalaires à déterminer (u, v, w, p). Chaque équation est donc associée à une variable. La pression est une variable qui n'apparaît pas directement dans l'équation de continuité. Il faut donc dégager une équation pour la pression à partir de la continuité. La signification mathématique de la pression s'apparente à celle des multiplicateurs de Lagrange où la pression s'ajuste

de façon à ce que le champ de vitesse satisfaisant les équations de mouvement respecte la contrainte d'incompressibilité. Dans cet ordre d'idée, PATANKAR (1980) propose de résoudre les équations de continuité et de mouvement sur des volumes de contrôle différents. Le premier maillage sert à la discrétisation de l'équation de mouvement pour la résolution de la vitesse et le deuxième à la discrétisation de l'équation de conservation de la masse pour la résolution de la pression. Un des avantage du décalage des volumes de contrôle est que la pression peu être utilisé directement pour le calcul du terme de force de l'équation de mouvement.

3.2 Discrétisation du domaine

Lors de la subdivision du domaine de calcul, le choix des éléments du maillage primaire est déterminant. Le préprocesseur géométrique $\boldsymbol{VF}^{++}$ accepte trois formes géométriques en trois dimensions: tétraèdres, prismes et hexahèdres. Dans le présent travail, la généralisation de la méthode de RIDA (1993) est présenté avec des éléments tétraédriques seulement bien que les outils disponibles dans l'interface numérique de $\boldsymbol{VF}^{++}$ permettent d'utiliser les deux autres formes géométriques. Les éléments hexaédriques seront d'ailleurs testés au chapitre suivant.

3.2.1 Volumes de contrôle

Le stockage des variables de l'écoulement est dicté par la méthode de résolution des équations utilisant des volumes de contrôle décalés. Il faut un maillage de volumes de contrôle pour la vitesse et un maillages de volume de contrôle pour la pression. Parmi les alternatives possibles de stockage, deux options ont été retenu (RIDA, 1993). Dans

le premier cas, les composantes de la vitesse sont localisées sur les faces du tétraèdre alors que, dans le deuxième cas, elles sont stockées sur les sommets. La pression est, quant à elle, toujours situé au centre du tétraèdre. La figure 3.1 montre les emplacements des variables.

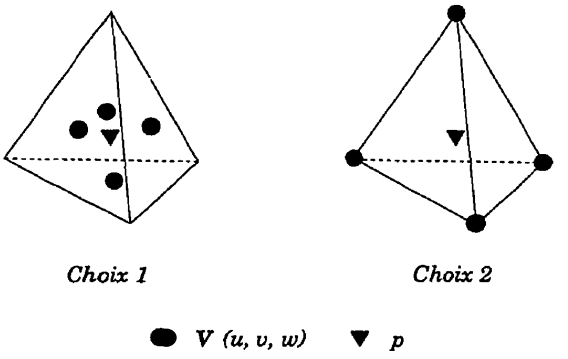


Figure 3.1: Emplacement des variables

Les volumes de contrôle créés pour la vitesse sont **FCCV** pour le stockage à la face et **VCCV** pour le stockage aux sommets. Le stockage de la pression au centre est **CCCV**. Pour le stockage aux faces, les bords de contrôles sont *triangulaires* et construits en joignant le centre du tétraèdre aux sommets. Le volume de contrôle constitué a une forme *bipyramidale* et contient six bords. Pour le stockage aux sommets, les bords de contrôles sont *quadrilatéraux* et assemblés en joignant le centre du tétraèdre avec le centre des faces et le milieu des arêtes. Le volume de contrôle créé a une forme *polyédrique*. Le nombre de bords de contrôle n'est pas fixe et dépend du maillage original utilisé. Cette forme de stockage a de meilleures propriétés que le stockage aux faces car les volumes de contrôle possèdent généralement un plus grand nombre de bords pour un transfert de flux avec plus de voisins. La figure 3.2 montre les bords des volumes de contrôle dans le tétraèdre original selon le choix de l'emplacement des variables.

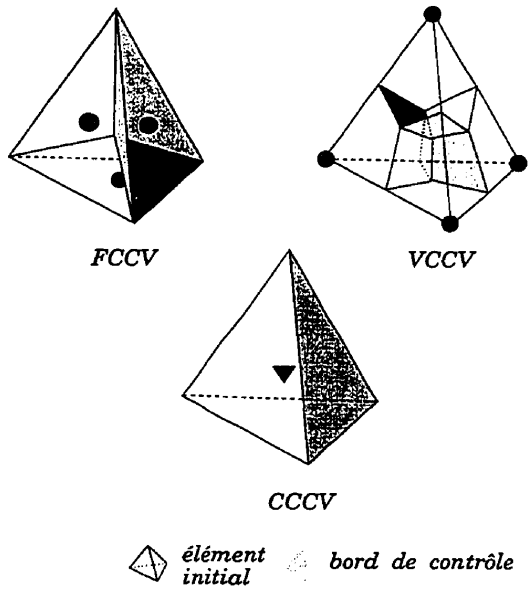


Figure 3.2: Bords des volumes des contrôles

Avec cette forme de décalage des volumes de contrôle, les vitesses et les pressions sont disponibles aux bords des volumes de contrôle pour le calcul des flux et des termes sources. Avec le stockage de la vitesse aux faces (**FCCV**), les vitesses sont directement disponibles aux bords des volumes de contrôle de pression pour le calcul de la conservation de la masse. La discrétisation de l'équation de continuité est donc directe. Avec la configuration **VCCV**, il faut interpoler la vitesse pour l'avoir aux bords des volumes de contrôle de pression. Le coût informatique est donc plus important pour cette configuration.

Avec le stockage de la pression au centre de tétraèdres (**CCCV**), les pressions sont directement disponibles aux bords des volumes de contrôle des vitesses pour le calcul du terme source dans l'équation de mouvement. Enfin, les volumes de contrôle de la pression ne se trouvent pas directement sur une frontière. Il n'est donc pas nécéssaire de spécifier des conditions frontières pour la pression, ce qui constitue un

atout appréciable.

3.2.2 Stencil de reconstruction

En plus de créer les volumes de contrôle, l'interface géométrique de $\boldsymbol{VF}^{++}$ fournit les stencils de reconstruction permettant de calculer le flux $\boldsymbol{J}$ aux bords. Dans le cas du stockage des vitesses, le stencil de reconstruction est situé au centre des tétraèdres et comprend quatres volumes de contrôle et six bords. La figure 3.3 montre le stencil de reconstruction dans le cas du stockage au sommet et à la face des tétraèdres.

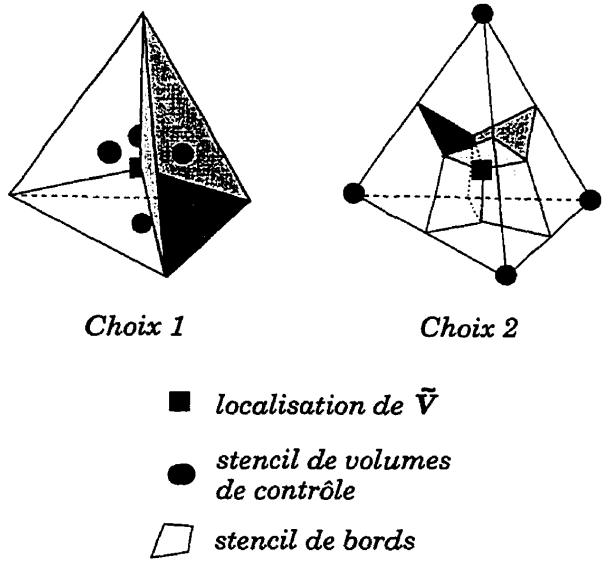


Figure 3.3: Stencils de reconstruction pour la vitesse

Le stockage des vitesses aux sommets des tétraèdres donne de meilleures fonctions d'interpolation que le stockage aux faces. En effet, tel qu'illustré par la figure3.4 pour un cas bidimensionnel, le domaine que la fonction couvre n'est pas le même dans les deux cas. Avec le stockage aux sommets, les bords de contrôles sont toujours à

l'intérieur du domaine couvert par les nœuds. La valeur de Φ est donc toujours interpolé. Dans le cas du stockage aux faces, la position des bords de contrôles peut être à l'extérieur du domaine couvert par les nœuds et la valeur de Φ est alors extrapolé. Si le bord de contrôle se trouve loin du domaine de validité, des coefficients a_k négatifs peuvent survenir dans l'équation algébrique (2.5) (SAABAS et BALIGA, 1994a).

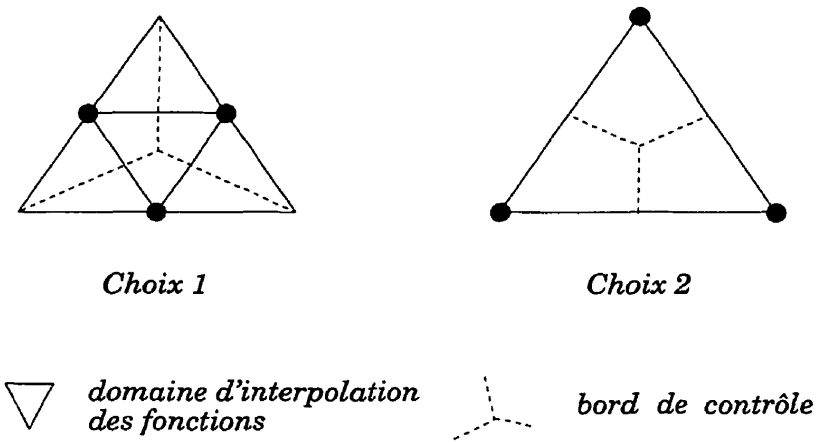


Figure 3.4: Domaine de validité de la fonction d'interpolation selon le type de stockage

Pour le stockage de la pression, le stencil de reconstruction est situé aux faces des tétraèdres et contient un bord et deux volumes de contrôle. Ce stencil beaucoup plus simple est suffisant car il n'est pas nécéssaire d'interpoler les vitesses afin de résoudre l'équation de continuité. La figure 3.5 montre le stencil de reconstruction pour la pression.

Le choix des stencils de reconstruction permet de déterminer le nombre n de volumes de contrôle Φ_k de l'équation discrète (2.5). Pour le stockage **FCCV** de la vitesse, le nombre de voisins n est constant et fixé à six tandis que pour le stockage **VCCV**, ce nombre dépend du maillage mais est en général plus élevé. Dans le cas

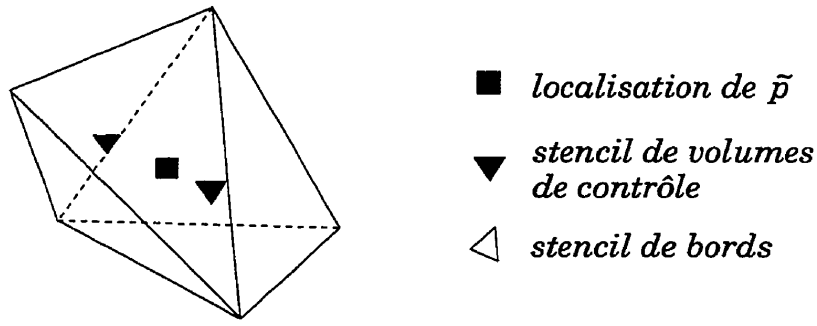


Figure 3.5: Stencils de reconstruction pour la pression

du stockage **CCCV** de la pression, le nombre de volumes de contrôle voisins est fixé à quatre. Un plus grand nombre de voisins donne de meilleures propriétés au schéma de résolution mais, en même temps, ce dernier est rendu plus lourd au niveau du traitement informatique car la largeur de bande de la matrice est plus large.

3.3 Discrétisation de l'équation de mouvement

Les trois scalaires à évaluer sont les composantes de la vitesse u, v et w. La tâche consiste à calculer les flux de convection et de diffusion aux faces des volumes de contrôle. Pour ce faire, on utilise des fonctions d'interpolation basées sur le stencil de reconstruction pour évaluer la valeur des scalaires aux bords. Une fois le flux $\boldsymbol{J}$ calculé, un assemblage bords par bords permet de dégager une équation discrète pour chaque volume de contrôle.

L'équation de mouvement pour le scalaire u est la suivante:

$$\oint_{\sigma} \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n} \; d\sigma \;=\; -\int_{\Omega} \frac{\partial p}{\partial x} \, d\Omega \tag{3.14}$$

avec $\boldsymbol{J} = u\boldsymbol{V} - \frac{1}{Re} \nabla u$, le flux de convection-diffusion. Pour évaluer $\boldsymbol{J}$, des fonc-

tions d'interpolation seront nécéssaires pour $\boldsymbol{V}$, u et ∇u. Étant donné que le terme source de pression est disponible directement aux faces des volumes de contrôle des vitesses, l'intégrale du gradient de pression est remplacée par une intégrale aux bords. L'équation (3.14) s'écrit alors ainsi:

$$\oint_{\sigma} \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n} \; d\sigma \;=\; -\oint_{\sigma} p\, n_x \; d\sigma \tag{3.15}$$

Cette formulation diffère quant à la formulation en gradient de la méthode développé par RIDA (1993) et a été privilégiée pour des raisons déjà expliquées. Il est évident que le fait de traiter le terme source de cette façon fait en sorte que moins de termes de pression sont utilisés pour la correction des vitesses. Dans le cas du stockage *FCCV*, il n'y a que deux volumes de contrôle de pression pour corriger les trois composantes de la vitesse. Dans le cas du stockage *VCCV*, il y en a cinq ou plus, dépendant du maillage. Il faut donc éviter des maillages trop grossiers ou contenant des éléments déformés si on désire obtenir des résultats qui ne sont pas trop marqués par la diffusion numérique. Le choix d'une telle formulation résulte bien sûr d'un compromis et il serait avantageux de développer une formulation utilisant le gradient de pression qui n'ait pas les problèmes associés à la méthode de RIDA (1993).

L'intégration de l'équation (3.15) sur un volume de contrôle autour du nœud de calcul i (figure 3.6) donne:

$$\begin{aligned}
&\oint_M \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n}\, d\sigma_M + \oint_N \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n}\, d\sigma_N + \oint_O \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n}\, d\sigma_O + \\
&\oint_M p\, n_x\, d\sigma_M + \oint_N p\, n_x\, d\sigma_N + \oint_O p\, n_x\, d\sigma_O \\
&+[\text{contribution des autres éléments associés à } i] \\
&+[\text{contribution éventuelle des frontières}] = 0
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Le flux $\boldsymbol{J}$ et le terme source p sont évalués au point milieu de chaque bords de

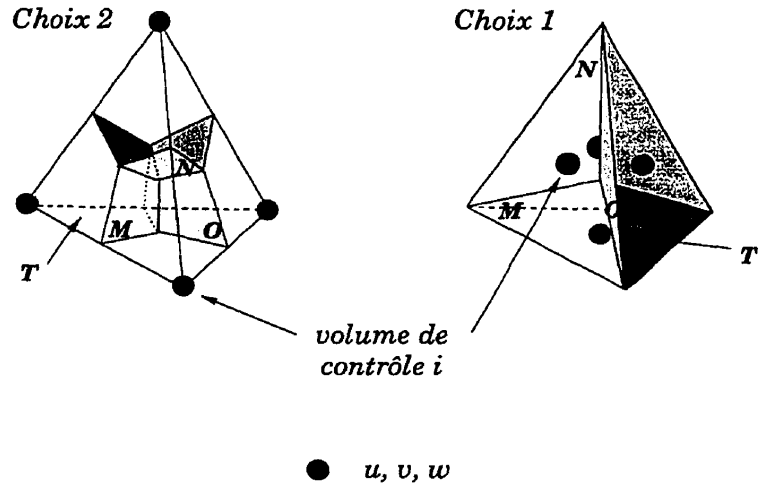


Figure 3.6: Intégration de l'équation de convection-diffusion

contrôle. Les intégrales peuvent alors s'écrire avec les composantes de la normale et la surface du bord. Dans le cas du bord M, l'équation de mouvement donne:

$$\oint_M \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n}\, d\sigma_M + \oint_M p\, n_x\, d\sigma_M = [J_x\, n_x + J_y\, n_y + J_z\, n_z]\, s_M + p\, n_x\, s_M \qquad (3.17)$$

où n_x, n_y, n_z sont les composantes de la normale du bord M et s_M sa surface.

Le processus d'intégration est le même pour les autres scalaires v et w de l'équation de mouvement que l'on représentera à partir de maintenant par un scalaire générique Φ. Les deux méthodologies utilisées pour le calcul des fonctions d'interpolation de $\boldsymbol{V}$, Φ et $\nabla\Phi$, proviennent du schéma FOUS de BALIGA et PATANKAR (1983) et du schéma MWUS de SCHNEIDER et RAW (1986). Dans le cas de MWUS, une généralisation du principe a été faite pour passer en trois dimensions. Cette méthodologie est donc applicable aux trois formes géométriques de base.

3.3.1 Calcul du flux J avec le schéma FOUS

La fonction d'interpolation de Φ est définie par la solution unidimensionnelle d'une équation de convection-diffusion basée sur la vitesse locale. Le scalaire transporté est interpolé exponentiellement suivant la direction moyenne de l'écoulement et linéairement dans les autres directions.

Pour chaque élément, un système de coordonnées cartésien local (X, Y, Z) est défini et montré à la figure 3.7. L'origine du système d'axe est le centre du tétraèdre et l'axe X est parallèle à la direction moyenne de l'écoulement $\boldsymbol{V}_{moy}$.

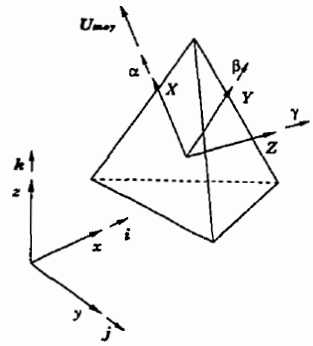


Figure 3.7: Système local et global de coordonnées

La direction moyenne de l'écoulement est donnée par:

$$
\begin{aligned}
u_{moy} &= \frac{u_1 + u_2 + u_3 + u_4}{4} \\
v_{moy} &= \frac{v_1 + v_2 + v_3 + v_4}{4} \\
w_{moy} &= \frac{w_1 + w_2 + w_3 + w_4}{4}
\end{aligned}
$$

et

$$
\boldsymbol{V}_{moy} = u_{moy}\boldsymbol{i} + v_{moy}\boldsymbol{j} + w_{moy}\boldsymbol{k} \tag{3.18}
$$

où $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ sont les vecteurs unitaires du repère cartésien (x, y, z). La définition est valide pour les vitesses stockées à la face ou au sommet du tétraèdre.

Si U, V et W représentent les composantes de la vitesse dans le repère (X, Y, Z) alors:

$$U = \| \boldsymbol{V}_{moy} \| \qquad V = 0 \qquad W = 0 \tag{3.19}$$

et

$$\boldsymbol{V}_{moy} = U\boldsymbol{\alpha} \tag{3.20}$$

où $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma})$ sont les vecteurs unitaires dans le repère local (X, Y, Z). Le domaine de validité de la fonction est l'élément tétraédrique du maillage original.

L'équation de convection-diffusion en régime stationnaire sans terme source s'exprime comme suit:

$$\nabla \cdot (\rho \Phi \boldsymbol{V}) \;=\; \nabla \cdot (\Gamma \nabla \Phi) \tag{3.21}$$

En écrivant cette équation dans le repère de coordonnées local et en supposant que la vitesse moyenne $\boldsymbol{V}_{moy}$ est constante sur l'élément de même que ρ et Γ, l'équation (3.21) se simplifie de la manière suivante:

$$\rho U_{moy} \frac{\partial \Phi}{\partial X} = \Gamma \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial Z^2} \right) \tag{3.22}$$

Une fonction d'interpolation de Φ qui satisfait l'équation (3.22) peut être défini par:

$$\Phi = A\xi + BY + CZ + D \tag{3.23}$$

dans laquelle:

$$\xi \;=\; \frac{\Gamma}{\rho U_{moy}} \left(exp \left(\frac{Pe_{\Delta} \, (X - X_{max})}{X_{max} - X_{min}} \right) - 1 \right) \tag{3.24}$$

et

$$
\begin{aligned}
Pe_{\Delta} &= \frac{\rho U_{moy}}{\Gamma}\left(X_{max} - X_{min}\right) \\
X_{max} &= max\left(X_1, X_2, X_3, X_4\right) \\
X_{min} &= min\left(X_1, X_2, X_3, X_4\right)
\end{aligned}
$$

Pe_{Δ} est le nombre de Peclet local et X_1, X_2, X_3, X_4 sont les coordonnées dans le repère local (X, Y, Z) des nœuds de stockage des vitesses sur le tétraèdre. Pour déterminer les coefficients A, B, C et D, il faut résoudre un système de quatre équations à quatre inconnues formées à partir des coordonnées des volumes de contrôle du stencil de reconstruction. Le système matriciel est représenté par l'équation (3.25).

$$
\begin{bmatrix} \xi_1 & Y_1 & Z_1 & 1 \\ \xi_2 & Y_2 & Z_2 & 1 \\ \xi_3 & Y_3 & Z_3 & 1 \\ \xi_4 & Y_4 & Z_4 & 1 \end{bmatrix}
\begin{Bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{Bmatrix}
\tag{3.25}
$$

Les coefficients A, B, C et D sont des fonctions des quatre scalaires Φ du stencil de reconstruction.

Dans le système de coordonnées local, l'expression du flux de convection-diffusion de l'équation de mouvement (3.14) est donné par:

$$
\boldsymbol{J} = J_X \boldsymbol{\alpha} + J_Y \boldsymbol{\beta} + J_Z \boldsymbol{\gamma} \tag{3.26}
$$

avec

$$
\begin{aligned}
J_X &= U\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial X} \\
J_Y &= V\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \\
J_Z &= W\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Z}
\end{aligned}
\tag{3.27}
$$

(3.28)

où $\Gamma = \frac{1}{Re}$. Et l'intégration du flux $\boldsymbol{J}$ pour le bord M de l'équation (3.16) s'écrit comme suit:

$$\oint_M \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n}\, d\sigma = [J_X\, n_X + J_Y\, n_Y + J_Z\, n_Z]\, s_M \tag{3.29}$$

Les expression J_X, J_Y et J_Z sont données par les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} J_X &= ((U - U_{moy})A\xi + U(BY + CZ + D) - \Gamma A) \\ J_Y &= (VA\xi + V(BY + CZ + D) - \Gamma B) \\ J_Z &= (WA\xi + V(BY + CZ + D) - \Gamma C) \end{aligned} \tag{3.30}$$

Les composantes U, V, W de la vitesse $\boldsymbol{V}$ sont déterminées à l'aide de la fonction (3.23) dont les coefficients sont calculés à partir de la valeur des vitesses connues au moment du calcul. Le système est ainsi linéarisé. Les coefficients A, B, C et D, conservés sous la forme de fonction de scalaire Φ, formeront les équations algébriques discrètes.

La fonction d'interpolation du schéma FOUS peut, dans certains cas, faire apparaître des coefficients négatifs dans les équations algébriques discrétisées. Ces problèmes surviennent lorsque le nombre de Peclet local est grand et lorsque des éléments tétraédriques déformés sont utilisés (BALIGA, 1996). Dans le cas où ces coefficents négatifs sont importants, la matrice à résoudre n'est plus à diagonale dominante. Le système matriciel est alors beaucoup plus instable et difficile à faire converger (SAABAS, 1991). Ce type de fonction d'interpolation ne peut donc être utilisé que pour des simulations avec de faibles nombres de Reynolds ou avec des maillages très fins.

3.3.2 Calcul du flux J avec le schéma MWUS

Pour pallier à ce problème, une autre fonction d'interpolation basée sur la pondération par la masse (MWUS) de SCHNEIDER et RAW (1985) a été adoptée. Cette procédure permet de s'assurer que les approximations algébriques de la convection contribuent positivement aux coefficients des équations discrétisées. Le flux de diffusion est quant à lui calculée à l'aide d'un schéma centré. Dans ce qui suit, la généralisation de la méthode pour des éléments tridimensionnels est détaillées.

Le but de cette méthode est de s'assurer d'une contribution positive des coefficents dans les équations algébriques. Pour ce faire, l'extrapolation de la variable Φ est calculée à partir du débit massique, $\dot{m}$, traversant les bords du stencil de reconstruction. À la figure 3.8, les bords M, N, O, P, Q et R représentent les surfaces d'intégration et *1, 2, 3, 4* les volumes de contrôle sur le stencil de reconstruction.

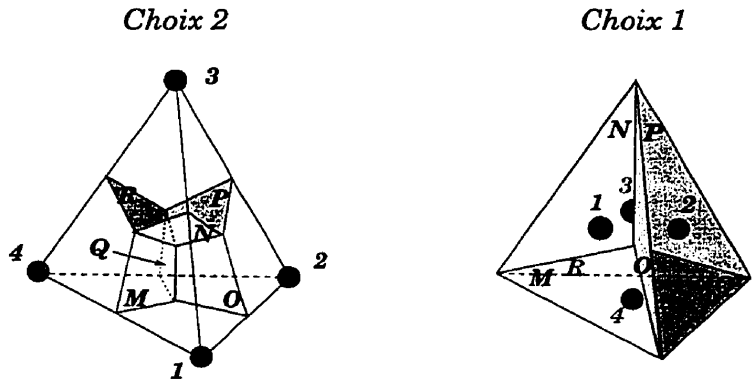


Figure 3.8: Calcul du flux massique

Avec l'approximation du point milieu, le débit massique qui traverse la face O s'écrit comme suit:

$$\dot{m}_O = (\boldsymbol{V}_O \cdot \boldsymbol{n}_O)\, s_O \tag{3.31}$$

où s_O est la surface du bord et $\boldsymbol{n}_O$ sa normale. La vitesse $\boldsymbol{V}$ se calcule à l'aide d'une interpolation linéaire à partir des quatre volumes de contrôle du stencil. Des expressions similaires peuvent être obtenues pour les autres bords.

Si on suppose que la normale du bord O pointe vers le volume de contrôle 2, la valeur de Φ à ce bord peut s'exprimer comme suit:

Si m_O est négatif:

$$\Phi_O = f^-\Phi_P + g^-\Phi_Q + (1 - [f+g]^-)\Phi_2 \tag{3.32}$$

où

$$[f+g]^- = \min\left[\max\left[\frac{\dot{m}_P + \dot{m}_Q}{\dot{m}_O}, 0\right], 1\right]$$

et

$$\begin{aligned} f^- &= [f+g]^- \frac{\dot{m}_P}{\dot{m}_O} \\ g^- &= [f+g]^- \frac{\dot{m}_Q}{\dot{m}_O} \end{aligned}$$

Si $\dot{m}_O$ est positif:

$$\Phi_O = f^+\Phi_M + g^+\Phi_N + (1 - [f+g]^+)\Phi_1 \tag{3.33}$$

où

$$[f+g]^+ = \min\left[\max\left[\frac{\dot{m}_M + \dot{m}_N}{\dot{m}_O}, 0\right], 1\right]$$

et

$$\begin{aligned} f^+ &= [f+g]^+ \frac{\dot{m}_M}{\dot{m}_O} \\ g^+ &= [f+g]^+ \frac{\dot{m}_N}{\dot{m}_O} \end{aligned}$$

Le même procédé est utilisé pour les autres bords. Un système d'équation est alors créé et peut être représenté par le système matriciel suivant :

$$\begin{bmatrix} 1 & -f^- & -g^- & 0 & -f^+ & -g^+ \\ -f^+ & 1 & -g^+ & -f^- & 0 & -g^- \\ -f^+ & -g^+ & 1 & -f^- & -g^- & 0 \\ 0 & -f^- & -f^+ & 1 & -g^+ & -g^- \\ -f^- & 0 & -f^+ & -g^+ & 1 & -g^- \\ -f^+ & -f^+ & 0 & -g^+ & -g^+ & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_M \\ \Phi_N \\ \Phi_O \\ \Phi_P \\ \Phi_Q \\ \Phi_R \end{Bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} [f+g]^- & 0 & 0 & [f+g]^+ \\ [f+g]^+ & 0 & [f+g]^- & 0 \\ [f+g]^+ & [f+g]^- & 0 & 0 \\ 0 & [f+g]^+ & [f+g]^- & 0 \\ 0 & [f+g]^+ & 0 & [f+g]^- \\ 0 & 0 & [f+g]^+ & [f+g]^- \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{Bmatrix} \tag{3.34}$$

Pour obtenir les valeurs de Φ aux bords, il faut inverser la matrice qui lui est associée. Ce procédé se généralise pour tout type de configuration géométrique. Le système matriciel générique aura la forme suivante:

$$\{\Phi_{bord}\}_{nb} = [A]^{-1}_{nb\times nb} \cdot [B]_{nb\times nt} \cdot \{\Phi_{v.c.}\}_{nt} \tag{3.35}$$

Ici, $[A]^{-1}$ est la matrice associée au vecteur de bords $\{\Phi_{bord}\}$ et $[B]$ celle associée au vecteur de volumes de contrôle $\{\Phi_{v.c.}\}$. Les termes nb et nt sont reliés au nombre de bords et au nombre de termes du stencil de reconstruction.

Avec cette technique,seul le terme Φ du flux de convection est discrétisé. La vitesse $\boldsymbol{V}$ se calcule à l'aide d'une interpolation linéaire à partir des quatre volumes de

contrôle du stencil. Le système est linéarisé en prenant les valeurs connues au moment du calcul. Pour le terme de diffusion $\nabla\Phi$, on a aussi recours à une interpolation linéaire sous la forme suivante:

$$\Phi = Ax + By + Cz + D \tag{3.36}$$

Ce type d'interpolation est compatible avec la nature elliptique du phénomène de diffusion. Pour déterminer les coefficients A, B, C et D, il faut résoudre un système de quatre équations à quatre inconnues formées à partir des coordonnées des volumes de contrôle du stencil de reconstruction. De cette manière, les coefficients A, B, C et D sont des fonctions des quatre scalaires Φ.

L'expression du flux de diffusion est représentée par:

$$\nabla\Phi = A\boldsymbol{i} + B\boldsymbol{j} + C\boldsymbol{k} \tag{3.37}$$

Ainsi, on dispose de deux moyens pour interpoler la fonction scalaire Φ: la fonction exponentielle *FOUS* et la méthode de pondération par la masse *MWUS*. Le recours à l'une ou l'autre est conditionné par la valeur maximale du nombre de Peclet dans un élément ($Pe_{max} = 4$). Pour une simulation à haut nombre de Reynolds, l'utilisation de la fonction exponentielle se limite à la proximité de la paroi et dans les zones de recirculation où le nombre de Peclet est relativement faible.

3.3.3 Assemblage de l'équation de mouvement

Le processus d'intégration de l'équation (3.16) se fait pour tous les tétraèdres voisins au point de calcul i de la figure 3.6. Le nombre de tétraèdres est de deux pour le stockage *FCCV* de la vitesse et il dépend du maillage pour le stockage *VCCV*. En fin

de compte, on aboutit à cette équation algébrique discrète:

$$a_i\Phi_i^{n+1} + \sum_{k=1}^{n} a_k\Phi_k^{n+1} \quad = \quad b_i \tag{3.38}$$

Le calcul des coefficients a_i, a_k et b_i se fait de manière systématique et constitue une procédure standard qui est présentée en détail par BALIGA et PATANKAR (1980). Pour le stockage *FCCV* de la vitesse, le nombre de voisins k est toujours de six alors que pour le stockage *VCCV* ce nombre varie.

Afin d'améliorer et de stabiliser la convergence, la formulation avec facteur de VAN DOORMAAL et RAITHBY (1984) est utilisée. L'équation (3.38) devient:

$$\left(1 + \frac{1}{E}\right) a_i\Phi_i^{n+1} + \sum_{k=1}^{n}(a_k\Phi_k^{n+1}) \quad = \quad b_i + \frac{a_i}{E}\Phi_i^n \tag{3.39}$$

dans laquelle Φ_i^n est la valeur de Φ_i à l'itération précédente. Des valeurs de E comprises entre 2 et 10 sont utilisées dans le processus de calcul selon la difficulté de convergence du problème. Le système d'équation est résolue une fois que le champ de pression est calculé.

3.3.4 Traitement des conditions frontières

Les conditions frontières du champ de vitesse sont les conditions classiques de Dirichlet et Neumann.

Pour les conditions de Dirichlet, la valeur de Φ est spécifiée. On remplace alors l'équation (3.39) par la relation:

$$\Phi_i = \Phi_{spécifié} \tag{3.40}$$

Au fin de cette étude, les conditions de Dirichlet du champ de vitesse sont fixées à l'entrée et aux parois solides. À l'entrée, le champ de vitesse est imposé sous forme de profil plat ou de profil développé. Pour une paroi solide, les conditions d'imperméabilité et de non glissement sont appliquées ($u,v,w = 0$)

Pour les conditions de Neumann, il s'agit d'imposer le flux de diffusion à la frontière:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = q_1 + q_2 \Phi \tag{3.41}$$

Celui-ci est fixé en spécifiant les valeurs de q_1 et q_2. L'intégration du flux au bord frontière T de la figure 3.6 se fait alors comme suit:

$$\oint_T \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma = \left[(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}_T) \, \Phi - \left(\frac{1}{Re} \frac{\partial \Phi}{\partial n_T} \right) \right] s_T \tag{3.42}$$

En substituant l'expression du terme diffusif par sa valeur, on obtient:

$$\oint_T \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma = \left[\left(m_T - \frac{1}{Re} q_2 \right) \Phi - \frac{1}{Re} q_1 \right] s_T \tag{3.43}$$

où m_T représente le débit massique qui quitte la frontière au bord T. Dans ce travail, les conditions de Neumann pour le champ de vitesse sont imposées à la sortie. L'écoulement à cette frontière est supposé établi en posant une dérivée nulle pour toutes les variables:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = \frac{\partial w}{\partial n} = 0 \tag{3.44}$$

et les valeurs de q_1 et q_2 sont fixées à 0.

3.4 Discrétisation de l'équation de continuité

Le calcul de la pression requiert un traitement spécial puisque cette dernière n'apparaît pas de manière implicite dans le système d'équations. Le but est de calculer un champ de pression qui corrige la vitesse de façon à ce que celle-ci respecte la contrainte d'incompressibilité. On doit donc effectuer un couplage entre l'équation de mouvement et l'équation de continuité afin de dégager une équation pour la pression. Selon la méthode SIMPLER, le calcul du champ de pression requiert deux étapes. La première étape consiste à résoudre une équation de pression résultant du couplage. La deuxième étape a pour but de corriger la pression de façon à ce que les vitesses respectent la contrainte d'incompressibilité.

Afin de dégager une équation pour la pression, on remplace les termes de vitesses de l'équation de continuité par l'équation de mouvement discrétisé (3.38). Puisque l'intégration de l'équation de continuité se fait au volume de contrôle *CCCV* de la pression, la vitesse doit être disponible aux faces des tétraèdres ce qui est le cas pour le stockage *FCCV* de la vitesse. Pour le stockage *VCCV*, il faut trouver un moyen d'obtenir l'équation de mouvement à la face des tétraèdres. Bien qu'il soit possible d'interpoler linéairement la vitesse à partir des sommets, il est erroné de calculer les coefficients de l'équation de mouvement par interpolation. La discrétisation de l'équation de mouvement à la face est donc nécessaire. Ce dédoublement de calcul implique bien sûr un coût informatique beaucoup plus élevé pour le stockage de la vitesse aux sommets.

3.4.1 Équation de pression

Considérons l'équation de mouvement discrétisée à la face du tétraèdre sur le volume de contrôle $FCCV$ de la figure suivante :

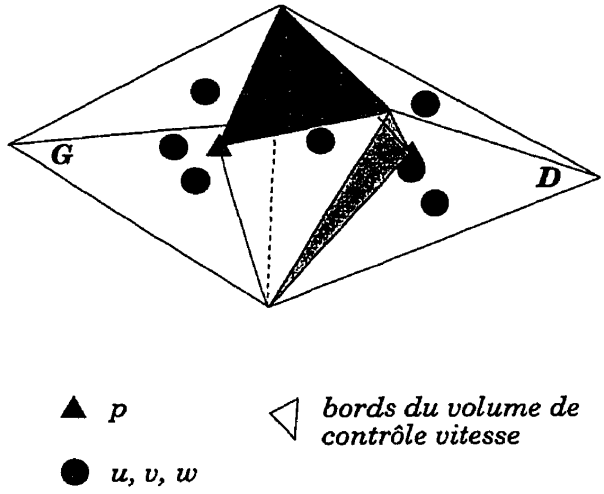


Figure 3.9: Couplage vitesse-Pression

Il est possible de formuler la discrétisation de l'équation (3.38) en remplacant la fonction Φ par le vecteur vitesse $\boldsymbol{V}$. L'équation s'écrit alors comme suit :

$$a_i \boldsymbol{V}_i^{n+1} + \sum_{k=1}^{6} a_k \boldsymbol{V}_k^{n+1} \quad = \quad \sum_{j=1}^{6} p_j \boldsymbol{n}_j s_j \tag{3.45}$$

où $\boldsymbol{n}_j$ sont les normales des bords s_j du volume de contrôle $FCCV$. Étant donné que la pression est constante par élément, l'intégrale du terme source se simplifie par :

$$\sum_{j=1}^{6} p_j \boldsymbol{n}_j s_j = (p_G - p_D)\, \boldsymbol{n}_{G-D\,i} s_i = \Delta p\; \boldsymbol{n}_{L-R\,i} s_i \tag{3.46}$$

dans laquelle s_i est la surface du bord frontière situé entre les deux volumes de contrôle de pression et $\boldsymbol{n}_{G-D\,i}$ la normale du bord pointant dans la direction du tétraèdre D.

Il s'agit ensuite d'intégrer l'équation de continuité sur le volume de contrôle de pression de la figure suivante :

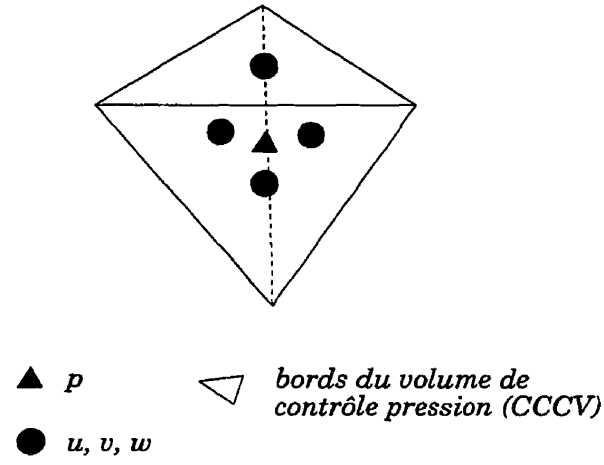


Figure 3.10: Intégration de l'équation de continuité

En utilisant l'approximation du point milieux, l'équation de continuité est discrétisée comme suit :

$$\oint_{\sigma} \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma = \sum_{i=1}^{4} \boldsymbol{V}_i^{n+1} \cdot \boldsymbol{n}_i s_i = 0 \tag{3.47}$$

Les quatre vitesses aux faces du tétraèdre, obtenue de l'équation (3.45), sont exprimées sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{V}_i^{n+1} = \boldsymbol{V}_i^{\diamond} - \Delta p \boldsymbol{\alpha}_i \tag{3.48}$$

où

$$\boldsymbol{V}_i^{\diamond} = \frac{-\sum_{i=1}^{6} a_k \boldsymbol{V}_k^{n+1}}{a_i}$$

et

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \frac{s_i}{a_i} \boldsymbol{n}_{G-D\,i}$$

Ainsi, l'équation de continuité discrétisée devient:

$$\sum_{i=1}^{4} (\boldsymbol{V}_i^{\diamond} - \Delta p \boldsymbol{\alpha}_i) \cdot \boldsymbol{n}_i s_i = 0 \tag{3.49}$$

et la forme finale de l'équation de pression s'ecrit comme suit :

$$c_o p_o^{n+1} + \sum_{i=1}^{4} c_i p_i^{n+1} = \epsilon \tag{3.50}$$

avec

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{s_i^2}{a_i} \\ c_o &= -\sum_{i=1}^{4} c_i \\ \epsilon &= -\sum_{i=1}^{4} s_i \left(\boldsymbol{V}_i^{\diamond} \cdot \boldsymbol{n}_i\right) \end{aligned}$$

Une fois le système d'équations résolue, le nouveau champ de pression est injecté dans l'équation de mouvement qui peut alors être solutionné.

3.4.2 Équations de correction

Durant le processus de calcul du champ de pression, le terme $\boldsymbol{V}_i^{\diamond}$ de pseudo-vitesse est basé sur le champ de vitesse connue à l'itération précédente. Ce découplage des équations implique que le terme de pseudo-vitesse est calculé avec un champ de vitesse intermédiaire qui n'est pas celui qui respecte la conservation de la masse ou la conservation du mouvement. Par conséquent, le champ de pression obtenu avec l'équation (3.50) ne garantit pas que les vitesses aux faces des tétraèdres satisfont la conservation de la masse. Il faut alors effectuer une correction de pression. En s'assurant que la masse est conservé à chaque itération, les systèmes d'équations sont beaucoup plus stables et convergent plus rapidement vers la solution.

L'équation de mouvement (3.45) dont les termes de vitesses et de pression respectent la conservation de la masse s'écrit:

$$a_i \boldsymbol{V}_i^{n+1} + \sum_{k=1}^{6} a_k \boldsymbol{V}_k^{n+1} \quad = \quad \Delta p \, \boldsymbol{n}_{G-D\,i} s_i \tag{3.51}$$

On définit $u^\star$, $v^\star$ et $w^\star$ des composantes de vitesses qui satisfont le mouvement mais dont l'équation de continuité n'est pas nécéssairement respectée. De la même façon, on note par $p^\star$ une pression intermédiaire qui n'assure pas un champ de vitesse à divergence nulle. C'est le cas des termes de l'équation de mouvement obtenus durant le processus de calcul. On écrit alors cette équation de la manière suivante :

$$a_i \boldsymbol{V}_i^{\star} + \sum_{k=1}^{6} a_k \boldsymbol{V}_k^{\star} \quad = \quad \Delta p^\star \, \boldsymbol{n}_{G-D\,i} s_i \tag{3.52}$$

Les termes de pression et de vitesse qui satisfont la conservation de la masse peuvent s'écrire de la façon suivante:

$$\begin{aligned} p &= p^\star + p' \\ u &= u^\star + u' \\ v &= v^\star + v' \\ w &= w^\star + w' \end{aligned} \tag{3.53}$$

où p', u', v' et w' sont des termes de correction.

Pour obtenir une équation de correction, on soustrait termes par termes les deux équations de mouvement :

$$a_i \boldsymbol{V}_i' + \sum_{k=1}^{6} a_k \boldsymbol{V}_k' \quad = \quad \Delta p' \, \boldsymbol{n}_{G-D\,i} s_i \tag{3.54}$$

L'équation est simplifiée en éliminant le terme $\sum_{k=1}^{6} a_k \boldsymbol{V}_k'$. Cela permet d'effectuer une correction point par point de la vitesse en fonction d'une correction de pression.

Cette simplification n'affecte pas la valeur du résultat final et permet de se rapprocher de façon itérative, vers le bon champ de pression. L'équation de correction de vitesse prend la forme suivante :

$$\boldsymbol{V}'_i = \frac{\boldsymbol{n}_{G-D\,i} s_i}{a_i} \Delta p' \tag{3.55}$$

En utilisant ce terme de correction, l'équation de continuité sur le volume de contrôle de la figure 3.10 s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \oint_\sigma (\boldsymbol{V}^\star + \boldsymbol{V}') \cdot \boldsymbol{n}\, d\sigma = 0 &= \sum_{i=1}^{4} (\boldsymbol{V}_i^\star + \boldsymbol{V}') \cdot \boldsymbol{n}_i s_i \\ &= \sum_{i=1}^{4} \left(\boldsymbol{V}_i^\star + \frac{\boldsymbol{n}_{G-D\,i} s_i}{a_i} \Delta p' \right) \cdot \boldsymbol{n}_i s_i \end{aligned} \tag{3.56}$$

Et la forme finale de l'équation de correction de pression est obtenue :

$$c_o p'_o + \sum_{i=1}^{4} c_i p'_i = \kappa \tag{3.57}$$

avec

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{s_i^2}{a_i} \\ c_o &= -\sum_{i=1}^{4} c_i \\ \epsilon &= -\sum_{i=1}^{4} s_i \left(\boldsymbol{V}_i^\star \cdot \boldsymbol{n}_i \right) \end{aligned}$$

Une fois la correction de pression calculée, la vitesse de chaque volume de contrôle est corrigée à l'aide de l'équation (3.55). Les nouvelles vitesses ne respectent plus l'équation de mouvement mais respectent l'équation de continuité sur le volume de contrôle *CCCV* ce qui stabilise le processus itératif.

3.4.3 Traitement des conditions frontières

Le traitement des conditions frontières pour la pression se fait différemment des conditions classiques. Avec le décalage des maillages, les volumes de contrôle de la pression ne se trouvent pas directement sur la frontière. Il n'est donc pas nécéssaire de spécifier des conditions frontières pour la pression. Cette notion de pression flottante correspond bien au sens physique que lui donne l'équation de mouvement. La valeur de la pression sur le domaine n'a pas de sens comme telle et seule la différence de pression est significative. Pour fixer le niveau de pression, on impose généralement une valeur de pression dans un volume de contrôle quelquonque.

La pression doit par contre être imposée lorsque la vitesse normale n'est pas connue sur une frontière PATANKAR (1980). Cette condition est nécéssaire afin de borner correctement le système d'équation. Si la pression n'est fixé que sur un seul élément, le système aura tendance à diverger. La pression est doit donc être imposée tout le long de la frontière de sortie, sur des volumes de contrôle fictifs adjacents à la frontière. Cette contrainte ne semble pas contredire la notion d'écoulement établi pour les vitesses et fixe un niveau pour la pression. Notons que seule le frontière sortie présente cette particularité. En effet, dans le cas d'un écoulement dans une cavité, la vitesse normale à la frontière est connue sur tout les côtés du domaine. Ceci appuie l'idée selon laquelle la pression doit être fixé à la sortie lorsque celle-ci constitue le moteur de l'écoulement.

Dans le cas où un des bords du volume de contrôle de l'équation de pression est une frontière Dirichlet, l'équation (3.50) prend la forme suivante:

$$c_o p_o^{n+1} + \sum_{i=1}^{3} c_i p_i^{n+1} = (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, s + \epsilon \tag{3.58}$$

dans laquelle une partie du terme de droite est le flux massique connu du bord frontière.

Si un des bord est une frontière sortie, le terme de pression du volume de contrôle fictif adjacent à la frontière est fixé à zéro et l'équation de continuité donne:

$$c_o p_o^{n+1} + \sum_{i=1}^{3} c_i p_i^{n+1} = \epsilon \tag{3.59}$$

Le traitement des bords frontières se fait de manière semblable pour l'équation de correction en pression.

3.5 Résolution du système d'équation

La discrétisation sur le domaine de calcul des équations de mouvement, de pression et de correction en pression, aboutissent à un système d'équations algébriques symbolisé par:

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3.60}$$

où A est une matrice creuse. La résolution du système est effectué grâce à une factorisation **LU** et le stockage de la matrice est fait en ligne de ciel afin de réduire la mémoire utilisée (méthode **LUSS**).

3.6 Algorithme de résolution SIMPLER

La séquence des opérations de calcul de la méthode SIMPLER est la suivante:

- Estimation initiale des variables.
- Calcul des coefficients a_i dans les équations de mouvement u, v, w pour le stockage $FCCV$ de la vitesse.
- Calcul des coefficients a_i dans les équations de mouvement u, v, w pour le stockage $VCCV$ de la vitesse (si demandé).
- Calcul des coefficients pour l'équation de pression (3.50) et résolution du système obtenu.
- Addition de la pression au terme source des équations de mouvement.
- Résolution des équations de mouvement
- Calcul des coefficients pour l'équation de correction de pression (3.57) et résolution du système obtenu.
- Correction des composantes de la vitesse
- Vérification de la convergence
- Le cas échéant, retour à la deuxième étape.

Chapitre 4

Validation

Dans le chapitre précédent, une méthode de résolution applicable à la simulation d'écoulements incompressibles tridimensionnels a été exposée. La première série de simulation numérique a pour but de vérifier le bon fonctionnement du résoluteur et de valider la méthode. Pour cela, on résout des problèmes qui requièrent une solution analytique. La connaissance de la solution exacte, donc de l'erreur exacte, permet de vérifier la qualité et la précision de la méthode. La succession des tests est organisée selon un ordre croissant de complexité en faisant ressortir progessivement les possibilités et les limites de la méthode.

Le premier test porte sur un problème de diffusion artificielle. Il s'agit, dans ce cas, de résoudre une équation de convection pure d'une grandeur scalaire quelconque dans une cavité cubique où le champ de vitesse est connu. Ce test permet de valider les schémas d'extrapolation en amont FOUS et MWUS et de mesurer la diffusion numérique. Le deuxième test consiste en la résolution du probleme de SMITH et HUTTON (1982) dans lequel une équation de convection-diffusion est résolue dans un

champ de vitesse imposé. Ce test permet aussi de mesurer la diffusion artificielle des schémas 'upwind' pour différents nombres de Reynolds. Le dernier test présente le cas d'un écoulement dans un tuyau carré et vise à valider la méthode de résolution des équations de Navier-Stokes.

Pour chacun des cas-tests, la géométrie, le maillage utilisé et les conditions limites seront décrites. Les résultats seront présentés de façon à illustrer les paramètres les plus appropriés pour l'interprétation des phénomènes concernés. Il sera alors possible d'évaluer les performances du schéma numérique et de son impact sur les phénomènes physiques observés. Tous les tests sont effectués en variables adimentionnelles afin d'éviter les problèmes que pourraient engendrer les géométries aux petites dimensions.

4.1 Le problème de convection pure

Dans le premier cas, le test a pour but d'étudier la diffusion numérique occasionnée par l'utilisation des fonctions d'interpolation FOUS et MWUS pour le calcul des termes de flux de convection. Pour ce faire, une équation de convection pure d'une grandeur scalaire quelconque au travers d'un cube est résolue. Ce cas-test est une extension du problème classique bidimensionnel et a été utilisé par SCANLON *et al.* (1993).

On considère un champ de vitesse à divergence nulle défini dans le domaine illustré à la figure 4.1. La vitesse est uniforme et l'angle θ du vecteur par rapport au plan Y est modifié en imposant les composantes u et w de la vitesse à 1.0 et en faisant varier v entre 0.2 et 1.0 . Lorsque les trois composantes de vitesses sont égales à 1.0, l'angle est de 35.3° et un maximum de diffusion numérique est observé.

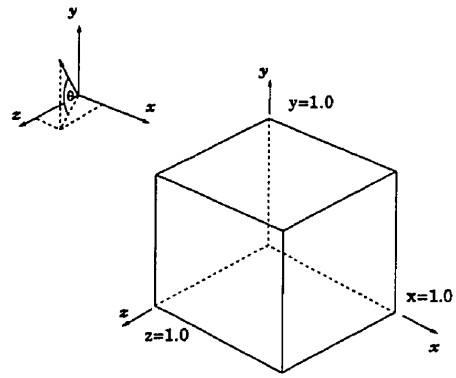


Figure 4.1: Géométrie de base

Une équation de transport d'une grandeur scalaire Φ est résolue dans le domaine. La diffusion physique du modèle est désactivée en posant un nombre de Reynolds de 10^8. Les conditions initiales sont montrées à la figure 4.2. Les concentrations sont imposées sur trois faces avec comme valeur 1.0, 0.0 et 0.0 et sur toutes les autres faces, on fixe des conditions de Neumann. Toute diffusion observée aux faces de 'sortie' est alors attribuable à une diffusion numérique causée par le schéma d'interpolation. La concentration de la grandeur scalaire a été analysée sur le plan de 'sortie' de l'axe z en calculant la norme de l'erreur sur ce plan et en reproduisant le profil de concentration sur la ligne médiane ($x = 0.5$) pour fin de comparaison avec les résultats de SCANLON *et al.* (1993).

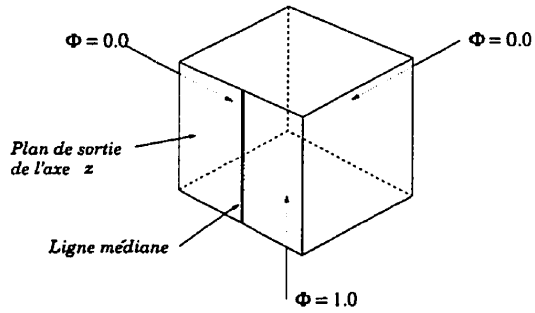


Figure 4.2: Conditions frontières

Le maillage de base est constitué de cubes superposés dont chacun est divisé en cinq tétraèdres. Un maillage est représenté par le nombre de cubes sur chaque axe. Un maillage 5x5x5 a donc 125 cubes. Six différents maillages uniformes ont été utilisés pour le calcul. Les maillages ont respectivement de 5, 7, 9, 11, 15, 19 cubes par axes. Un exemple de maillage initial est représenté à la figure 4.3.

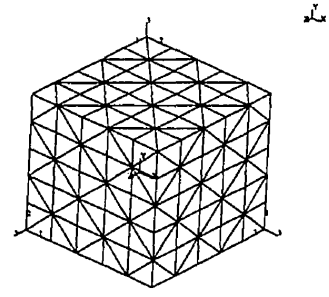
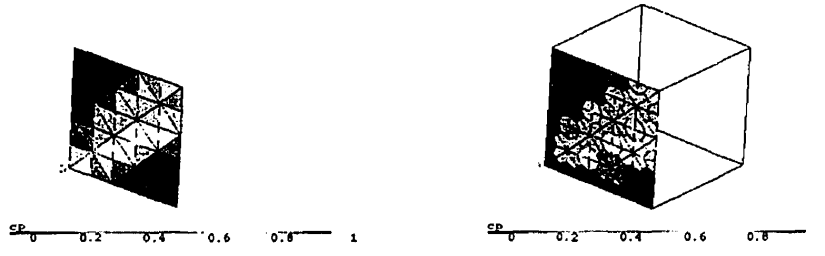


Figure 4.3: Maillage 5x5x5

La discrétisation du maillage original en volumes de contrôle se fait selon le stockage FCCV et VCCV. La figure 4.4 montre les faces des volumes de contrôle obtenues au plan d'analyse. La coloration est faite selon des résultats numériques. Il est possible de remarquer que la solution est constante par élément.



Stockage *FCCV* Stockage *VCCV*

Figure 4.4: Volumes de contrôle

Maillage	Nombres de volumes de contrôle	
	FCCV	VCCV
5x5x5	1400	216
7x7x7	3724	512
9x9x9	7776	1000
11x11x11	14036	1728
15x15x15	35100	4096
19x19x19	70756	8000

Tableau 4.1: Volumes de contrôle et stockage

Il est important de noter que pour un même maillage initial, *le nombre de volumes de contrôle varie selon le type de stockage.* Le tableau 4.1 montre pour chaque maillage le nombre de volumes de contrôle créés. Pour comparer les deux types de stockage, il est nécéssaire de prendre environ le même nombre de volumes de contrôle. Ainsi, le maillage 5x5x5 avec un stockage FCCV peut se comparer avec un maillage 11x11x11 et un stockage VCCV.

Des simulations numériques ont été faites avec un champ de vitesse ayant un angle θ de 15.8° et de 35.3° par rapport au plan y. Relativement au nombre de volumes de contrôles que donnent les deux formes de discrétisation, le stockage FCCV n'a été utilisé que sur les maillages 5x5x5, 7x7x7, 9x9x9 et 11x11x11. Les schémas FOUS et MWUS ont été utilisés dans chaque cas. La résolution étant implicite, la solution a été obtenue après une seule itération.

Un exemple de solution est donné à la figure 4.5 pour un angle de vitesse de 35.3°, un maillage 11x11x11, un stockage VCCV et une résolution MWUS. Les iso-lignes

ont été obtenues à l'aide d'une interpolation linéaire de la solution.

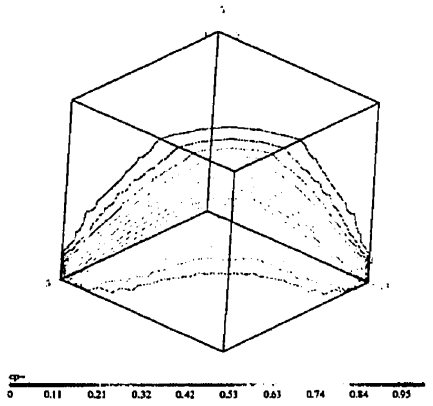


Figure 4.5: Exemples de solution, courbes iso-concentration

Les tableaux 4.3 et 4.4 représentent les résultats obtenus pour la norme de l'erreur avec les deux angles de vitesse. La comparaison des résultats du profil de concentration sur la ligne médiane du plan de sortie avec les résultats de SCANLON *et al.* (1993) est illustrée par les figures 4.6 et 4.7. Les auteurs se sont servis d'un maillage cubique 11x11x11 avec des volumes de contrôle stockés au centre des éléments. Trois types de schémas ont été utilisés par les auteurs soit: UDS, QUICK et SUCCA3D. Le schéma SUCCA3D est une extension tridimensionnelle de SUDS, basé sur les lignes de courant. Les figures permettent de constater que le schéma FOUS utilisé avec un stockage VCCV donne les meilleurs résultats, comparables au schéma QUICK, alors que le schéma MWUS avec les stockages FCCV et VCCV se compare au schéma UDS.

Ce cas-test a permis de mettre en lumière les problèmes reliés à l'utilisation de FOUS. Deux restrictions principales s'appliquent à l'usage de ce schéma: l'une géométrique et l'autre mathématique. La première restriction est apparue avec l'utilisation de ce dernier avec le stockage FCCV. Il n'y a pas eu de convergence. Ce

résultat peut s'expliquer par la position des centres des volumes de contrôle par rapport aux centres des bords. Le stockage des vitesses aux faces des tétraèdres ne donne pas la même fonction d'interpolation que le stockage aux sommets car le domaine couvert n'est pas le même. Avec le stockage aux sommets, les bords de contrôle sont toujours à l'intérieur du domaine couvert par la fonction et la valeur de Φ est toujours interpolée. Dans le cas du stockage aux faces, la position des bords de contrôle peut se trouver à l'extérieur du domaine couvert par la fonction et Φ est alors extrapolée. L'extrapolation des données entraîne la génération de coefficients a_k négatifs dans l'équation algébrique. Si ces coefficients sont suffisamment importants, la résolution du système d'équations peut diverger. Le stockage VCCV utilisé avec le schéma FOUS a convergé, montrant l'importance de l'emplacement des centres des volumes de contrôle par rapport aux centres des bords.

La seconde restriction à l'usage de ce schéma vient de l'utilisation de la méthode FOUS pour des nombres de Reynolds élevés. Lorsque le Reynolds est élevé, la fonction ξ (3.23) tend vers zéro. Le système d'équations surdéterminé résultant devient aussi source de coefficients négatifs dans les équations algébriques. Ces coefficients négatifs peuvent aboutir à des résultats nonphysiques. On observe par exemple un dépassement des valeurs frontières (overshoot, undershoot) à la figure 4.7 pour le schéma FOUS avec discrétisation FCCV. L'utilisation de cette méthode est donc sujette à des contraintes.

Le schéma MWUS a convergé pour les deux types de stockage. Les valeurs du domaine sont demeurées bornées par les conditions limites. Ces résultats montrent que le schéma a été conçu de telle façon que les coefficients a_k soient toujours positifs. Il n'est donc pas affecté par les problèmes d'oscillation et de non-convergence. Cependant ce type de schéma est affecté par une diffusion numérique beaucoup plus importante.

Angle θ	Ordre de l'erreur		
	FCCV - schéma MWUS	VCCV - schéma MWUS	VCCV - schéma FOUS
15.8°	0.208	0.225	0.293
35.3°	0.192	0.194	0.462

Tableau 4.2: Ordre de l'erreur

Le choix de l'emplacement des volumes de contrôle ne semblent pas avoir beaucoup d'effet sur le comportement du schéma MWUS. La forme du volume de contrôle et le nombre de voisins de l'équation algébrique ne semble pas avoir d'effet sur la qualité de la solution. Le critère de précision est basé uniquement sur le nombre de volumes de contrôle et c'est pourquoi le stockage FCCV donne de meilleurs résultats que le stockage VCCV pour un même maillage (figure 4.6). Cette constatation s'explique par le fait que le comportement du schéma dépend de la fonction d'interpolation qui, dans les deux cas, se fait à partir d'un tétraèdre. La forme du volume de contrôle et le nombre d'élement adjacent ont alors une importance secondaire sur la précision du schéma.

À partir des résultats des tableaux 4.4 et 4.3, l'ordre des schémas FOUS et MWUS a été calculé et les résultats sont donnés dans le tableau 4.2. Les résultats montrent que l'ordre de grandeur de l'erreur de ces schémas est inférieur à un. Ils indiquent aussi que l'ordre du schéma FOUS est légèrement supérieur au schéma MWUS.

L'effet de l'angle d'incidence sur la précision des schémas est minime. Les résultats ne montrent pas que la précision est affectée de façon significative par l'angle de l'écoulement. Pour le schéma FOUS, ce résultat correspond à la physique de la

méthode dans laquelle la direction de l'écoulement est relativement bien estimée. Le schéma MWUS est, quant à lui, beaucoup plus dépendant de la direction de l'écoulement et de la géométrie des bords. Cependant, le fait d'utiliser un maillage tétraédrique rend l'orientation des faces aléatoire par rapport à un axe quelquonque. C'est pourquoi la direction de l'écoulement n'a pas eu d'influence sur la précision du schéma. Lorsqu'on utilise MWUS sur un maillage non-structuré, l'écoulement est diffusé de façon régulière dans tout le domaine, quelle que soit la direction de l'écoulement. La diffusion numérique globale est alors une moyenne entre les diffusions maximale et minimale par rapport à la géométrie des bords. C'est ce qui explique probablement le fait que l'ordre de l'erreur du schéma soit aussi bas.

Afin de vérifier l'impact de la direction de l'écoulement sur un maillage structuré avec l'approche MWUS, le schéma a été adapté sur des éléments hexaédriques. De nouveaux calculs ont été effectués sur un maillage cubique 11x11x11 avec un stockage VCCV et FCCV avec un angle d'écoulement de 35.3° et de 15.8° et 0° dans lequel l'écoulement est dans la direction de l'axe des z. Les résultats pour la norme de l'erreur sont présentés au tableau 4.5. Les figures 4.8, 4.9 et 4.10 comparent les résultats au plan de sortie pour les trois angles. Lorsque l'écoulement n'est pas aligné avec le maillage, le comportement du schéma sur les deux maillages est à peu près semblable. Cependant, lorsque le maillage est orienté selon la direction de l'écoulement, MWUS donne une solution exacte avec le maillage hexaédrique alors qu'avec le maillage tétraédrique, l'erreur est demeuré sensiblement la même. Pour des éléments cubiques, la qualité des résultats est donc fortement dépendante de l'angle de l'écoulement. Le schéma SUCCA3D de SCANLON *et al.* (1993) , basé lui aussi sur un maillage structuré, permet d'avoir une solution extacte lorsqu'un angle θ de 35.3° est utilisé (figure 4.7).

Malgré les désavantages que comporte l'utilisation de maillages structurés, il semble qu'il soit beaucoup plus simple de faire un schéma 'upwind' efficace pour un maillage structuré que pour un maillage non structuré. En effet, l'orientation des faces par rapport à l'écoulement peut être mieux controlée et il est plus aisé de prévoir les différents cas de figure possibles. L'utilisation de maillages hybrides constitue alors la meilleure solution pour la résolution de problèmes dans lesquels des gradients importants sont présents.

Une autre façon d'améliorer la solution avec les mêmes schémas d'interpolation aurait été de raffiner le maillage dans la zone de discontinuité. Cependant, les outils du mailleur ne permettaient pas un tel raffinement et aucune technique de maillage adaptatif ou de maillage mobile ne peut encore être utilisée avec $\boldsymbol{VF}^{++}$.

Maillage	Norme de l'erreur		
	FCCV - schéma MWUS	VCCV - schéma MWUS	VCCV - schéma FOUS
5x5x5	0.19304	0.21252	0.20458
7x7x7	0.17945	0.19948	0.18781
9x9x9	0.17136	0.19166	0.17922
11x11x11	0.16348	0.18394	0.17058
15x15x15		0.17234	0.15710
19x19x19		0.16465	0.15172

Tableau 4.3: Résultats des calculs, $\theta = 15.8°$

Maillage	Norme de l'erreur		
	FCCV - schéma MWUS	VCCV - schéma MWUS	VCCV - schéma FOUS
5x5x5	0.22215	0.30374	0.28435
7x7x7	0.20891	0.27295	0.24305
9x9x9	0.19889	0.25305	0.21647
11x11x11	0.19092	0.23873	0.19718
15x15x15		0.21884	0.17098
19x19x19		0.20521	0.15351

Tableau 4.4: Résultats des calculs, $\theta = 35.3°$

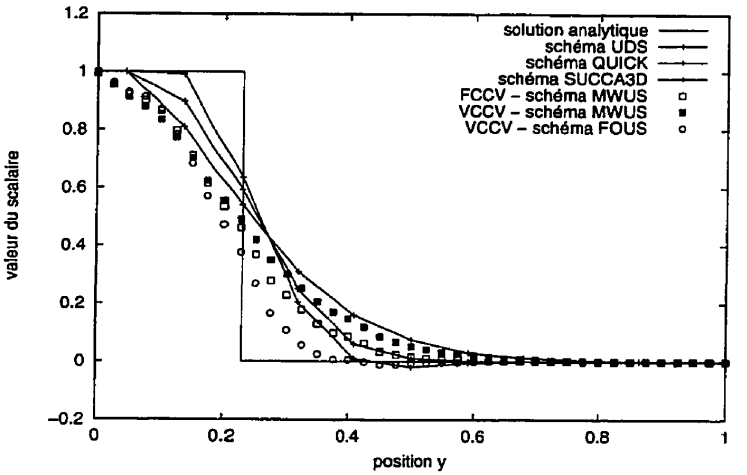


Figure 4.6: Profil de concentration pour différents schémas, $\theta = 15.8°$

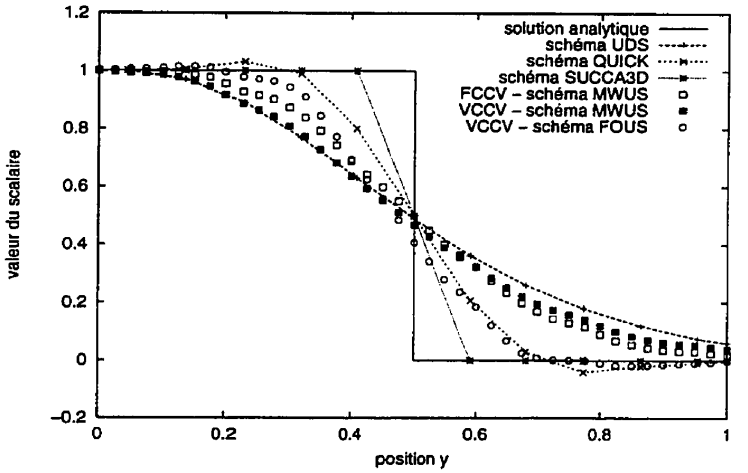


Figure 4.7: Profil de concentration pour différents schémas, $\theta = 35.3°$

Angle de l'écoulement	Norme de l'erreur			
	Tétraèdre FCCV	Tétraèdre VCCV	Hexaèdre FCCV	Hexaèdre VCCV
35.3°	0.19092	0.23873	0.20375	0.24215
15.8°	0.16348	0.18394	0.17428	0.18452
0°	0.16042	-	0.0	0.0

Tableau 4.5: Influence de la géométrie sur MWUS, maillage 11x11x11

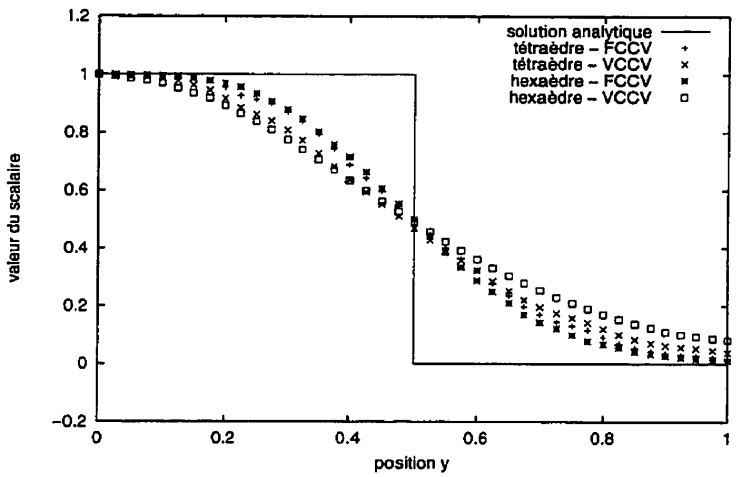


Figure 4.8: Influence de la géométrie sur MWUS, $\theta = 35.3°$

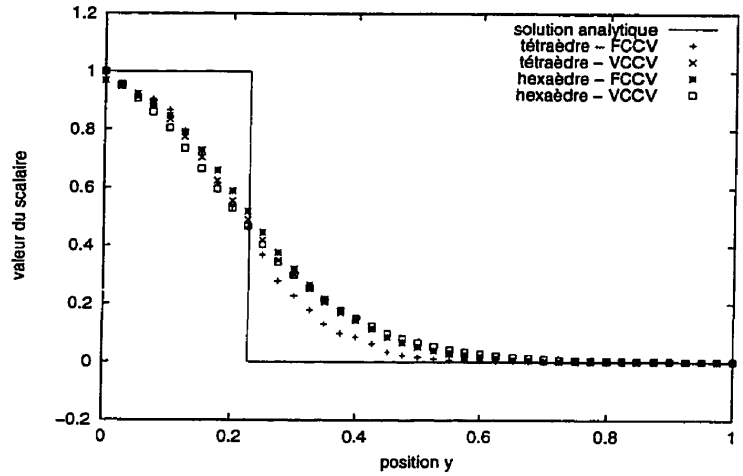


Figure 4.9: Influence de la géométrie sur MWUS, $\theta = 18.4°$

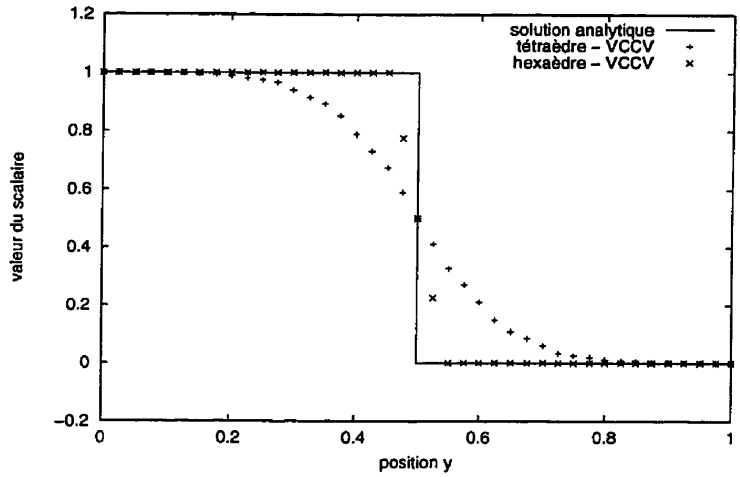


Figure 4.10: Influence de la géométrie sur MWUS, $\theta = 0°$

4.2 Le problème de Smith et Hutton

Le deuxième cas-test vise également l'étude de la diffusion numérique des deux schémas 'upwind' utilisés. Dans ce cas-ci cependant, l'étude porte sur le comportement d'une équation de convection-diffusion et non seulement d'une équation de convection pure. Il est alors possible d'apprécier le comportement des schémas dans différents cas d'écoulement et de mesurer l'impact de la diffusion numérique sur la diffusion du modèle.

Le problème posé par SMITH et HUTTON (1982), consiste à résoudre une équation de convection-diffusion, sans terme source, dans un champ de vitesse imposé:

$$\int_\Omega (\boldsymbol{V}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{\Phi}\,d\Omega \;=\; \int_\Omega \frac{1}{Re}\nabla^2\,\boldsymbol{\Phi}\Omega \tag{4.1}$$

Le champ de vitesse est solenoïdal égal à:

$$\begin{aligned} u &= 2y(1-x^2) \\ v &= -2x(1-y^2) \end{aligned} \tag{4.2}$$

avec les conditions aux frontières suivantes:

à l'entrée:

$$\Phi \;=\; 1+\tanh[10(2x+1)] \tag{4.3}$$

aux bords:

$$\Phi \;=\; 0\begin{cases} x=-1 & et \quad 0\le y\le 1 \\ y=\;\;1 & et \quad -1\le x\le 1 \\ x=\;\;1 & et \quad 0\le y\le 1 \end{cases}$$

et à la sortie

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$$

Le test se réalise pour $0 \leq Re < \infty$. Un comportement significatif est à observer avec la résolution de l'équation (4.1) lorsque $Re \Rightarrow \infty$. La dominance du terme convectif doit alors refléter une parfaite symétrie de la propriété Φ entre l'entrée et la sortie.

Le domaine de calcul du problème est illustré à la figure 4.11 et l'extension en trois dimensions de ce problème se fait directement. La géométrie de base utilisée est présentée à la figure 4.12. Deux faces supplémentaires apparaissent sur lesquelles une condition de Neumann correspondant à la condition sortie est imposée.

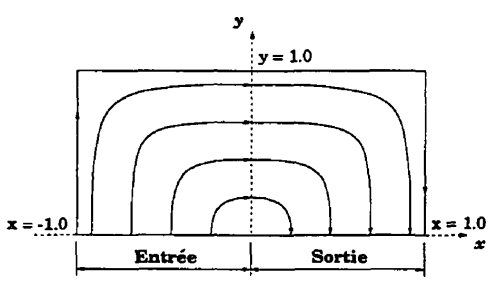


Figure 4.11: Géométrie du problème de Smith et Hutton

Les résultats ont été analysés en reproduisant le profil de la valeur de Φ sur la ligne médiane ($z = 0.5$) du plan de sortie pour fin de comparaison avec la solution analytique.

Deux maillages uniformes, construits de façon semblable au cas-test précédent, sont utilisés pour résoudre le problème. Le premier maillage comporte 20x9x9 cubes et le deuxième 30x15x15. Les deux formes de stockage (FCCV, VCCV) ont été

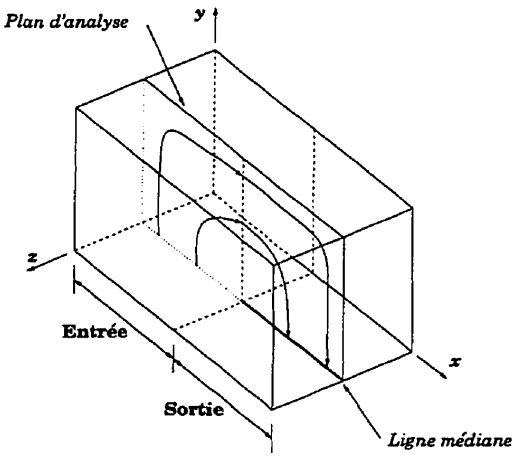


Figure 4.12: Extension en trois dimensions

utilisées pour discrétiser le domaine en volumes de contrôle. Le stockage FCCV a été employé pour le premier maillage seulement à cause du manque d'espace mémoire disponible pour la résolution du système matriciel. Le nombre de volumes de contrôle obtenus pour le premier maillage est de 15500 pour le stockage FCCV et de 2100 pour le stockage VCCV (7950 pour le maillage 30x15x15). Pour chaque combinaison, les schémas upwind FOUS et MWUS ont été utilisés et des simulations numériques ont été effectuées pour des nombres de Reynolds variant entre 10 et 10^6. Tous les calculs ont été faits de façon implicite et la solution a été obtenue après une itération. Un exemple de solution est donné à la figure 4.13.

Les figures 4.14 à 4.19 présentent les principaux résultats des tests effectués. L'analyse des résultats permet de dégager deux observations. La première porte sur le comportement différent des deux schémas selon le nombre de Reynolds et la deuxième sur l'influence du stockage de la variable sur les schémas.

Les figures 4.14 et 4.15 montrent la valeur de Φ sur le plan $z = 0.5$ des différentes combinaisons stockage-schémas pour un nombre de Reynolds de 10. Les lignes d'iso-

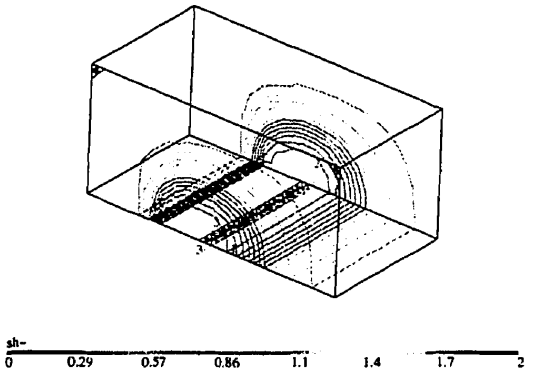


Figure 4.13: Stockage VCCV, schéma MWUS, Reynolds 1000

valeurs sont beaucoup plus irrégulières avec le schéma FOUS et la solution est perturbée à la sortie dénotant un problème de condition frontière. Avec le schéma MWUS, les solutions obtenues des deux stockages donnent sensiblement les mêmes résultats. Il est important de souligner que la différence de régularité et de netteté des iso-lignes entre les deux formes de stockage FCCV (figure 4.14) et VCCV (figure 4.15) est dûe à l'interpolation linéaire faite pour représenter les iso-valeurs, et non à la régularité de la solution. La comparaison des résultats avec la solution analytique sur la ligne médiane est montrée à la figure 4.16 ou l'on remarque que le schéma MWUS a un meilleur comportement en plus d'être plus stable. La méthode de calcul la plus appropriée du terme de diffusion semble donc être celle du schéma MWUS dans lequel le gradient est estimé à partir d'une fonction d'interpolation linéaire non modifiée.

Lorsque qu'on augmente le nombre de Reynolds et que l'influence de la diffusion diminue, la tendance s'inverse entre les deux schémas. Ainsi, pour un nombre de Reynolds supérieur à 100, le comportement des schémas s'apparente avec le cas-

test précédent dans lequel le schéma FOUS combiné au stockage VCCV donne les meilleurs résultats. Les figures 4.17 à 4.19 comparent les résultats des schémas FOUS et MWUS pour des nombres de Reynolds de 100, 1000, et 10^6. Avec FOUS, on obtient des résultats nettement supérieurs car les résultats numériques sont beaucoup plus près des solutions analytiques. Le raffinement du maillage dans le cas de FOUS a un impact plus important sur la précision de la solution que dans le cas de MWUS. On peut supposer que l'ordre du schéma FOUS est légèrement supérieur au schéma MWUS, ce qui confirme la tendance observée avec le premier cas-test. FOUS n'a pas convergé pour un nombre de Reynolds supérieur à 80 avec le stockage FCCV. On remarque aussi le dépassement des conditions limites avec le schéma FOUS, pour un nombre de Reynolds élevé. L'usage de ce schéma est donc sujet aux contraintes soulignées dans le test de convection pure.

Les figures 4.20 et 4.21 illustrent l'évolution des iso-lignes de Φ pour des Reynolds de 1000 et 10^6 sur deux maillages différents avec le schéma MWUS. La figure 4.22 montre la concentration au plan de sortie sur la ligne médiane. On remarque que la solution ne change à peu près pas entre les différents essais. Ces résultats indiquent que le type de stockage n'a pas une influence déterminante sur la précision du schéma et que le raffinement du maillage n'améliore pas de façon notable la solution. Enfin, pour un Reynolds supérieur à 100, la diffusion numérique est beaucoup plus importante que la diffusion du modèle mathématique. Les mêmes conclusions que le cas-test précédent s'appliquent pour le schéma MWUS. Sur un maillage tétraédrique, la diffusion numérique est inévitable et il est difficile d'en amoindrir l'ampleur.

Étant donné que la diffusion numérique est très importante avec l'approche MWUS sur des éléments tétraédriques, deux essais ont finalement été effectués sur un maillage cubique de 20x9x9 avec un stockage VCCV afin de tester le comportement du schéma

avec des éléments hexaédriques. Les figures 4.23 et 4.24 présentent les résultats de ces essais pour des nombres de Reynolds de 1000 et 10^6. Tel que prévu, le résultat est légèrement meilleur sans toutefois apporter une réelle amélioration. L'écoulement n'est à peu près pas enligné avec les lignes de l'écoulement, et par conséquent il n'y a pas vraiment d'avantage à utiliser une approche plutôt qu'une autre.

Une dernière remarque concernant le test de Smith et Hutton: le schéma MWUS n'a pas convergé avec un stockage FCCV sur des éléments tétraédriques et hexaédriques lorsque le nombre de Reynolds était élevé. L'explication de ce résultat vient probablement de la forme des volumes de contrôle. Bien qu'il ait été remarqué que le stockage n'a pas d'influence sur la précision du schéma, il se peut qu'une géométrie particulière entraîne un comportement différent. Le champ de vitesse imposé dans ce type de problème a une courbure importante. Les volumes de contrôle stockés aux sommets ont une forme polyédrique et échangent de l'information avec davantage d'éléments adjacents. Ils sont alors capables de transmettre l'information à travers le champ de vitesse imposé. Les volumes de contrôle stockés aux faces sont beaucoup plus unidirectionnels à cause de leur forme et c'est probablement la raison pour laquelle le schéma n'a pas convergé.

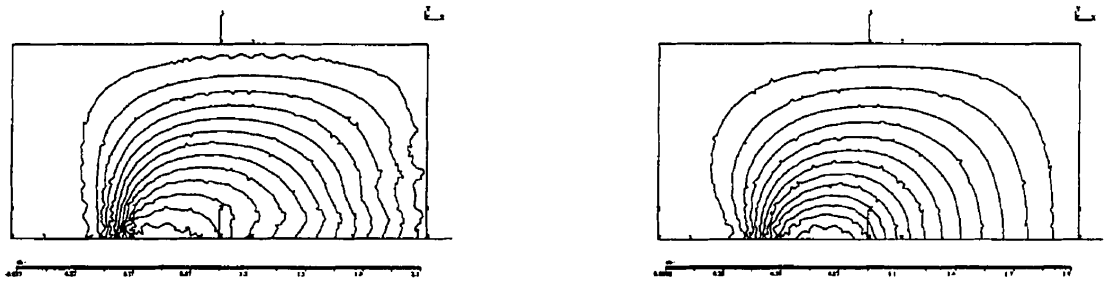


Schéma FOUS Schéma MWUS

Figure 4.14: Maillage 20x9x9, Stockage FCCV, Reynolds 10

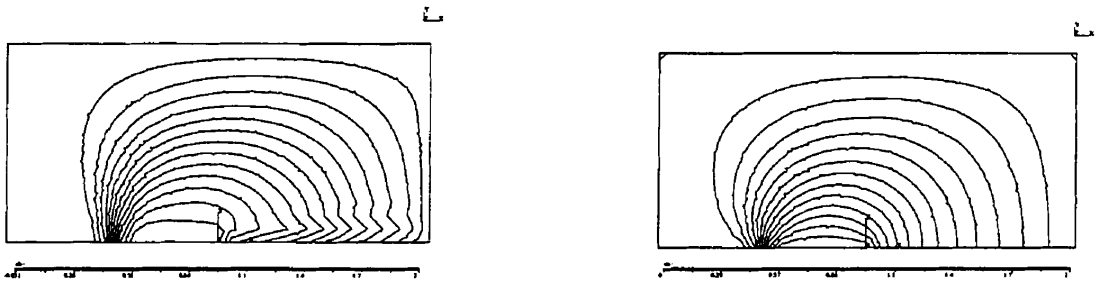


Schéma FOUS Schéma MWUS

Figure 4.15: Maillage 30x15x15, Stockage VCCV, Reynolds 10

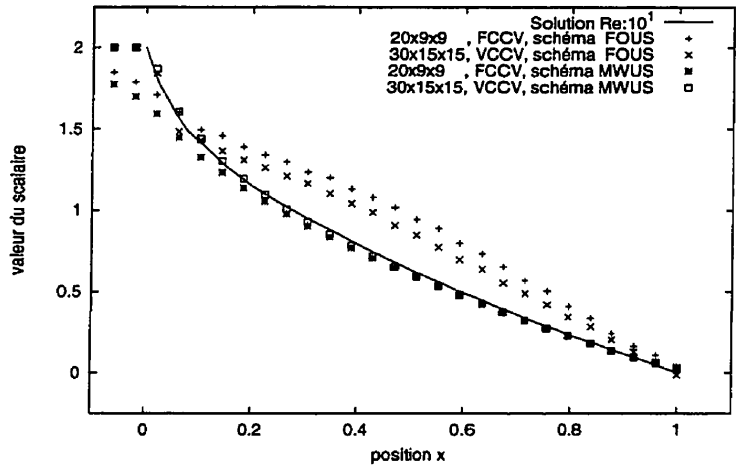


Figure 4.16: Comparaison des schémas à Reynolds 10

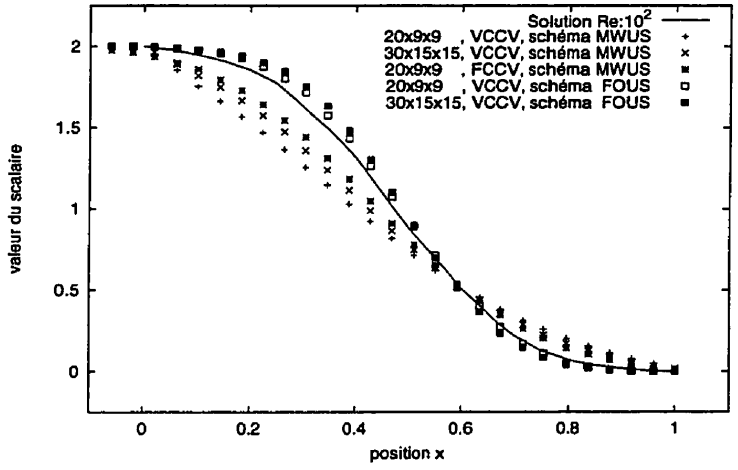


Figure 4.17: Comparaison des schémas à Reynolds 100

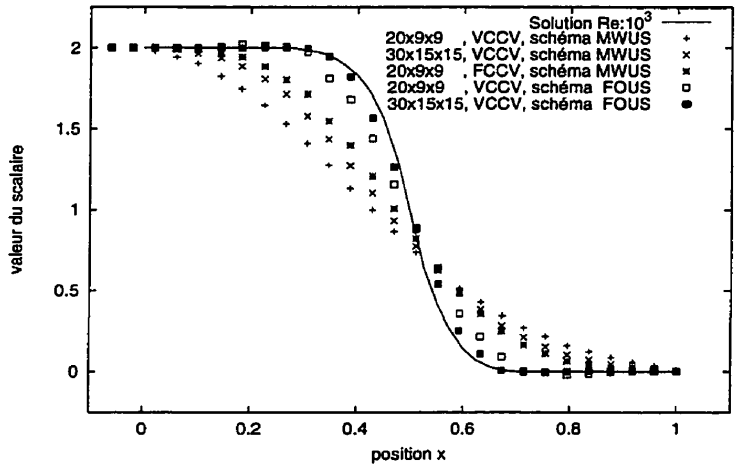


Figure 4.18: Comparaison des schémas à Reynolds 1000

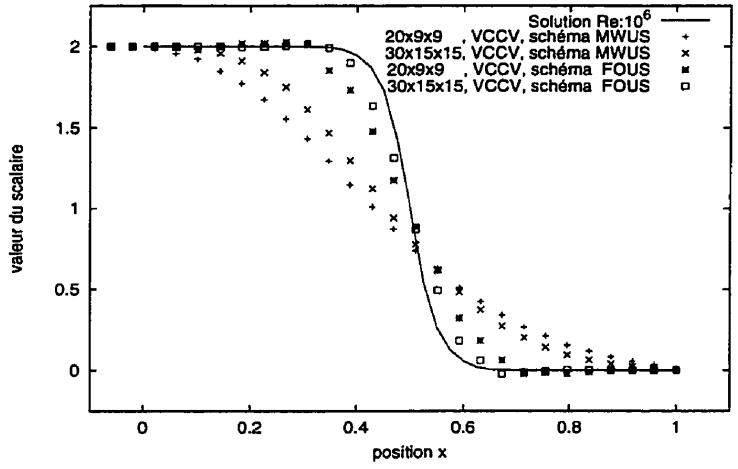
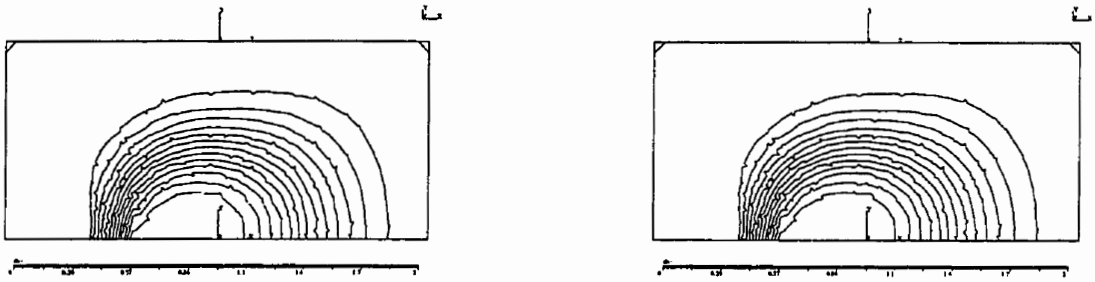
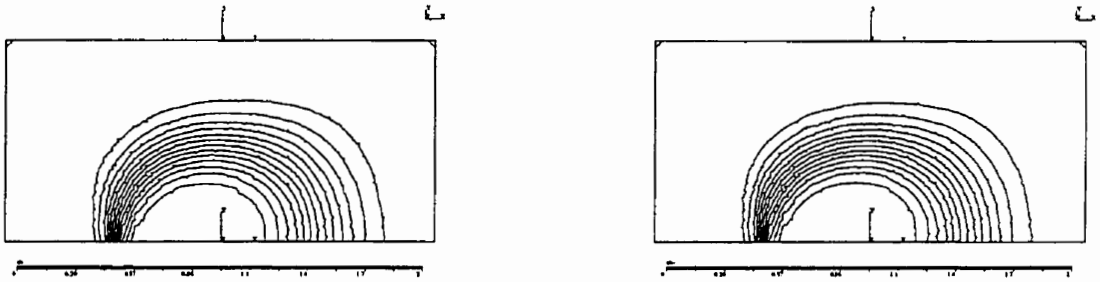


Figure 4.19: Comparaison des schémas à Reynolds 10^6



Reynolds 1000 Reynolds 10^6

Figure 4.20: Maillage 20x9x9, Stockage VCCV, Schéma MWUS



Reynolds 1000 Reynolds 10^6

Figure 4.21: Maillage 30x15x15, Stockage VCCV, Schéma MWUS

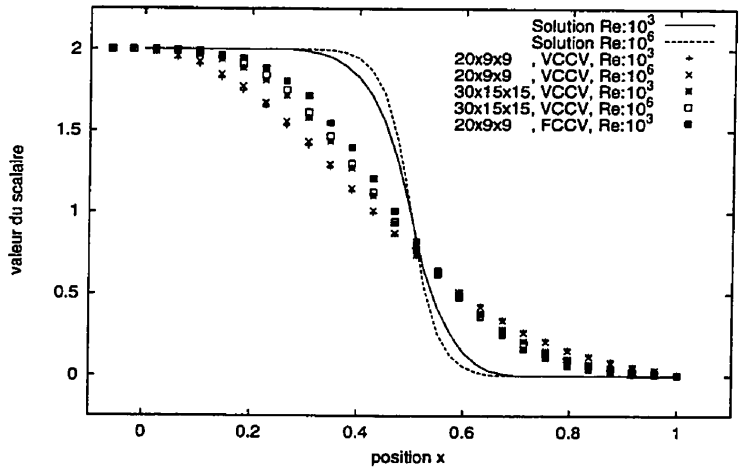


Figure 4.22: Comportement de MWUS avec l'augmentation du nombre de Reynolds

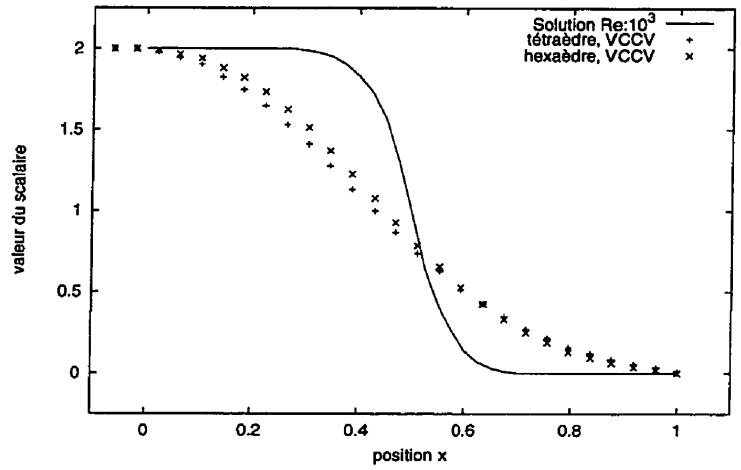


Figure 4.23: Influence de la géométrie sur MWUS à Reynolds 1000

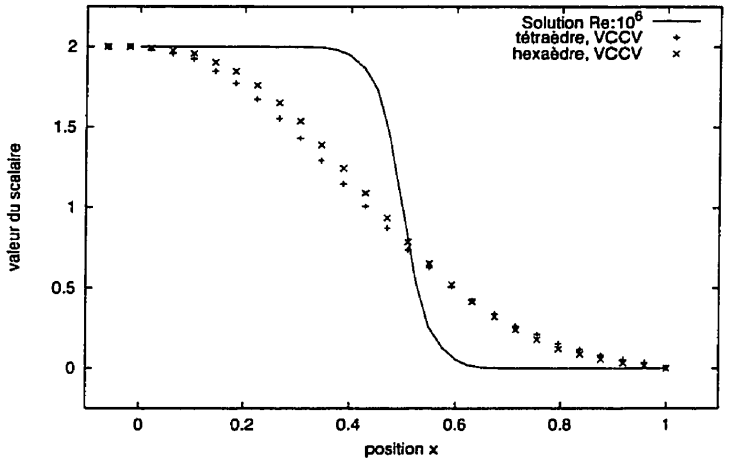


Figure 4.24: Influence de la géométrie sur MWUS à Reynolds 10^6

4.3 Test de l'écoulement dans un tube de section carré

Le cas-test suivant vise la validation qualitative et quantitative de la résolution des équations de Navier-Stokes avec la méthode SIMPLER. Pour ce faire, le cas de l'écoulement dans un tube carré a été étudié. Dans ce type de problème, la pression constitue le moteur de l'écoulement. L'influence du terme source de l'équation de transport avec l'utilisation d'un schéma 'upwind' est à considérer.

La géométrie adimensionnelle est illustrée à la figure 4.25. Le champ de vitesse à l'entrée est uniforme, égal à un, dans la direction de l'axe des x. Des conditions frontières de non-glissement sont imposées sur les parois du tube. À la sortie, on suppose un écoulement développé nous permettant de mettre une condition de Neumann. Pour un écoulement développé, les équations de Navier-Stokes se simplifient et seule reste l'équation de mouvement en x liant la variation de pression aux termes de dissipation visqueuse.

L'équation régissant l'écoulement est donnée par la relation suivante:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) = -K \tag{4.4}$$

L'équation de Poisson pour la vitesse u peut se résoudre en utilisant la méthode de séparation de variable. La solution exacte est donnée par:

$$u = \zeta \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{16\sin[(2m+1)\pi z]\sin[(2n+1)\pi y]}{\pi^4(2m+1)(2n+1)[(2m+1)^2+(2n+1)^2]} \tag{4.5}$$

La constante ζ a été ajustée afin d'obtenir un débit unitaire.

$$Q = \int_0^1\int_0^1 u dy\, dz = 1.0 \tag{4.6}$$

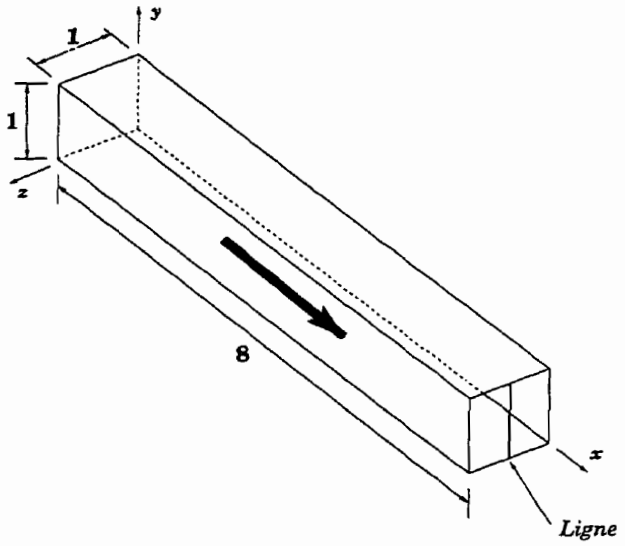
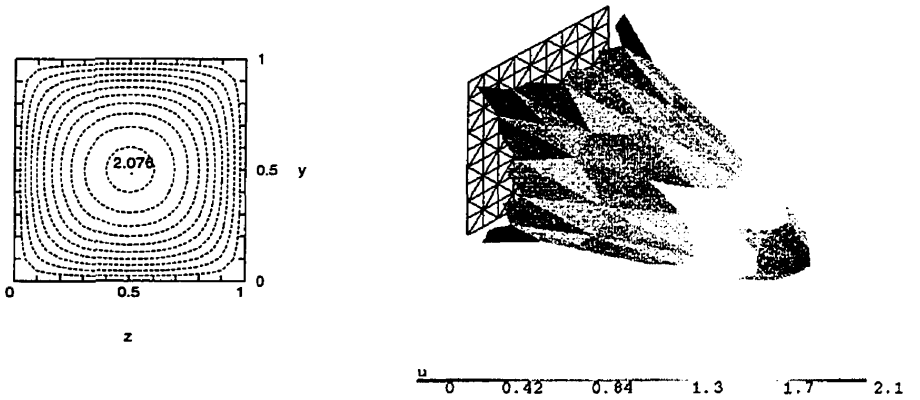


Figure 4.25: Géométrie du tube de section carré

La solution de cette équation est illustrée à la figure 4.26 montrant les lignes d'iso-vitesse et une vue tridimensionnelle de la vitesse axiale.



Lignes de contour iso-vitesse

Profil de vitesse

Figure 4.26: Solution analytique de l'écoulement développé

Les résultats des tests précédents permettent de choisir le type de fonction upwind en fonction du type de stockage. Lorsque l'équation de mouvement est résolue avec les vitesses aux faces des tétraèdres (FCCV), le schéma MWUS est utilisé et lorsque le stockage des vitesses est aux sommets (VCCV), le schéma FOUS, plus précis, est employé. Le fait d'utiliser le schéma MWUS, pour le calcul des vitesses aux faces, assure une plus grande stabilité du résoluteur car le calcul de la conservation de la masse est basé sur ces vitesses. Les essais numériques ont été calculés avec un nombre de Reynolds de 100. La taille de la géométrie étant limitée par la mémoire, le Reynolds a été choisi de facon à ce que la longueur de développement ne dépasse pas la moitié du domaine. Le critère de convergence utilisé est basé sur le calcul de la norme de la variation de Φ entre deux itérations successives, divisé par la norme du scalaire. Le taux de convergence a été fixé à 10^{-6}. Les calculs ont tous convergé avec moins de 150 itérations. Les résultats ont par la suite été analysés en calculant la norme de l'erreur sur le plan de sortie du fluide et en comparant le profil de vitesse

sur la ligne médiane avec la solution analytique.

Les tests effectués ont été réalisés avec plusieurs séries de maillages différents. Dans le problème donné, le calcul de la pression dépend du raffinement du maillage dans la direction x et le calcul de la vitesse dépend du maillage dans les deux autres directions. La première série de calcul se fait donc en raffinant le maillage selon l'axe des x, afin de mesurer l'impact du rapport des longueurs des côtés des éléments avec la précision du schéma. Deux raisons motivent une telle approche: la méthode de calcul de la pression n'est pas du même ordre que la vitesse et le rapport du nombre de volumes de contrôle vitesse-pression n'est pas le même selon que le stockage soit FCCV ou VCCV. Les maillages utilisés sont uniformes et constitués de 20x5x5, 30x5x5, 40x5x5 et 80x5x5 cubes divisés en tétraèdres. Le tableau 4.6 représente les résultats obtenus pour la norme de l'erreur avec les deux schémas retenus. On remarque que le rapport de longueur optimal pour les deux schémas se situe entre 1.3:1:1 et 1:1:1. L'écart entre les différents maillages n'est pas vraiment significatif sauf pour le stockage VCCV lorsque le rapport de longueur devient inférieur à un pour la direction x. La convergence a été plus lente avec le raffinement du maillage passant de 56 à 141 itérations entre les deux extrêmes. La variation de pression a aussi été modifiée avec le raffinement du maillage passant d'un delta pression de 2.8 à 3.4.

La deuxième série de tests sert à faire une approximation de l'ordre des schémas. Les maillages utilisés sont de 40x5x5, 56x7x7 et 72x9x9. Le tableau 4.7 représente les résultats obtenus pour la norme de l'erreur. L'ordre des schémas donne 0.351 avec VCCV-FOUS et 1.327 avec FCCV-MWUS. La différence entre les deux schémas s'explique par le fait que le calcul du champ de pression se fait avec les vitesses stockées aux faces. L'équation de conservation du mouvement, appliquée à des

vitesses stockées aux sommets (VCCV), utilise donc un champ de pression qui n'est pas calculé par les mêmes vitesses, ce qui diminue la précision et l'ordre du schéma. Ce fait a été vérifié en calculant le flux massique à la sortie du canal. Dans tous les cas, le flux massique a été conservé pour FCCV-MWUS et a varié entre 0.91 et 1.006 pour VCCV-FOUS. L'évolution de cette variation de masse suit le raffinement du maillage. Plus le maillage est raffiné, plus la masse est conservée.

Afin de comparer la valeur des résultats, il est important de remarquer que le nombre de volumes de contrôle diffère grandement d'un stockage à l'autre. Ainsi, pour le stockage FCCV, le nombre de volumes de contrôle pour un maillage de 72x9x9 est de 61074 et il est de 7300 dans le cas du stockage VCCV. Les résultats similaires pour les deux schémas indiquent donc que le schéma FOUS a un meilleur comportement. Le fait qu'il y ait plus d'élements de pression dans le terme source de l'équation algébrique rend aussi le calcul plus précis.

Les figures 4.27 et 4.28 montrent l'évolution de la vitesse axiale le long de la ligne médiane avec les différents maillages. Le schéma FOUS donne nettement de meilleurs résultats. La forte diffusion numérique observée avec le schéma MWUS dans les tests précédents et la supériorité de FOUS expliquent ces résultats. Il est important de noter que le profil de vitesse, dans le cas VCCV-FOUS, est influencé par le fait que le stockage VCCV ne conserve pas exactement la masse. La diffusion numérique n'est donc pas la seule donnée à analyser. La figure 4.29 donne un exemple de convergence du calcul et présente la norme de la vitesse et de la pression pour le schéma FCCV-MWUS sur le maillage 56x7x7.

Un calcul a aussi été effectué sur un maillage 72x9x9 concentré en y et en z, le gradient de vitesse étant plus important proche des parois du tube. La figure 4.30

présente l'allure du maillage concentré à l'entrée. Les résultats du profil en sortie ne sont cependant pas concluants, montrant une diffusion numérique plus importante au centre du tube. La figure 4.31 montre les profils de vitesse obtenus sur le maillage 72x9x9 régulier et concentré. Le nombre d'éléments insuffisant dans le plan y-z explique probablement l'augmentation de l'erreur au centre du canal. L'utilisation de maillages concentré devra faire l'objet d'autres essais avant d'être utilisée.

Un dernier calcul a été effectué avec un maillage cubique, afin de vérifier le comportement du schéma MWUS et FOUS avec un maillage dont les faces sont orientées selon la direction de l'écoulement. Le test se fait sur un maillage de 56x7x7 cubes. Trois situations différentes ont été testées sur ce maillage, soit FCCV-MWUS, VCCV-MWUS et VCCV-FOUS. Les résultats sont comparés avec ceux des éléments tétraèdriques à la figure 4.32. Dans le cas de FCCV-MWUS, la diffusion numérique est beaucoup moins importante. Si l'on se fie au calcul de convection pure donnant une solution exacte, la seule diffusion numérique provient du calcul de la diffusion. Le cas VCCV-FOUS suit le même comportement observé avec les éléments tétraédriques où les résultats sont meilleurs avec FOUS qu'avec MWUS. Aidé par une meilleure évaluation de la pression, le champ de vitesse obtenu avec FOUS est pratiquement identique à la solution analytique. De plus, l'augmentation du nombre de volumes de contrôle utilisé pour le calcul de la fonction d'interpolation améliore la précision du schéma. Le résultat de VCCV-MWUS est inattendu. En effet, la solution est plus développé que la solution analytique. Le flux massique en sortie de 1.078 ne justifie pas à lui seul un tel écart. On ne peut expliquer non plus ce fait par le calcul de la convection et de la diffusion car le test de convection pure a donné une solution exacte et le test de Smith et Hutton une bonne approximation de la diffusion. L'explication vient peut-être d'un mauvais couplage pression vitesse. Il est possible

que le terme source de pression, calculé sur les faces, soit trop important pour les vitesses au sommets et cause une surévaluation de la diffusion.

Schéma	Ordre de l'erreur			
	Maillage 20x5x5 Rapport 2:1:1	Maillage 30x5x5 Rapport 1.33:1:1	Maillage 40x5x5 Rapport 1:1:1	Maillage 80x5x5 Rapport 0.5:1:1
FCCV-MWUS	0.144	0.136	0.137	0.148
VCCV-FOUS	0.122	0.115	0.117	0.154

Tableau 4.6: Ordre de l'erreur, raffinement selon l'axe X

Schéma	Ordre de l'erreur		
	Maillage 40x5x5	Maillage 57x7x7	Maillage 72x9x9
FCCV-MWUS	0.137	0.085	0.062
VCCV-FOUS	0.117	0.097	0.089

Tableau 4.7: Ordre de l'erreur

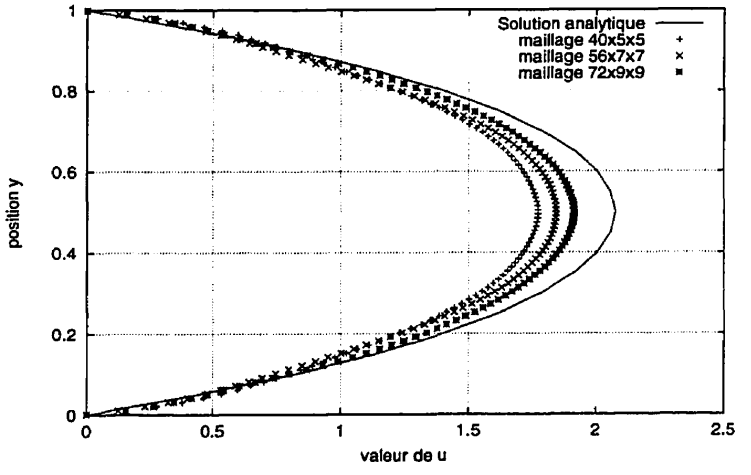


Figure 4.27: Vitesse axiale en sortie, FCCV-MWUS

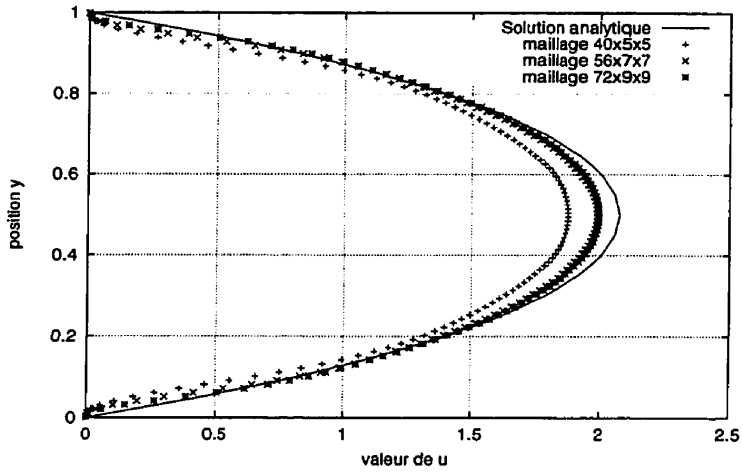


Figure 4.28: Vitesse axiale en sortie, VCCV-FOUS

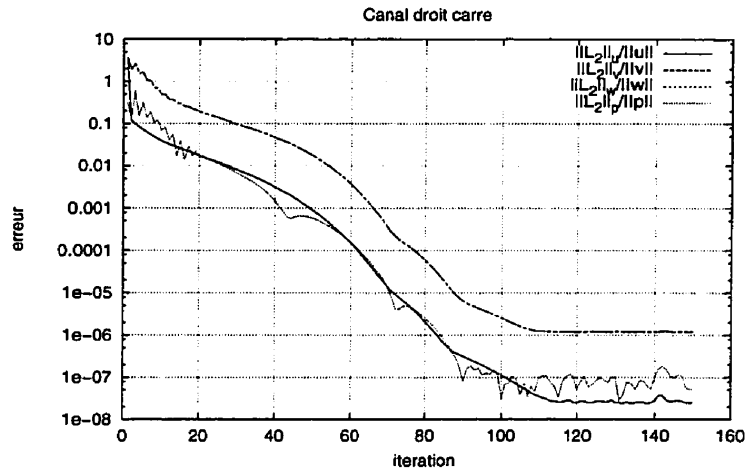


Figure 4.29: Convergence du calcul, maillage 56x7x7, schéma FCCV, MWUS

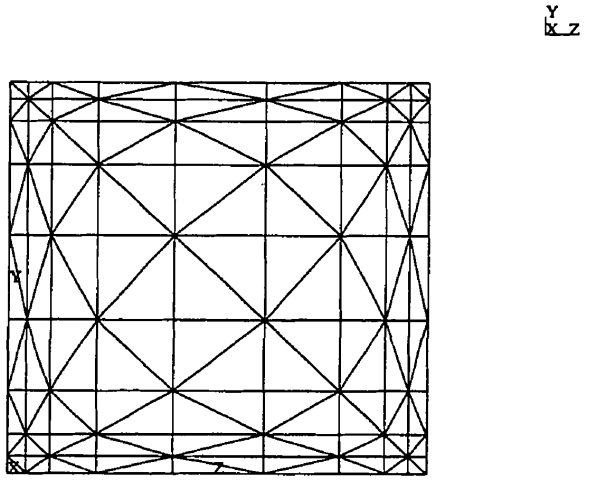


Figure 4.30: Maillage concentré, 72x9x9

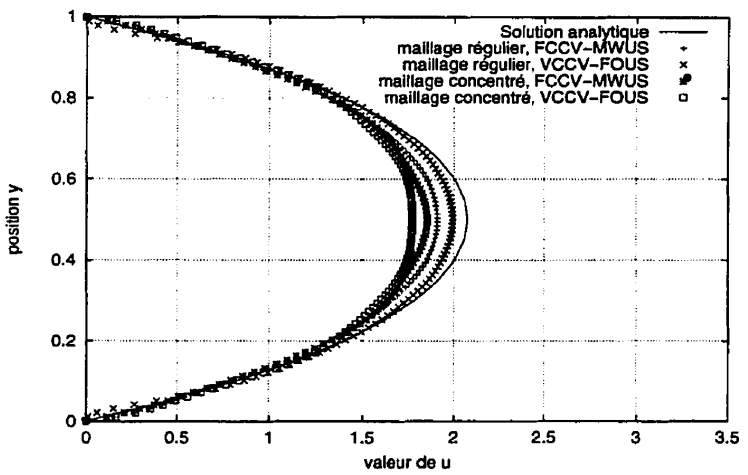


Figure 4.31: Vitesse axiale en sortie, maillage 72x9x9

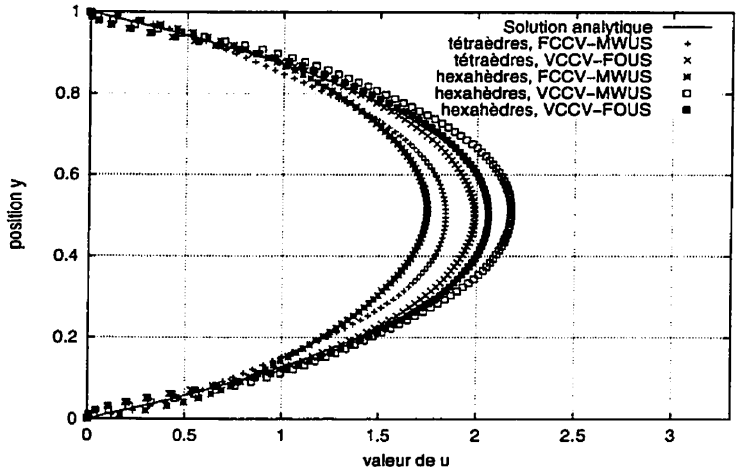


Figure 4.32: Vitesse axiale en sortie, maillage 56x7x7

4.4 Remarques

Plusieurs points peuvent être soulignés concernant le comportement des deux schémas en fonction du stockage utilisé, de la géométrie (tétraèdre, hexaèdres), de l'orientation des faces par rapport à la direction de l'écoulement et du régime de l'écoulement.

Pour ce qui est de l'influence du stockage, FOUS ne peut être utilisé avec un stockage FCCV. Lorsque les points d'intégrations sont à l'extérieur du domaine que couvre la fonction d'interpolation, le schéma devient très instable. L'influence du stockage dans le cas du schéma MWUS est minime.

Quant à l'influence de la géométrie, le fait d'utiliser des hexaèdres au lieu de tétraèdres enrichit l'interpolant $\tilde{\Phi}$. Le nombre de volumes de contrôle de l'interpolant passant de quatre à huit, les fonctions d'interpolation sont donc d'ordre plus élevé. Le calcul du terme de convection avec MWUS est amélioré uniquement si les faces des volumes de contrôles sont orientées selon l'écoulement. L'utilisation de maillage structuré dans les zônes où la direction de l'écoulement est prévisible est donc potentielliellemt avantageux.

Le comportement du schéma FOUS s'est avéré supérieur à MWUS. La capacité de ce schéma à prendre en compte la direction de l'écoulement le rend moins sujet à la diffusion numérique que MWUS. Le schéma FOUS est cependant sujet à certaines restrictions concernant la taille des éléments et le régime de l'écoulement. Le schéma MWUS constitue un compromis entre précision et stabilité et il est possible, en utilisant un maillage structuré, d'améliorer grandement le comportement du schéma.

Chapitre 5

Applications

Ce dernier chapitre présente quelques applications de la méthodologie à des problèmes d'écoulements laminaires qui n'ont pas de solution exacte connue, mais pour lesquels on possède des mesures expérimentales. On peut ainsi valider d'une certaine façon les modèles utilisés et évaluer la robustesse du résoluteur dans son ensemble.

5.1 Écoulement dans un canal avec coude à 90°

La première application correspond à un écoulement dans un canal courbé. De tels écoulements se produisent dans plusieurs applications industrielles telles que les prises d'air sur les aéronefs, les échangeurs de chaleur et les diffuseurs des turbomachines. Une des caractéristiques distinctive des écoulements en canal avec forte courbure est la création de vorticité dans la direction de l'écoulement, causée par la force centrifuge, qui produit un écoulement secondaire transversal et une redistribution des vitesses longitudinales.

La géométrie du problème est présentée à la figure 5.1. La symétrie au travers du plan $z = 0.5$ est utilisée pour diminuer la taille du maillage. La longueur des côtés de la section carrée est fixée à une unité. Les parties du canal en amont et en aval du coude sont de cinq unités et le rayon intérieur du tournant à 90° est de 1.8. Deux maillages de 5x11x40 et de 7x15x50 ont été utilisés sur des éléments tétraédriques. Un exemple de maillage grossier est présenté à la figure 5.2.

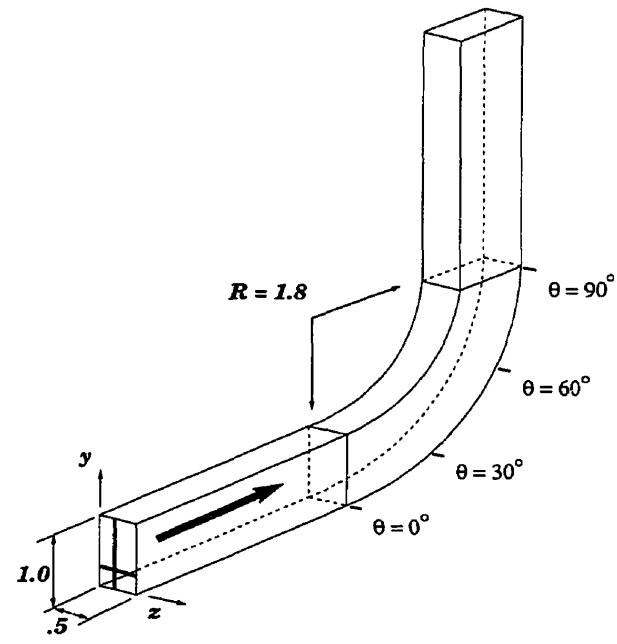


Figure 5.1: Géométrie du coude à 90°

Le nombre de Reynolds est fixé a 790 et est basé sur la vitesse moyenne à l'entrée du canal. Le profil de vitesse imposé est celui d'un écoulement laminaire développé, étudié au chapitre précédent. En sortie, une condition de gradient de vitesse nul est appliqué. Le problème a été résolu et les résultats sont comparés avec les données expérimentales de HUMPREY *et al.* (1977). Les données sont cependant limitées à une distribution des vitesses longitudinales sur différentes sections du canal.

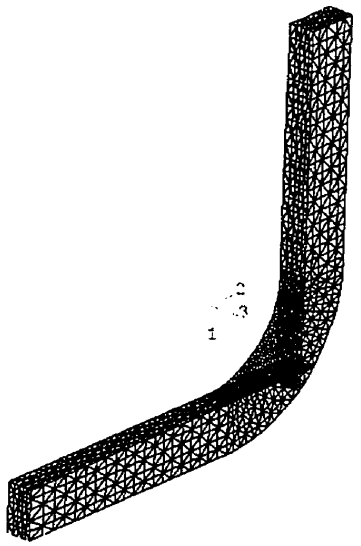


Figure 5.2: Maillage tétraédrique de 5x5x40

Les calculs ont convergés avec le schéma d'interpolation MWUS seulement. Avec le schéma FOUS, le nombre de Peclet, fonction de Reynolds et de la longueur des éléments dans le sens de l'écoulement, était trop important et la génération de coefficient négatifs rendait le schéma instable. Les deux formes de stockage, aux sommets et aux faces des tétraèdres, ont été utilisées. Les résultats provenant du stockage au sommet ne sont cependant pas présentés. En effet, ce type de discrétisation ne garantissant pas la conservation de la masse, la perte atteignait 25% avec le maillage le plus grossier et 20% dans le cas du maillage fin. Un calcul a également été fait avec une reconstruction en gradient de la pression (RIDA, 1993) sur le maillage 5x11x40, pour fin de comparaison avec la méthode SIMPLER utilisée. Des essais ont aussi été réalisés avec des éléments hexaédriques, mais les calculs n'ont pas convergé. La forme des volumes de contrôle semble donc jouer un rôle crucial dans le comportement des fonctions d'interpolation.

Les profils de vitesse obtenus à partir des différents maillages sont illustrés aux figures5.4 à 5.7. Le profil de vitesse est présenté sur quatre plans différents situés le long du coude dont l'emplacement est montré à la figure 5.1. Sur chaque plan, la vitesse longitudinale est donnée sur la ligne $z = 2.5$ et $z = 0.0$. Les résultats obtenus avec le schéma SIMPLER sont supérieurs à ceux obtenus avec une reconstruction du gradient de pression. On s'aperçoit que, dans la plupart des sections du canal, les résultats du maillage le plus fin sont sensiblement meilleurs que pour le maillage grossier, indiquant que la solution n'est pas indépendante du maillage. Il n'a cependant pas été possible de faire des calculs avec un maillage plus fin étant donné le manque d'espace mémoire. La diffusion numérique reste donc importante près des endroits où il y a un fort gradient de vitesse.

À la figure 5.8, la vitesse dans le sens de l'écoulement est comparée aux données expérimentales pour la section $\theta = 60°$. Sur cette section, la distribution de la vitesse est donnée pour cinq positions radiales différentes. On remarque une certaine différence entre les résultats expérimentaux et numériques, surtout pour les sections à l'intérieur du coude. Il reste que les valeurs extrêmes situées près de la frontière extérieure sont bien capturées par le modèle.

À la figure 5.3, les résultats numériques du maillage le plus fin sont confrontés a ceux de WINTERS (1987), avec un maillage de 14x28x50, et à ceix de JESSEE et FIVELAND (1996), sur un maillage de 14x28x84, pour la section $\theta = 90°$ sur la ligne $z = 2.5$. Considérant que les maillages utilisés par ceux-ci sont beaucoup plus fins et que les modèles qu'ils utilisent sont basés sur des schémas d'ordre supérieur, les résultats sont satisfaisants. Ces données permettent aussi d'apprécier la diffusion numérique causée par un modèle du premier ordre.

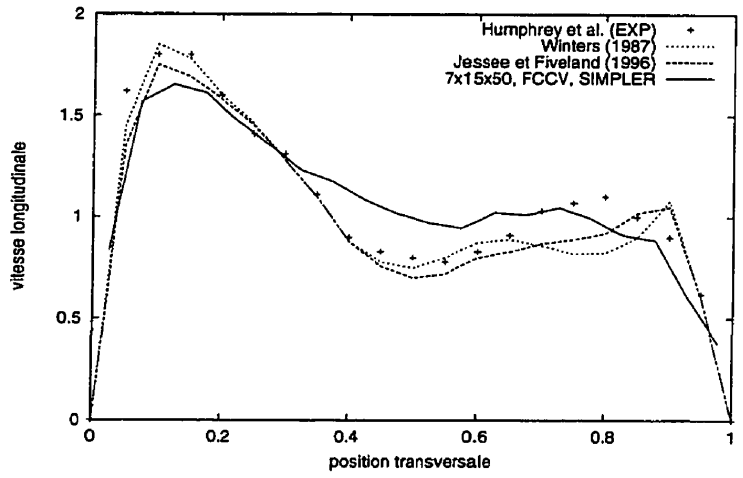
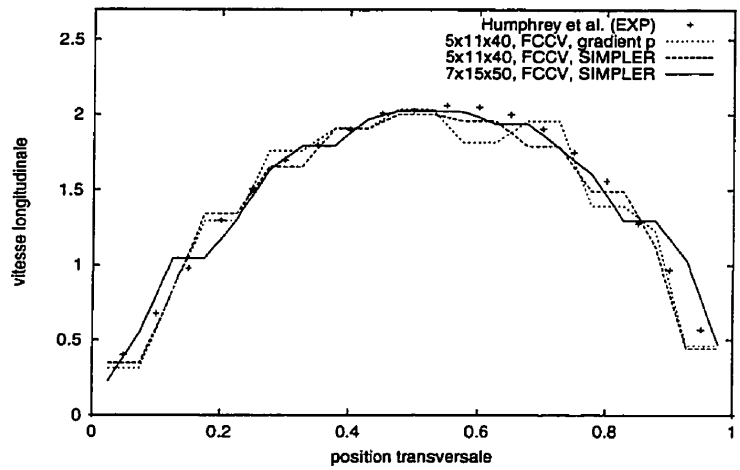


Figure 5.3: Comparaisons des schémas à $\theta = 90°$, $z = 0.25$

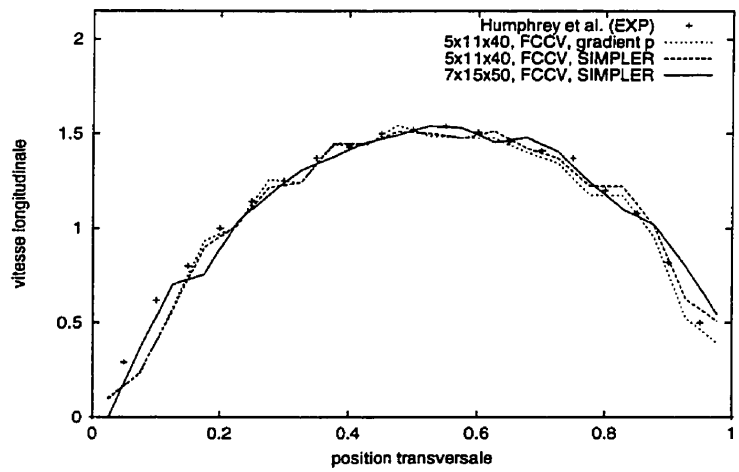
À la figure 5.9 sont tracées les vitesses transversales de la section $\theta = 90°$ tirées du maillage le plus fin. Sur ce plan, on constate un écoulement secondaire complexe bien établi. Deux vortex peuvent être identifiés. Si l'on compare le champ de vitesse à celui obtenu par JESSEE et FIVELAND (1996), on constate que les deux principaux vortex sont présents. Un troisième vortex, très faible, situé près de la ligne de symétrie au milieu de la section, n'est pas capté par le modèle, et est probablement dû au manque de raffinement du maillage. Sur la figure 5.10 sont tracés les contours de pression sur plusieurs plans transversaux, dans la région du coude et la partie droite en aval. Le vortex généré dans le coude est dissipé dans la partie droite du tube.

La figure 5.11 donne l'évolution de la convergence du calcul pour le maillage 7x15x50 et le stockage aux faces. Les courbes représentent la norme de la vitesse, de la pression et de la correction de pression. On remarque que les courbes de pression et de correction de pression ont tendance à osciller, diminuant fortement la convergence

des termes de vitesse. Le modèle n'arrive pas à converger vers une solution stable, mais a tendance à osciller entre une solution respectant la continuité et une solution respectant l'équation de mouvement. Le calcul du terme source dans l'équation de mouvement semble être à l'origine de cette instabilité. Il n'est pas d'ordre suffisamment élevé pour permettre de représenter adéquatement la physique du problème.

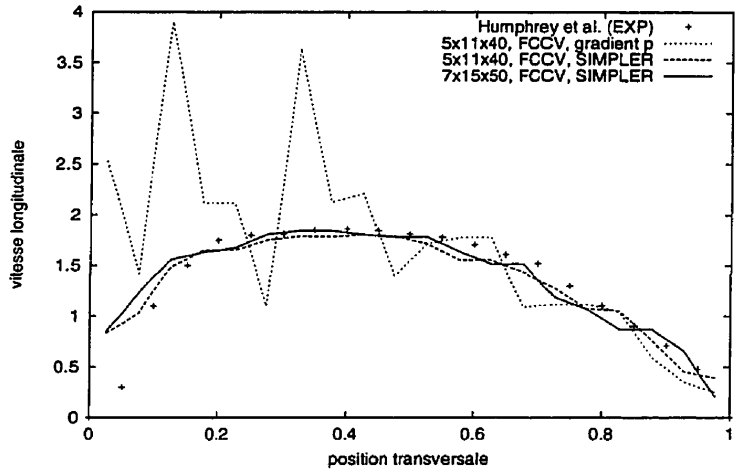


$\theta = 0°$, $z = 0$

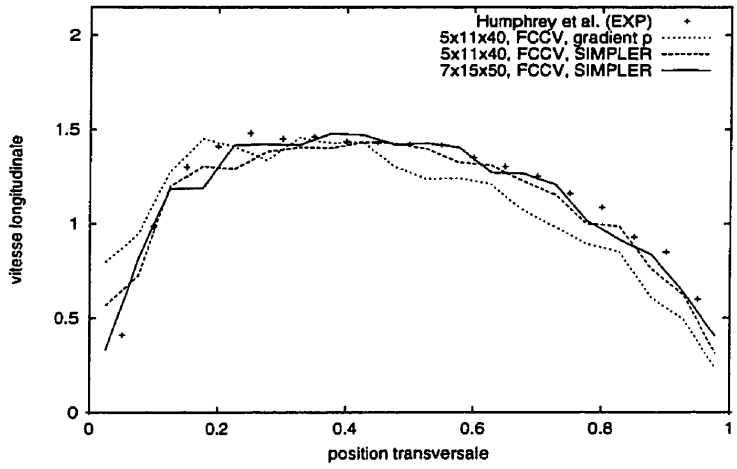


$\theta = 0°$, $z = 0.25$

Figure 5.4: Profil de vitesse longitudinale

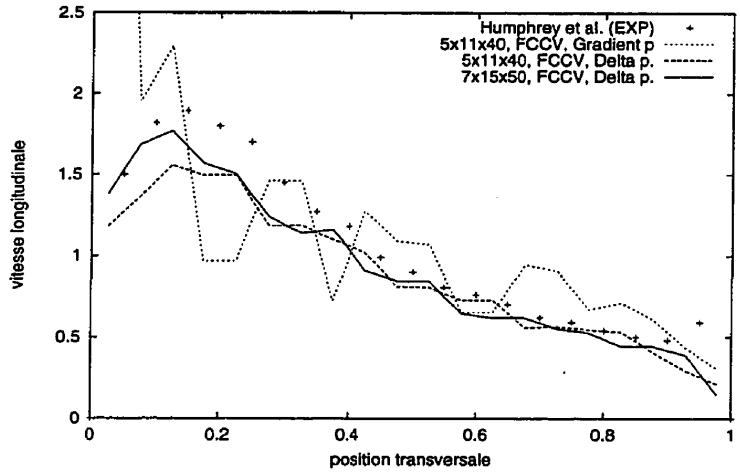


$\theta = 30°$, $z = 0$

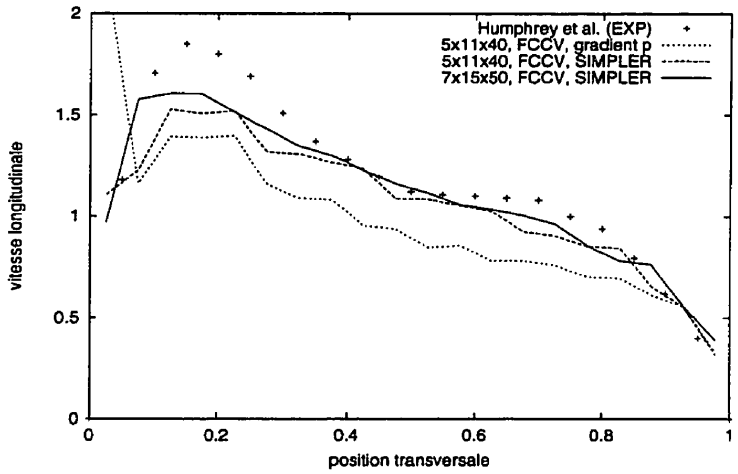


$\theta = 30°$, $z = 0.25$

Figure 5.5: Profil de vitesse longitudinale

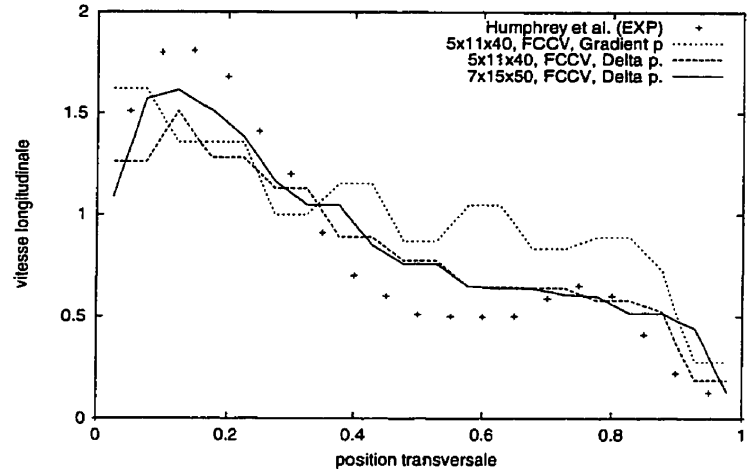


$\theta = 60°$, $z = 0$

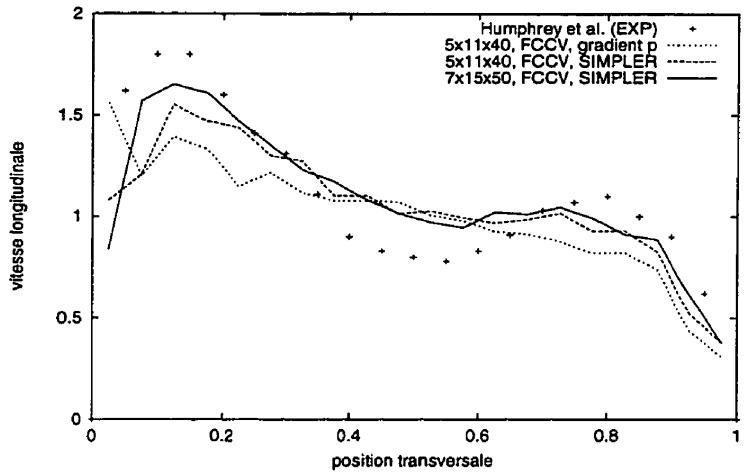


$\theta = 60°$, $z = 0.25$

Figure 5.6: Profil de vitesse longitudinale

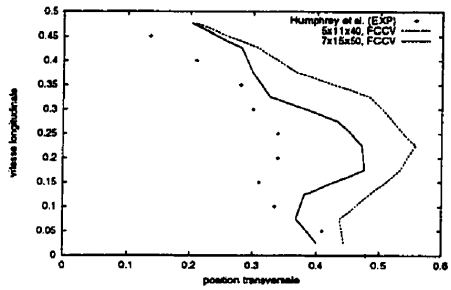


$\theta = 90°$, $z = 0$

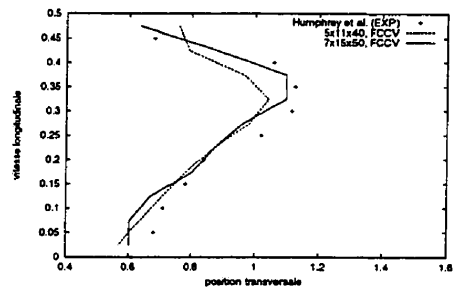


$\theta = 90°$, $z = 0.25$

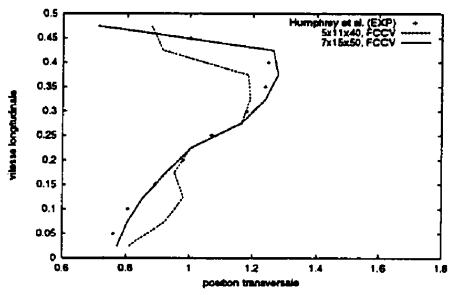
Figure 5.7: Profil de vitesse longitudinale



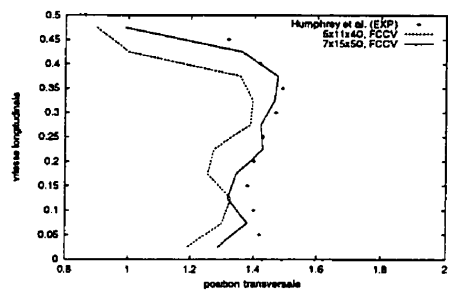
$r - R = 0.1$



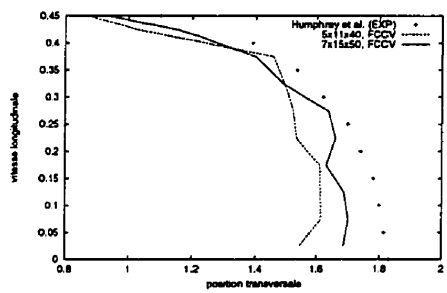
$r - R = 0.3$



$r - R = 0.5$



$r - R = 0.7$



$r - R = 0.9$

Figure 5.8: Distribution de la vitesse, $\theta = 60°$

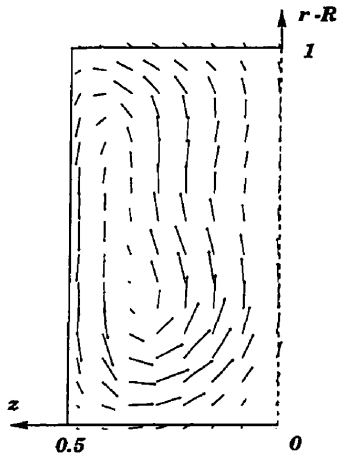


Figure 5.9: Champ de vitesse transversal à la section $\theta = 90°$

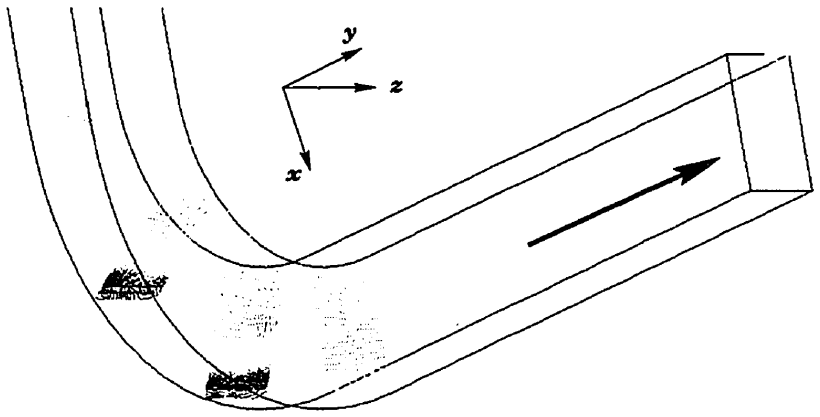


Figure 5.10: Contour de pression à différentes sections

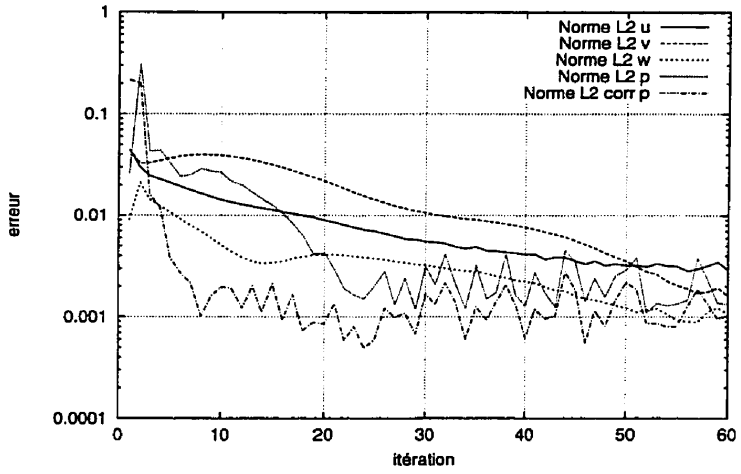


Figure 5.11: Convergence du calcul, maillage 7x15x50, FCCV, schéma MWUS

5.2 L'écoulement de Dean

Le dernier problème abordé concerne l'étude de l'écoulement développé dans un canal rectangulaire courbé. À l'instar du problème précédent, ce type d'écoulement a comme caractéristique l'apparition d'un écoulement secondaire généré par la force centrifuge. L'écoulement développé dans un tel canal possède plusieurs structures d'écoulement. Les différentes solutions possibles sont caractérisées par le nombre de cellules de recirculation dans le plan bidimensionnel perpendiculaire à l'écoulement. Le paramètre adimentionnel qui permet la prédiction de la structure de l'écoulement développé est le nombre de Dean:

$$Dn = \frac{Re}{\sqrt{R_c}} \tag{5.1}$$

$$\text{où} \tag{5.2}$$

$$R_c = \frac{R}{a} \tag{5.3}$$

R étant le rayon de courbure du tube et a la longueur de l'un des cotés du tube. La figure 5.12 définit le domaine de calcul adimentionalisé. Le canal est de section rectangulaire, de largeur unitaire et le rayon de courbure R est fixé à 15.1. L'écoulement demeurant symétrique tout le long de la section où il se développe, la symétrie au travers du plan $y = 0$ à été utilisée pour diminuer la taille du maillage. Il est possible que le fait d'utiliser une telle condition puisse avoir un effet sur l'obtention des différentes solutions, dont certaines sont instables, mais a été rendu nécessaire pour permettre le raffinement du maillage. Le premier maillage est constitué 9x9x70 cubes divisés en tétraèdres et englobe tout le domaine de calcul. Le second maillage, utilisant la condition de symétrie, comprend 7x15x70 cubes. Un exemple de maillage grossier est présenté à la figure 5.13.

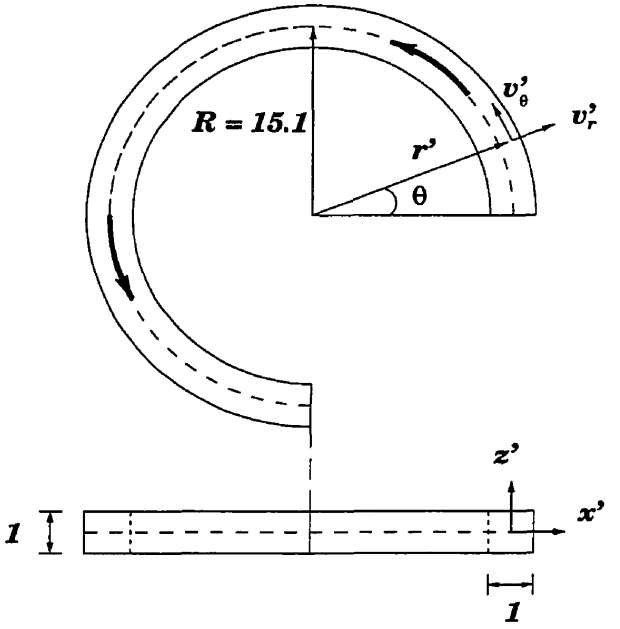


Figure 5.12: Géométrie du problème de Dean

Avec cette géométrie, deux états d'écoulement sont prédits par la théorie et confirmés par l'expérimentation. Lorsque le nombre de Dean est fixé à 125, la solution développée comprend deux cellules de recirculation dans le plan perpendiculaire. Pour un nombre de Dean de 150, l'écoulement développé donne quatre vortex dans le plan transversal. L'état d'équilibre atteint dépend des conditions à l'entrée et de la façon dont évolue l'écoulement dans la région où il se développe. Il a été démontré que l'état à quatre cellules de recirculation est instable lorsqu'une perturbation asymétrique, par exemple une ailette, est ajoutée à l'intérieur du tube.

Le nombre de volumes de contrôle étant limité pour l'exécution de ce test, seul l'étude des écoulements non perturbés pour les deux nombre de Dean ont été simulés. Les conditions à l'entrée sont celles d'un écoulement développé dans un canal droit. En sortie, une condition de gradient de vitesse nul est appliquée. Le problème a été

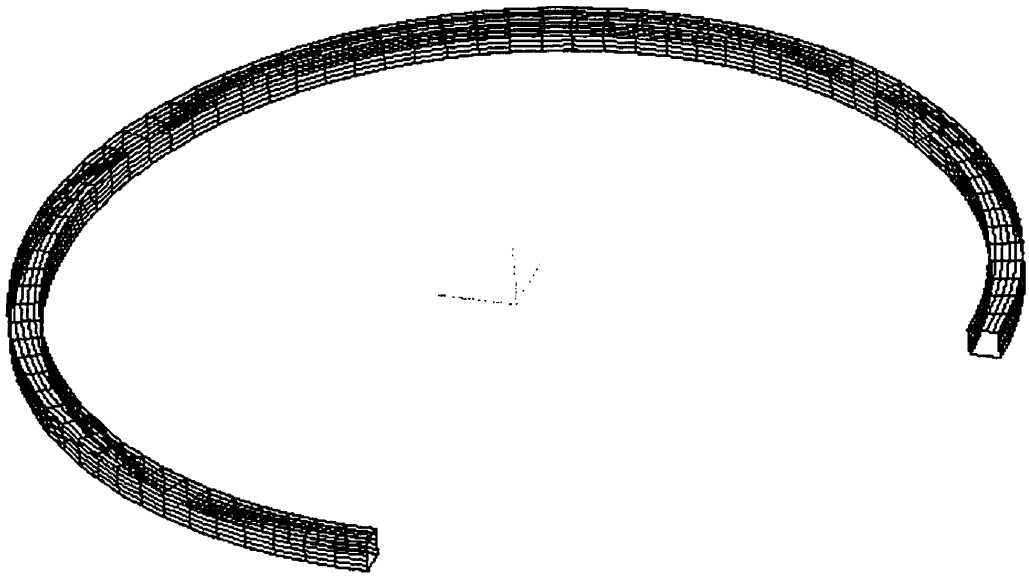


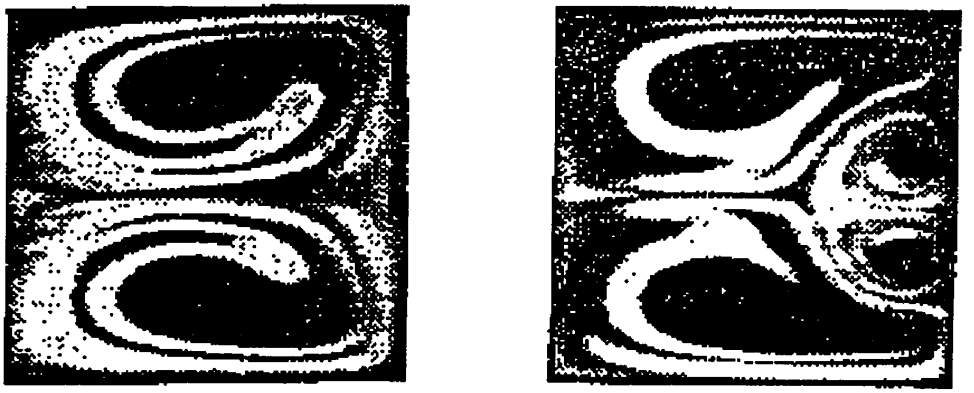
Figure 5.13: Maillage tétraédrique de 5x5x70

résolu avec le schéma d'interpolation MWUS sur des vitesses stockées aux faces et les résultats sont comparés avec les données expérimentales de BARA *et al.* (1992). Les données sont réparties en mesures des vitesses longitudinales sur des sections à 20 degrés d'intervalle.

Aux figures 5.14 est montré la visualisation de l'écoulement transversal à $\theta = 240°$ pour les nombres de Dean 125 et 150 obtenus des données expérimentales (BARA *et al.* (1992)). On remarque que la structure de l'écoulement est différente pour les deux écoulement avec un écoulement secondaire à deux et quatre zones de recirculation. Les figures 5.15 montrent, sur le même plan, les champs de vitesse transversaux obtenus pour le maillage 9x9x70. On constate que les deux solutions ont la même structure d'écoulement. Le modèle n'a pas été en mesure de capturer la structure

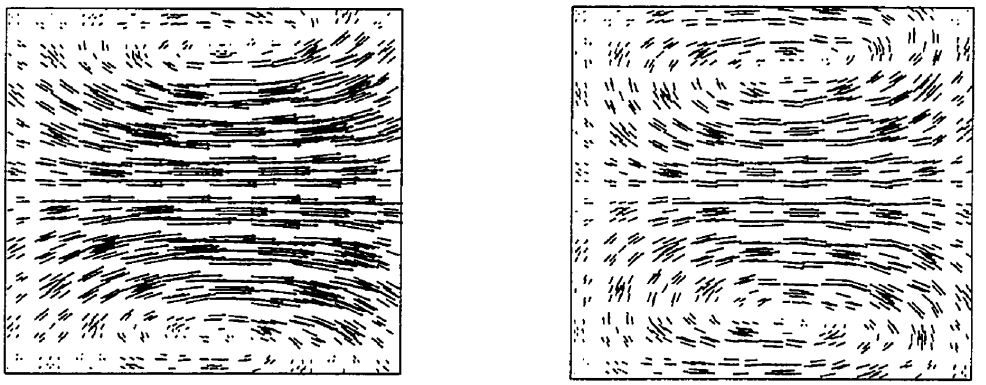
de l'écoulement à quatre zones de recirculation pour le nombre de Dean 150. Le raffinement du maillage n'a pas permi d'obtenir non plus l'écoulement recherché. Il est probable que le maillage ne soit pas suffisament raffiné pour engender les deux petit tourbillons. Il est possible aussi que le problème vienne du couplage pression-vitesse. Le fait d'avoir seulement deux termes de pression pour modifier les trois composantes de la vitesse est insuffisant lorsque l'écoulement a une structure plus complexe. Le schéma n'a pas la capacité de produire un champ de pression qui puisse engendrer les plus petits tourbillons.

Les profils de vitesse obtenus avec les deux maillages sont illustrés aux figures 5.16 et 5.17. La vitesse longitudinale est donnée successivement sur les douzes plans d'analyse pour un nombre de Dean de 125 et 150. Les profils sont mesurés dans la direction radiale (x',z'=0). On s'appercoit que dans les deux cas, la structure de l'écoulement est la même et seul le cas à deux zones de recirculations est capté par le modèle. On remarque un léger décalage dans la région ou l'écoulement atteint son maximum. On constate que le raffinement du maillage n'a pas eu grand effet sur la précision de la solution. L'étude de la convergence, non représenté ici, montre les mêmes caratéristiques que dans le cas-test précédent. L'erreur sur la pression et la correction de pression ont tendance à osciller, ralentissant la convergence du calcul.



Dean = 125 Dean = 150

Figure 5.14: Visualisation de l'écoulement transversal, $\theta = 240°$



Dean = 125 Dean = 150

Figure 5.15: Champ de vitesse transversal à la section $\theta = 240°$

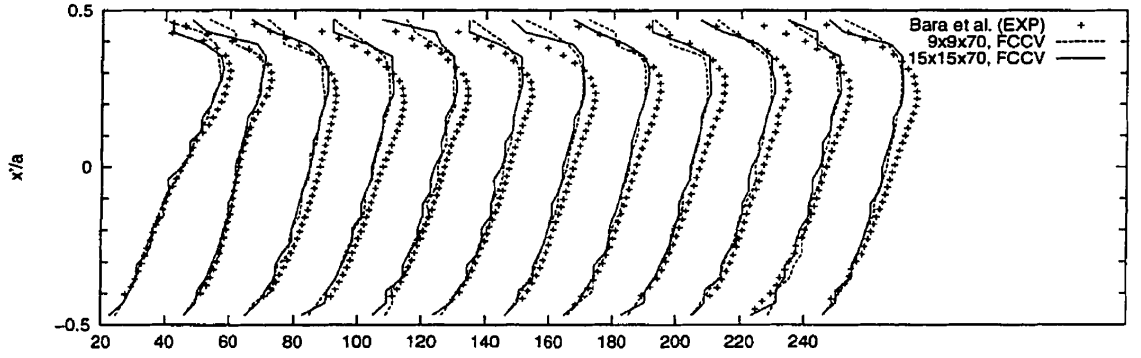


Figure 5.16: Distribution de la vitesse longitudinale, $Dean = 125$

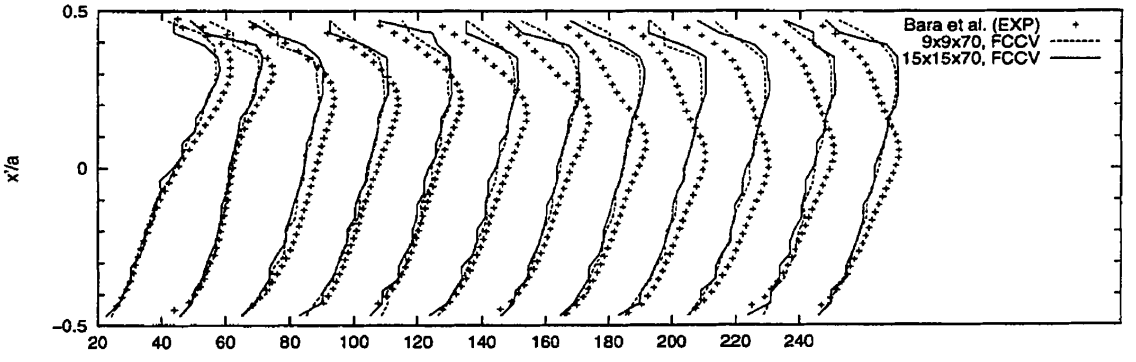


Figure 5.17: Distribution de la vitesse longitudinale, $Dean = 150$

5.3 Synthèse

Les simulations numériques ont donné dans l'ensemble des résultats qui s'apparentent assez bien aux valeurs expérimentales, bien qu'il y ait des écarts relativement importants dans certains cas. On reproduit au moins les tendances des phénomènes physiques. On a pu constater l'effet de la diffusion numérique occasionnée par le schéma d'extrapolation MWUS avec des maillages relativement grossiers. Le raffinement du maillage a eu un impact assez important sur les résulats, contrairement aux essais effectués dans le chapitre précédent.

Un point important à souligner est la convergence globale de la méthode dans le cas du canal avec coude à 90°. On a pu constater que les normes sur l'erreur et les normes sur le résidu avaient tendance à osciller dans le cas de la pression et de la correction en pression. Il semble donc que le modèle n'arrivait pas à converger vers une solution stable, mais avait tendance à osciller entre une solution dont le champ de vitesse respectait la continuité et une solution respectant l'équation de mouvement. Il apparaît donc une faiblesse du schéma dans le calcul de la pression. Il est clair que le fait d'avoir seulement deux termes de pression pour modifier les trois composantes de la vitesse est insuffisant lorsque l'écoulement a une structure plus complexe. Le fait de considérer une pression constante par élément ne semble pas être assez pour représenter et capter la physique du problème. La méthode utilisant une reconstruction de gradient de pression (RIDA, 1993) dans le cas-test du coude n'a pas permis de règler le problème, la structure de l'écoulement ne correspondant pas aux données expérimentales.

La pression semble donc être le point faible du schéma et le facteur responsable de la précision globale du schéma. Le fait que le raffinement ait permis une amélioration

notable de la solution, contrairement aux résultats du chapitre précédent, prouve la sensibilité du schéma au maillage dont le raffinement augmente le nombre de volume de contrôle de pression ce qui permet au schéma de produire des gradient de pression important.

La résolution numérique de ces problèmes a aussi permis de mesurer l'applicabilité des différents outils développés dans $\boldsymbol{VF}^{++}$. Le schéma FOUS s'avère peu applicable dans sa forme actuelle car son utilisation est limitée à de faibles nombres de Reynolds et par la taille des mailles dans le sens de l'écoulement. Deplus, le schéma centré aux sommets n'a pas donné des résultats probant pour les deux dernier cas-tests. Il sera nécessaire de modifier celui-ci de facon à être assuré que le schéma conserve la masse.

Les tests utilisant des éléments cubiques ont aussi échoué. Plusieurs raisons peuvent justifier ce fait. Il est possible que, dans le cas d'un maillage tétraèdrique, le fait d'avoir des faces orientées de façon aléatoire annule les erreurs provenant des schémas upwind alors que dans le cas d'un maillage hexaédrique, la dispositions des faces favorise une accumulation des erreurs ce qui rend le schéma instable. L'autre explication possible est le rapport du nombre de volumes de contrôle de pression et de vitesse pour les maillages tétraédriques et hexahédriques. Dans le cas d'un maillage tétraédrique, ce rapport est de 1:4 et devient 1:6 avec un maillage d'hexaèdre. Puisque des problèmes ont déja été identifié avec le couplage vitesse-pression dans le cas des tétraèdres, il est fort possible que le modèle appliqué aux hexahèdres soit incapable de représenter un écoulement complexe.

Conclusion

Le but du projet était d'étendre au cas tridimensionnel un schéma de résolution des équations de Navier-Stokes en régime incompressible et permanent utilisant un code générique de volumes finis. La souplesse de l'environnement $\boldsymbol{VF}^{++}$ a permis de tester plusieurs approches quant à la topologie initiale, aux formes de stockage, aux choix de fonctions d'interpolation et de couplage des équations. Des essais ont été fait sur des maillages tétraédriques et hexaédriques sur lesquels on a utilisé les fonctions FOUS et MWUS pour le flux de convection et des fonctions intégrales linéaires et quadratiques pour le terme de diffusion. Finalement, le couplage de la pression a été effectué selon la méthode SIMPLER proposé par Patankar et selon une méthode de reconstruction du gradient de pression.

Les résultats généraux obtenus montrent que le résoluteur est assez performant malgré le fait que le schéma utilisé soit assez rudimentaire. La possibilité d'implanter rapidement divers outils de calcul et différentes méthodes de résolution s'est avéré un avantage indéniable dans la compréhension des phénonèmes numériques et physiques en jeu. Deplus, sa grande flexibilité en terme de choix de géométrie initiale et de stockage des variables permet de tirer profit des avantages qu'offre la méthode des volumes finis. Tout le potentiel de $\boldsymbol{VF}^{++}$ réside d'ailleurs dans la facilité à implanter

de nouvelles méthodes numériques.

Les cas analytiques étudiés ont permis d'analyser et de comparer les schémas d'interpolation ainsi que d'évaluer l'effet du maillage initial et du stockage des variables. L'importance de la diffusion numérique et la convergence globale vers la solution exacte des équations ont été les critères d'évaluation. Le schéma FOUS, plus précis, s'est avéré assez restrictif quant à son usage alors que le schéma MWUS gagne beaucoup en précision sur un maillage structuré. Le test du canal droit a été fait pour mesurer l'efficacité du couplage des équations de mouvement et de continuité et valider le calcul du terme source de pression. Il en est ressorti que, pour des cas simples d'écoulement, la méthode est satisfaisante pour plusieurs combinaisons de schéma, maillage et stockage, le maillage structuré donnant évidemment les meilleurs résultats.

Les problèmes numériques de canal rectangulaire à forte courbure ont plutôt permis de valider le schéma dans des situations où la structure des écoulements est plus complexes. Les limites de la méthode sont alors rapidement apparues, la seule combinaison fonctionnant bien étant celle qui donnait les moins bons résultats pour les cas tests analytiques. Le principal point faible de la méthode vient du couplage pression-vitesse. En effet, le fait de considérer la pression constante par élément et de l'intégrer tel quel dans le terme source ne donne pas à la méthode un grande polyvalence. Deux termes de pression seulement viennent corriger les trois composantes de vitesses. La reconstruction en gradient de pression devant palier à ce problème a été essayée dans le cas du tube avec coude à 90° mais n'a pas donné de résultats probants. Le raffinement du maillage revêt donc une importance particulière car c'est ce qui déterminera la capacité de la méthode à capter un fort gradient de pression. Cette caractéristique a été remarquée avec le raffinement du maillage dans le cas des tests

avec des écoulements à forte courbure, ce raffinement ayant permi une amélioration substantielle de la solution. La méthode est donc dépendante du maillage et de l'étirement des mailles dans le sens de l'écoulement. Il faut être capable de prévoir les gradients importants de pression et de raffiner le maillage pour être en mesure de capter une perturbation brusque de l'écoulement. Il sera nécéssaire de développer un schéma avec de meilleures propriétés pour la pression. Un point à souligner est qu'il n'a pas été possible, par manque d'espace mémoire, d'atteindre des solutions indépendantes du maillage et par conséquent de mesurer la limite de la méthode.

Un autre point faible de la méthode dû au décalage des volumes de contrôle vitesse-pression est que la pression doit être imposée à zero sur toute la frontière où le fluide sort du domaine de calcul. Le fait d'imposer une valeur constante de pression sur toute la sortie produit une condition beaucoup plus sévère qui peut modifier l'écoulement en amont. Il ne peut pas y avoir de recirculation à la frontière et il faut s'assurer que la sortie soit suffisamment loin d'une perturbation. Par exemple, il a été remarqué dans le cas du tube avec coude à 90° que la longueur proposée de la section droite du tube en sortie n'était pas suffisante, compte tenu de l'état de l'écoulement à la sortie du coude. Entre la fin du coude et la sortie du tube, la pression était contrainte de redevenir uniforme, ce qui avait pour effet de rétablir un écoulement développé plus rapidement. Il a donc fallu prévoir une section de sortie plus importante.

Pour ce qui est de la forme de stockage des variables, le stockage au sommet s'est avéré avoir de meilleures propriétés que celui aux faces. La forme plus régulières des volumes de contrôle, le nombre plus important d'éléments adjacents et la position des centres pour le calcul des fonctions d'interpolation rendaient les calculs plus précis. Si cette forme de stockage s'est avérée plus avantageuses, son utilisation demeure limitée à certaines applications. La formulation de la méthode pour la résolution des

équations de Naveir-Stokes n'est pas très adaptée à cette forme de stockage. Outre le fait que le coût informatique est beaucoup plus élevé, la conservation de la masse n'est pas assurée. Il faudrait pouvoir développer une formulation dans laquelle le stockage de la vitesse au sommet et celui de la pression permettraient d'avoir les vitesses directement disponibles aux faces des volumes de contrôle pour la pression. Les différents schémas en colocation autoriseraient une telle formulation.

Les fonctions d'interpolation disponibles sont multiples dans l'environnement $\boldsymbol{VF}^{++}$. Lorsque des méthodes upwind ne sont pas nécéssaires comme dans le cas du calcul d'un flux de diffusion, il existe plusieurs fonctions d'interpolation linéaires, quadratiques et de moindre carré qui permettent de calculer la valeur d'une variable aux bords des volumes de contrôle. Les fonctions d'interpolation disponibles requérant une méthode upwind sont FOUS et MWUS. Le schéma FOUS est plus précis, mais son application n'est possible qu'avec le stockage au sommet et limitée par le nombre de Peclet. En trois dimensions, la limite supérieure a été évalué à six et on a pu constater de quelle façon le régime de l'écoulement de certains cas-tests et la dimension des domaines empêchaient son utilisation. Le schéma MWUS, dont l'extension en trois dimensions a été réalisée dans le cadre de ce travail, possède de bonnes propriétés mais est affecté par une importante diffusion numérique. Dans le cas de l'utilisation sur un maillage non structuré, le raffinement du maillage n'affecte pas de facon significative la précision d'une solution. L'ordre de l'erreur de cette méthode est donc assez faible. Dans le cas d'un maillage structuré, la performance du schéma est meilleure lorsque l'écoulement est orienté avec le maillage. Il serait intéressant de développer des méthodes d'ordre supérieur qui soient basées sur des maillages structurés (QUICK, Streamline upwind) ou inspirées des techniques développées pour la résolution des équations d'Euler (Flux Limitors, Flux Difference Splitting).

Pour ce qui est de la poursuite du travail au niveau du code $\boldsymbol{VF}^{++}$, il sera nécessaire d'étendre la capacité de *vfGeo* afin d'avoir plus de choix de protocoles lors de la constitution de la topologie de volumes finis (volumes de contrôle, bords de contrôle et stencil de reconstruction). Pour le moment, les choix qui ont été faits répondent aux besoins, mais pour le développement ultérieur de nouveaux schéma, il faudra forcément permettre d'autres combinaisons.

Dans le cas de maillage structurés, *vfgeo* devrait permettre d'implanter un maillage de volume de contrôle style PATANKAR (1980), dans lequel à chaque variables (u,v,w,p) correspond un volume de contrôle différent. Ce type de configuration permet une répartition beaucoup plus équilibrée entre les composantes de la vitesse et la pression et une meilleure disposition respective. Cela permettrait d'utiliser un maillage structuré pour la résolution des équations de Navier-Stokes.

Il faudra aussi greffer plusieurs outils à l'environnement, tels que la constitution d'une interface permettant à *vfparser* de comprendre un maillage créé avec un mailleur 3D indépendant tel que *Pirate*. Il sera aussi nécéssaire d'implanter un algorithme de renumérotation afin de réduire la taille des systèmes matriciels qui deviennent rapidement très volumineux avec le passage en trois dimensions. Il est fortement suggéré de greffer au code des algorithmes itératifs pour la résolution du système matriciel, plutôt que d'opter pour une résolution directe, même optimisée, comme cela est le cas présentement. La taille du vecteur matriciel a été le principal facteur limitatif au niveau du raffinement du maillage. Finalement, la technique de résolution multigrille, de plus en plus populaire et utilisée dans un nombre croissant d'applications, aurait avantage a être implantée tant pour la résolution du système matriciel que parce qu'elle permet de raffiner localement le maillage dans des régions à fort gradient.

Dans la réalisation de ce projet, $\boldsymbol{VF}^{++}$ s'est avéré être un véritable outil de travail qui facilite le développement d'applications volumes finis tout en permettant d'explorer différentes approches quant à la discrétisation des volumes de contrôle et à la méthode de calcul des flux aux interfaces. Ce travail s'inscrit donc dans un cadre plus large où $\boldsymbol{VF}^{++}$ sera utilisé pour expérimenter et développer de meilleures techniques de résolution des équations de transport basées sur la méthode des volumes finis.

Bibliographie

ABANTO J. (1996). *Le système VF++ v 2.0: Guide du programmeur*. Rapport technique, Centre de Recherche en Calcul Appliqué CERCA, Montréal.

ABANTO J. (1997a). *Le système VF++ v 2.0: A Quick Class Reference*. Rapport technique, Centre de Recherche en Calcul Appliqué CERCA, Montréal.

ABANTO J. (1997b). *Le système VF++ v 2.0: Guide de l'Usager*. Rapport technique, Centre de Recherche en Calcul Appliqué CERCA, Montréal.

ABANTO J. (1997c). *VF++: Un Environnement Orienté-Objet pour la Méthode des Volumes Finis*. Thèse de doctorat, Université de Montréal, Montréal.

ABANTO J., CAMARERO R. et REGGIO M. (1998). Study of the Effect of Control Volume Shape on Solution Field in Compressible Flow. Dans: *CFD 98, The Sixth Annual Conference of the CFD Society of Canada*, pp. VIII,7–13.

BALIGA B.R. (1996). Control-Volume Finite Element Methods for Fluid Flow and Heat Transfer. *Advances in Numerical Heat Transfer*, vol. **1**, pp. 1–40.

BALIGA B.R. et PATANKAR S.V. (1980). A New Finite-Element Formulation for Convection-Diffusion Problems. *Numerical Heat Transfer*, vol. **3**, pp. 393–409.

BALIGA B.R. et PATANKAR S.V. (1983). A Control Volume Finite-Element Method for Two-Dimensional Fluid Flow and Heat Transfer. *Numerical Heat Transfer*, vol. **6**, pp. 245–261.

BARA B., NANDAKUMAR K. et MASLIYAH J.H. (1992). An Experimental and Numerical Study of the Dean Problem: Flow Development Towards Two-Dimensional Multiple Solutions. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. **244**, pp. 339–376.

BRANDT A. et YAVNEH I. (1991). Inadequacy of First-Order Upwind Difference Schemes for some Recirculating Flows. *Journal of Computational Physics*, vol. **93**, pp. 128–143.

BROOKS A.N. et HUGHES T.J.R. (1982). Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **32**, pp. 199–259.

CHEN H.B., NANDAKUMAR K., FINLAY W.H. *et al.* (1996). Three-Dimensional Viscous Flow Through a Rotating Channel: A Pseudospectral Matrix Method Approach. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. **23**, pp. 379–396.

CHUNG T.J. (1978). *Finite Element Analysis of Fluid Dynamics*. McGraw-Hill, Inc., Toronto.

COURANT R., ISAACSON E. et REES M. (1952). On the Solution of Non-Linear Hyperbolic Differential Equations by Finite Difference. *Communications in Pure and Applied Mathematics*, vol. **5**, pp. 243–269.

DARWISH M.S. (1993). A New High Resolution Scheme Based on the Normalized Variable Formulation. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. **24**, pp. 353–371.

DEITEL H.M. et DEITEL P.J. (1994). *C++ How to Program*. Prentice-Hall, New Jersey.

DICK E. et LINDEN J. (1992). A Multigrid Method for Steady Incompressible Navier-Stokes Equations Based on Flux Difference Splitting. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. **14**, pp. 1311–1323.

GHIA U., GHIA N. et SHIN C.T. (1982). High-Resolutions for Incompressible Flow using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. *Journal of Computational Physics*, vol. **48**, pp. 387–411.

HARTWICH P.M. et HSU C.H. (1988). High-Resolution Upwind Schemes for the Three-Dimensional Incompressible Navier-Stokes Equations. *AIAA Journal*, vol. **26(11)**, pp. 1321–1328.

HASSAN Y.A., RICE J.G. et KIM J.H. (1983). A Stable Mass-Flow-Weighted Two-Dimensional Skew Upwind Scheme. *Numerical Heat Transfer*, vol. **6**, pp. 395–408.

HAYASE T., HUMPHREY J.A.C. et GREIF R. (1992). A Consistently Formulated QUICK Scheme for Fast and Stable Convergence Using Finite-Volume Iterative Calculation Procedures. *Journal of Computational Physics*, vol. **98**, pp. 108–118.

HIRSCH C. (1988). *Numerical Computation of Internal and External Flows Volume 1: Fundamentals of Numerical Discretization*. John Wiley & Sons, New York.

HIRSCH C. (1990). *Numerical Computation of Internal and External Flows Volume 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. John Wiley & Sons, New York.

HOOKEY N.A., BALIGA B.R. et PRAKASH C. (1988a). Evaluation and Enhancements of Some Control Volume Finite-Element Methods-Part 1. Convection-Diffusion Problems. *Numerical Heat Transfer*, vol. **14**, pp. 255–272.

HOOKEY N.A., BALIGA B.R. et PRAKASH C. (1988b). Evaluation and Enhancements of Some Control Volume Finite-Element Methods-Part 2. Incompressible Fluid Flow Problems. *Numerical Heat Transfer*, vol. **14**, pp. 273–293.

HUMPHREY J.A.C., TAYLOR A.M.K. et WHITELAW J.H. (1977). Laminar Flow in a square Duct of Strong Curvature. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. **83**, pp. 509–527.

JESSEE J.P. et FIVELAND W.A. (1996). A Cell Vertex Algorithm for the Incompressible Navier-Stokes Equations on Non-Orthogonal Grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. **23**, pp. 276–293.

LE DAIN MUIR B. (1983). *A control Volume Finite Element Method for Three-Dimensional Elliptic Fluid Flow and Heat Transfer*. Thèse de doctorat, McGill University, Montreal.

LEONARD B.P. (1979). A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **19**, pp. 59–98.

LEONARD B.P. et DRUMMOND J.E. (1995). Why You Should Not Use Hybrid, Power Law, or Related Exponential Schemes for Convective Modelling - There Are Much Better Alternatives. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, vol. **20**, pp. 421–442.

LI Y. et RUDMAN M. (1995). Assessment of Higher-Order Upwind Schemes Incorporating FCT for Convection Dominated Problems. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. **27**, pp. 1–21.

LILLINGTON J.N. (1981). A Vector Upstream Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant Source Terms in Steady-State Linear Systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. **1**, pp. 3–6.

LIN F.B. et SOTIROPOULOS F. (1997). Assesment of Artificial Dissipation Models for Three Dimensional Incompressible Flow Solutions. *Journal of Fluids Engineering*, vol. **119**, pp. 331–340.

MASSON C., SAABAS H.J. et BALIGA R. (1994). Co-Located Equal-Order Control-Volume Finite Element Method for Two-Dimensional Axisymmetric Incompressible Fluid Flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. **18**, pp. 1–26.

MINSON A.J., WOOD C.J. et BELCHER R.E. (1995). Experimental Velocity Measurements for CFD Validation. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. **58**, pp. 205–215.

OOSTERLEE C.W. et RITZDORF H. (1996). Flux Difference Splitting for Three-Dimensional Steady Incompressible Navier-Stokes Equations in Curvilinear Coordinates. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. **23**, pp. 345–366.

PAGE M. (1995). *Étude de Méthodes itératives pour la Résolution des Équations de Navier-Stokes*. Thèse de doctorat, Université de Montréal, Montréal.

PATANKAR S.V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* Hemisphere Publishing, Washington DC.

PATANKAR S.V. (1981). A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations. *Numerical Heat Transfer*, vol. **4**, pp. 409–425.

PATANKAR S.V. (1988). Recent Developments in Computational Heat Transfer. *Journal of Heat Transfer*, vol. **110**, pp. 1037–1045.

PATANKAR S.V. et SPALDING D.B. (1972). A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. **15**, pp. 1787–1806.

PATEL M.K. et MARKATOS N.C. (1986). An Evaluation of Eight Discretization Schemes for Two-Dimensional Convection-Diffusion Equations. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, vol. **6**, pp. 129–154.

PATEL M.K., MARKATOS N.C. et CROSS M. (1985). A Critical Evaluation of Seven Discretization Schemes for Convection-Diffusion Equations. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, vol. **5**, pp. 225–244.

PHILLIPS R.E. et SCHMIDT F.W. (1985). Multigrid Techniques for the Solution of the Passive Scalar Advection-Diffusion Equation. *Numerical Heat Transfer*, vol. **8**, pp. 25–43.

PRAKASH C. (1986). An Improved Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and for Fluid Flow Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation. *Numerical Heat Transfer*, vol. **9**, pp. 253–276.

PRAKASH C. (1987). Examination of the Upwind (Donor-Cell) Formulation in Control Volume Finite-Element Methods for Fluid Flow and Heat Transfer. *Numerical Heat Transfer*, vol. **11**, pp. 401–416.

PRAKASH C. et PATANKAR S.V. (1985). A Control Volume-Based Finite-Element Method for Solving the Navier-Stokes Equations Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation. *Numerical Heat Transfer*, vol. **8**, pp. 259–280.

RAITHBY G.D. (1976a). A Critical Evaluation of Upstream Differencing Applied to Problems Involving Fluid Flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **9**, pp. 75–103.

RAITHBY G.D. (1976b). Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **9**, pp. 153–164.

REDDY J.N. (1993). *An Introduction to the Finite Element Method*. McGraw-Hill, Inc., Toronto.

RICE J.G. et SCHNIPKE R.J. (1985). A Monotone Streamline Upwind Finite Element Method for Convection Dominated Flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **48**, pp. 313–327.

RIDA S. (1993). *Méthode de Volumes Finis pour la Simulation Numérique d'Écoulements Turbulents sur des Maillages non Structurés*. Mémoire de maîtrise, Université de Montréal, Montréal.

ROACHE P.J. (1985). *Computational Fluid Dynamics*. Hermosa Publishers, Albuquerque.

RUMBAUGH J. (1997). *Object Oriented Modelling and Design*. Prentice-Hall.

SAABAS H.J. (1991). *A control Volume Finite Element Method for Three-Dimensional, Incompressible, Viscous Fluid Flow*. Thèse de doctorat, McGill University, Montreal.

SAABAS H.J. et BALIGA R. (1994a). Co-Located Equal-Order Control-Volume Finite-Element Method for Multidimensional, Incompressible, Fluid Flow-Part I: Formulation. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. **26**, pp. 381–407.

SAABAS H.J. et BALIGA R. (1994b). Co-Located Equal-Order Control-Volume Finite-Element Method for Multidimensional, Incompressible, Fluid Flow-Part II: Verification. *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. **26**, pp. 409–424.

SCANLON T.J., CAREY C. et FRASER S.M. (1993). SUCCA3D- an Alternative Scheme to Reduce False Diffusion in Three-Dimensional Flows. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Part C, Journal of Mechanical Engineering*, vol. **207**, pp. 307–313.

SCHLICHTING H. (1960). *Boundary Layer Theory*. Mc Graw-Book Comp., New-York, 4e édition.

SCHNEIDER G.E. et RAW M.J. (1986). A Skewed, Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite-Element Convection-Diffusion Computation. *Numerical Heat Transfer*, vol. **9**, pp. 1–26.

SCHNEIDER G.E. et RAW M.J. (1987a). Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Colocated Variables-1. Computational Procedure. *Numerical Heat Transfer*, vol. **11**, pp. 363–390.

SCHNEIDER G.E. et RAW M.J. (1987b). Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Colocated Variables-2. Application and Validation. *Numerical Heat Transfer*, vol. **11**, pp. 391–400.

SHYY W. (1983). A Study of Finite Difference Approximations to Steady-State, Convection-Dominated Flow Problems. *Journal of Computational Physics*, vol. **57**, pp. 415–438.

SHYY W., THAKUR S. et WRIGHT J. (1992). Second-Order and Central Difference Schemes for Recirculating Flow Computation. *AIAA Journal*, vol. **30(4)**, pp. 923–932.

SMITH R.M. et HUTTON A.G. (1982). The numerical Treatment of Advection: A Performance Comparison of Current Methods. *Numerical Heat Transfer*, vol. **5**, pp. 439–461.

SPALDING D.B. (1972). A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. **4**, pp. 551–559.

STONE H.L. (1968). Iterative Solution of Implicit Approximation of Multidimensional Partial Differential Equations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, vol. **5**, pp. 530–558.

STROUSTRUP B. (1997). *The C++ Programming Language*. Addison-Wesley, 3e édition.

SWAMINATHAN C.R. et VOLLER V.R. (1992a). Streamline Upwind Scheme for Control-Volume Finite Elements, Part 1. Formulations. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. **22**, pp. 95–107.

SWAMINATHAN C.R. et VOLLER V.R. (1992b). Streamline Upwind Scheme for Control-Volume Finite Elements, Part 2. Implementation and Comparison with the SUPG Finite-Element Scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. **22**, pp. 109–124.

TSUI Y.Y. (1991). A Study of Upstream-Weighted High-Order Differencing for Approximation to Flow Convection. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, vol. **13**, pp. 167–199.

VAN DOORMAAL J.P. et RAITHBY G.D. (1984). Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. *Numerical Heat Transfer*, vol. **7**, pp. 147–163.

VANKA S.P. (1986a). Block-Implicit Multigrid Calculation of Two-Dimensional Recirculating Flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **59**, pp. 29–48.

VANKA S.P. (1986b). Block-Implicit Multigrid Solution of Navier-Stokes Equations in Primitive Variables. *Journal of Computational Physics*, vol. **65**, pp. 138–158.

VANKA S.P. (1986c). A Calculation Procedure for Three-Dimensional Steady Recirculating Flows Using Multigrid Methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. **55**, pp. 321–338.

VANKA S.P. (1987). Second-Order Upwind Differencing in a Recirculating Flow. *AIAA Journal*, vol. **25(11)**, pp. 1435–1441.

VON LAVANTE E. (1990). Accuracy of Upwind Schemes applied to the Navier-Stokes Equations. *AIAA Journal*, vol. **28(7)**, pp. 1312–1314.

WARSI Z.U.A. (1990). *Fluid Dynamics*. CRC Press, London.

WINTERS K.H. (1987). A Bifurcation Study of Laminar Flow in a Curved Tube of Rectangular Cross-Section. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. **180**, pp. 343–369.

WIROGO S. et RAJAGOPALAN G. (1997). Flux Corrected Method an Accurate Approach to Fluid Flow Modelling. Dans: *13th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, pp. 922–929.

ZEDAN M. et SCHNEIDER G.E. (1985). A Coupled Strongly Implicit Procedure for Velocity and Pressure Computation in Fluid Flow Problems. *Numerical Heat Transfer*, vol. **8**, pp. 537–557.