
Vers la simulation aux grandes échelles sur maillage hybride

Pierre CAYOT

Février 2011 - Juillet 2011

© Tous droits réservés

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
42 avenue Coriolis – 31057 TOULOUSE CEDEX 1 – FRANCE
Tél : +33 5 61 19 31 31 – Fax : +33 5 61 19 30 00
<http://www.cerfacs.fr> – e-mail: secretar@cerfacs.fr



Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu Thierry POINSOT et Jean-François BOUSSUGE pour m'avoir accueilli dans l'équipe CFD du CERFACS.

Je remercie très sincèrement mon maître de stage, Guillaume PUIGT pour sa grande disponibilité et ses conseils indispensables à l'avancement de ce projet.

Mes remerciements s'adressent également aux membres de l'équipe AAM, doctorants et stagiaires qui ont permis que ce stage se passe dans les meilleures conditions.

Table des matières

1	Généralités - Équations générales	7
1.1	Principes fondamentaux	7
1.1.1	Conservation de la masse	7
1.1.2	Conservation de la quantité de mouvement	7
1.1.3	Conservation de l'énergie	8
1.1.4	Équations de Navier-Stokes	9
1.1.5	Comportement mécanique : le modèle de Newton-Stokes	9
1.1.6	Comportement thermique : la loi de Fourier	10
1.1.7	Equations d'état thermodynamique	10
1.2	Les approches de résolution numériques	10
1.2.1	DNS	10
1.2.2	RANS	11
1.2.3	LES	12
2	Maillages, formalisme mathématique et <i>elsA</i> hybride	13
2.1	Maillages structurés, non structurés et hybrides	13
2.1.1	Maillage structuré	13
2.1.2	Maillage non structuré	14
2.1.3	Maillages hybrides	15
2.2	Formalisme mathématique pour <i>elsA</i>	15
2.3	Structure de données en non structuré	15
3	Théorie de la LES	17
3.1	Filtrage des échelles	17
3.2	Equations de Navier-Stokes filtrées	19
3.2.1	Équation de continuité	19
3.2.2	Équation de la dynamique	19
3.2.3	Équation de l'énergie	20
3.2.4	Système d'équations filtrées	21
3.3	Fermeture des équations	21
3.3.1	Concept de viscosité de sous-maille	22
3.3.2	Modèle de Smagorinsky	23
3.3.3	Modèle WALE	23

4	Schémas numériques	25
4.1	Solveurs diffusifs	25
4.1.1	En structuré	25
4.1.2	En non structuré	26
4.2	Solveurs convectifs	27
4.2.1	Schéma centré de Jameson	28
4.2.2	Schéma décentré de Roe	29
5	Vérification et validation	31
5.1	Minimum channel	31
5.1.1	Résultats '5p'	33
5.1.2	Résultats '5pcor'	35
6	Conclusion	37
A	La théorie de Kolmogorov	39
B	Programmation et Algorithmique	43
	Bibliographie	53

Introduction

elsA (ensemble logiciel de simulation en Aérodynamique) est un code industriel développé par l'ONERA en collaboration avec le CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) permettant la simulation des écoulements en aérodynamique interne et externe. Ce code est basé sur une formulation Volumes Finis (VF) centrée aux volumes de contrôle qui nécessite des maillages structurés (ensemble d'hexaèdres repérés par un triplet (i, j, k)).

Ce type de repérage offre des facilités pour l'implémentation de méthodes numériques (extension triviale de l'approche 1D) mais rend difficile la prise en compte de géométries complexes. En effet, sur des géométries complexes, le temps de construction (manuelle) des maillages structurés peut vite devenir prohibitif. Toutefois, les industriels tendent de plus en plus à effectuer des simulations intégrées sur des CAD non simplifiées. Pour répondre à ces besoins, il a été mis en œuvre dans *elsA* une approche non structurée multi-éléments (maillages contenant des hexaèdres, tétraèdres, pyramides et prismes) en complément de l'approche structurée. Les maillages non structurés sont donc définis par une ou plusieurs tables de connectivité qui indiquent sur quels sommets du maillage s'appuient les éléments volumiques et surfaciques. En non structuré, contrairement au structuré, l'accès aux données est plus complexe car indirect. La mise en œuvre des schémas (identiques à ceux du structuré) est rendue plus complexe par la définition des stencils. Par exemple, en structuré, il est d'usage d'utiliser un stencil à 4 points pour un schéma d'ordre 2. En non structuré, cela suppose d'accéder à des éléments en contact avec les volumes de part et d'autre de l'interface. Un algorithme géométrique complexe doit être mis en place.

L'impérieux besoin de tables de connectivité implique aussi une augmentation du temps CPU et une augmentation de la consommation mémoire. Dans un souci d'efficacité et pour garantir les bonnes pratiques industrielles en structuré, il a été choisi de conserver les deux formalismes -structuré et non structuré- dans *elsA*.

À ce stade, seule la résolution des équations RANS et U(nsteady)-RANS est validée en non structuré. L'objectif de ce stage est dans un premier temps de faire un état des lieux d'*elsA* en non structuré lors de calculs des grandes échelles de la turbulence (LES : Large Eddy Simulation). Le but de ce stage est donc de participer à la réalisation de cette version hybride d'*elsA*.

Plan du rapport

Ce document présente les travaux accomplis pendant le stage de six mois effectué au CERFACS. Ce stage constitue le stage de fin d'études de l'INSAT (Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse).

Dans une première partie, des rappels sur la théorie de la mécanique des fluides seront présentés. Dans un premier lieu, la formation des équations générales de Navier-Stokes sera expliquée. Puis les différentes approches de résolution numérique seront rapidement présentées dans le but de saisir les intérêts de la simulation aux grandes échelles. Afin de comprendre les enjeux des maillages hybrides, une partie exposera les différences entre les maillages structurés et non structurés.

La deuxième partie de ce rapport s'attardera plus longuement sur la présentation de la théorie de la LES, avec le filtrage des grandes échelles, les équations de Navier-Stokes filtrées et les différents modèles de sous maille existants.

Dans le code de calcul *elsA* sont déjà implémentés de nombreux schémas numériques, une partie sera donc accordée à leur présentation et à leur extension dans la version non structurée du code.

Finalement, des cas tests classiques ont été effectués afin de vérifier et valider la version non structuré de *elsA* pour le modèle LES. **La LES dans *elsA* est validée en structuré et nous considérons dans ce rapport les résultats obtenus sur maillage structuré comme des résultats de référence.**

Cadre du stage

Le CERFACS est un centre de recherche dont l'objectif est de développer des méthodes de simulation numérique avancées ainsi que les solutions algorithmiques qui adressent les plus grands problèmes scientifiques et techniques abordés dans la recherche publique et industrielle. Ces simulations numériques requièrent l'utilisation des moyens de calcul les plus puissants. Ce centre regroupe plus d'une centaine de personnes qui travaillent sur des domaines très ciblés comme l'aérodynamique, la combustion, les algorithmes parallèles, le climat et l'environnement, le traitement des données et l'électromagnétisme. Ce stage s'est déroulé du 1^{er} Février au 31 Juillet 2011 au sein de l'équipe CFD-AAM. Une durée de six mois a été nécessaire à la réalisation de ce projet en tenant compte de la prise en main du logiciel *elsA*, la partie bibliographique et une phase importante de programmation et d'exploitation des résultats.

Généralités - Équations générales

Dans toute la suite, un volume élémentaire fluide Ω est défini par :

- des variables cinématiques : \mathbf{U} le vecteur vitesse et ses composantes U_i ,
- des variables thermodynamiques : pression P , température T et masse volumique ρ .

Dans l'ensemble du rapport, la notation indicielle d'Einstein sera utilisée et les vecteurs apparaîtront en caractère gras.

1.1 Principes fondamentaux

Le but de cette première partie est d'explicitier les équations de Navier-Stokes. Ces dernières traduisent le principe de conservation pour les différentes grandeurs caractéristiques de l'écoulement.

1.1.1 Conservation de la masse

Le principe de conservation de la masse dit que la variation dans tout domaine Ω est égale au flux de masse à la travers la frontière $\partial\Omega$ de celui-ci. On a donc :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho dx = - \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} ds , \quad (1.1)$$

avec \mathbf{n} normale sortante à la frontière $\partial\Omega$. On obtient alors par la formule de Stokes :

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) dx = \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} ds . \quad (1.2)$$

Finalement, étant donné que le domaine est quelconque, le théorème de l'intégrale nulle permet d'obtenir l'équation locale de conservation de la masse plus connue sous le nom d'*équation de continuité* :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (1.3)$$

1.1.2 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de la conservation de la quantité de mouvement provient de la seconde loi de Newton : *La variation de la quantité de mouvement d'un système est égale à la somme des forces extérieures s'exerçant sur ce système.* Dans notre cas, les forces présentes sont :

– les forces volumiques F_i :

$$\int_{\Omega} \rho F_i dx$$

– les forces surfaciques σ_{ij} comprenant les contraintes tangentielles (cisaillement) et les contraintes normales (pression). On peut écrire ces forces surfaciques sous la forme : $\sigma_{ij} = \tau_{ij} - P\mathbf{I}$, où τ_{ij} tenseur des contraintes visqueuses et \mathbf{I} matrice unité.

On obtient alors l'équation suivante sur le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \left(\rho F_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \rho \frac{\partial U_i}{\partial t} \right) dV = 0 . \quad (1.4)$$

Étant donné le domaine Ω quelconque, l'équation locale s'écrit :

$$\rho \frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial x_j} = \rho F_i - \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} . \quad (1.5)$$

1.1.3 Conservation de l'énergie

La dérivée totale de l'énergie cinétique dans un domaine Ω est égale à la somme des puissances des efforts intérieurs et extérieurs. La relation s'obtient en multipliant l'équation de conservation de la quantité de mouvement par la vitesse U_i et en intégrant sur le domaine :

$$\rho \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \frac{U_i U_i}{2} dV = \int_{\Omega} \rho U_i F_i dV + \int_{\partial \Omega} U_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dS . \quad (1.6)$$

L'équation locale se formule alors :

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{U_i U_i}{2} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho U_i U_i}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\rho U_i U_i U_j}{2} \right) = \rho U_i F_i + U_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} , \quad (1.7)$$

soit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho U_i U_i}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\rho U_i U_i U_j}{2} \right) = \rho U_i F_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} U_i) - \sigma_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (U_i) . \quad (1.8)$$

Les membres du second terme représentant respectivement les puissances des forces extérieurs de volume, des forces extérieures de surface et des forces intérieures de surface.

De la même façon que Eq. (1.8) et en considérant l'énergie totale E comme la somme de l'énergie interne e et de l'énergie cinétique $U_i^2/2$, on obtient l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j E}{\partial x_j} = \rho U_i F_i + \frac{\partial \sigma_{ij} U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} , \quad (1.9)$$

où q_i sont les composantes du vecteur de densité de flux de chaleur \mathbf{q} .

1.1.4 Équations de Navier-Stokes

Pour déterminer l'état d'un milieu fluide, il est nécessaire de connaître en chaque point du domaine : la masse volumique ρ , les composantes de la vitesse \mathbf{U} , la pression P , le tenseur des contraintes σ_{ij} , la température T , le vecteur densité de flux de chaleur \mathbf{q} et l'énergie interne e .

A l'instant t , seulement 5 équations caractérisent le milieu, ce sont les équations de Navier-Stokes :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} & = 0 \\ \frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial x_j} & = \rho F_i - \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j E}{\partial x_j} & = \rho U_i F_i + \frac{\partial \sigma_{ij} U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \end{cases} \quad (1.10)$$

Ces équations ne sont pas suffisantes pour connaître exactement l'état du milieu fluide, les autres inconnues seront obtenues à l'aide de lois de comportement et d'équations d'état caractéristiques des propriétés physiques du fluide.

1.1.5 Comportement mécanique : le modèle de Newton-Stokes

Le tenseur des contraintes σ_{ij} introduit précédemment est initié par des contraintes surfaciques normales (contraintes de pression) et des contraintes tangentielles (contraintes de viscosité) au domaine tel que :

$$\sigma_{ij} = -P\mathbf{I} + \tau_{ij} . \quad (1.11)$$

Le fluide étant supposé avoir un comportement newtonien, la partie visqueuse du tenseur de contrainte ne dépend que du tenseur des vitesses de déformation, et ceci de façon linéaire et isotrope :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \delta' \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} , \quad (1.12)$$

où $\frac{\partial U_k}{\partial x_k}$ représente la trace du tenseur de déformation et où μ et δ' sont les coefficients de Lamé correspondant à la viscosité dynamique et au second coefficient de viscosité du fluide. L'hypothèse de Stokes (égalité entre pression mécanique et thermodynamique) implique :

$$2\mu + 3\delta' = 0 , \quad (1.13)$$

ce qui donne l'expression suivante pour un fluide en équilibre thermodynamique local :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} . \quad (1.14)$$

Le terme μ n'est pas une nouvelle inconnue étant donné que c'est une propriété intrinsèque au fluide.

1.1.6 Comportement thermique : la loi de Fourier

Le fluide est considéré comme un conducteur linéaire. Ainsi les échanges de chaleur entre les couches se feront par conduction. Le flux \mathbf{q} suit la loi de Fourier :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (1.15)$$

où λ est le coefficient de conductivité thermique.

1.1.7 Equations d'état thermodynamique

Le fluide est considéré comme un gaz parfait, ses propriétés suivent donc la loi thermodynamique suivante :

$$\frac{P}{\rho} = rT = \frac{\gamma - 1}{\gamma} C_p T, \quad (1.16)$$

où :

- r est la constante des gaz parfaits (pour l'air $r = 287 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
- $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ est le coefficient polytropique ($\gamma = 1.4$ pour l'air)
- C_p est la capacité thermique massique à pression constante, supposée constante
- C_v est la capacité thermique massique à volume constant, supposée constante

Dans le cas du gaz parfait, l'énergie interne e et l'enthalpie h s'écrivent alors :

$$\begin{cases} e &= C_v T \\ h &= C_p T \end{cases} \quad (1.17)$$

1.2 Les approches de résolution numériques

Les équations de Navier-Stokes caractérisent donc le comportement des écoulements de fluide. Mais selon les cas étudiés, les ressources nécessaires à la résolution de ce système peuvent s'avérer très importantes. Pour un écoulement turbulent, il existe trois principales approches de calcul suivant la complexité de la simulation :

- Résolution directe des équations sans modèle de turbulence (DNS)
- Modélisation à statistique globale où les mouvements tourbillonnaires sont considérés dans leur intégralité (RANS)
- Modélisation à statistique partielle, certaines classes de tourbillons sont traitées statistiquement et les autres sont calculées directement, il s'agit de la simulation aux grandes échelles (LES) et de modélisation sous mailles (SGS, *Sub-Grid Scale*).

1.2.1 DNS

La simulation numérique directe (DNS, *Direct Numerical Simulation*) consiste à résoudre toutes les échelles spatiales et temporelles des équations de Navier-Stokes sans aucun modèle de turbulence. Le problème de cette méthode est que le maillage doit permettre de capturer

toutes les échelles de la turbulence. Afin de satisfaire cette résolution, le nombre de points N et le pas d'espace h doivent être tels que :

$$\begin{cases} N.h > L \\ h \leq \eta, \end{cases}$$

où L est l'échelle intégrale et η est l'échelle de Kolmogorov (Cf. Annexe A). La théorie de Kolmogorov décrit le concept de cascade énergétique des plus grosses structures tourbillonnaires (de vitesse U et de taille L) vers les plus fines (de vitesse u et de taille η). L'énergie échangée est donc conservée entre ces deux échelles, ce n'est seulement aux petites échelles qu'elle est dissipée sous forme de chaleur :

$$\frac{U^2}{L} = \frac{u^2}{\eta} \quad \text{avec} \quad Re_\eta = \frac{u\eta}{\nu} = 1 .$$

En partant de la définition du nombre de Reynolds, on peut montrer que le nombre de mailles N nécessaire à un calcul 3D sera tel que :

$$N > (Re^{3/4})^3 .$$

De plus, le pas de temps doit être pris en compte afin d'obtenir des résultats suffisamment précis. Le nombre de points nécessaires à une simulation est donc :

$$N \sim Re^3 .$$

Le coût d'une simulation DNS est très important même pour de faibles nombres de Reynolds. Il est donc impossible aujourd'hui de l'utiliser pour des applications industrielles à grands nombres de Reynolds, typiquement de 10^7 pour un avion.

1.2.2 RANS

L'approche RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) consiste d'une part à définir un filtre et d'autre part à moyenniser les équations de Navier-Stokes grâce à ce filtre. Cela revient à supposer qu'il existe deux échelles de grandeur à l'écoulement et qu'il est alors possible de séparer la moyenne et les fluctuations de l'écoulement. La modélisation des équations de Navier-Stokes moyennées peut être réalisée à l'aide de nombreux modèles plus ou moins complexes. Il existe deux grandes classes de modèles de turbulence :

- les modèles à viscosité turbulente ou modèles du premier ordre : les tensions de Reynolds sont directement modélisées à l'aide d'un terme de viscosité turbulente μ_t . Les modèles les plus fréquemment utilisés sont les modèles $k - \varepsilon$, $k - \omega$ et Spalart-Allmaras.
- les modèles du second ordre : dans ce cas, les tensions de Reynolds sont calculées directement et les moments d'ordre supérieur sont modélisés.

Cette approche est la plus couramment utilisée en industrie. En effet cette méthode a l'intérêt d'être rapide et d'avoir un faible coût de calcul. Contrairement à la DNS qui nécessite des pas de temps faibles pour capturer les détails de la turbulence, la méthode RANS permet de réaliser des simulations avec des pas de temps plus élevés car elle travaille avec des champs moyennés. Le soucis est donc qu'elle ne permet pas de capter tous les détails de la turbulence à chaque instant.

1.2.3 LES

L'approche LES (*Large Eddy Simulation*) est une alternative aux deux autres méthodes précédentes. Avec cette méthode, seules les grosses structures tourbillonnaires sont calculées à partir des équations de Navier-Stokes filtrées et les petites échelles sont modélisées par un modèle de sous-maille (SGS Model, *Sub-Grid Scale Model*). On accède ainsi à une physique plus fine car les grosses structures de la turbulence sont les plus énergétiques. En pratique, le modèle de sous maille est construit de manière à reproduire la partie du spectre de la turbulence incalculable sur le maillage considéré. Cette méthode requière moins de ressources que l'approche DNS mais beaucoup plus que la méthode RANS. Mais contrairement à l'approche RANS qui fournit uniquement des résultats moyennés, la LES permet d'accéder aux informations sur le comportement instationnaire de l'écoulement. Elle permet de prédire des caractéristiques instantanées et de calculer les grosses structures détaillées de la turbulence. Cette approche est décrite plus en détail dans le chapitre suivant.

Maillages, formalisme mathématique et *elsA* hybride

2.1 Maillages structurés, non structurés et hybrides

Les codes de simulation numérique en mécanique des fluides se rangent dans deux grandes classes. Les deux classes correspondent au type de maillage utilisé pour les simulations, les maillages structurés et les maillages non structurés. Ces deux types de maillage ont chacun des avantages et des inconvénients.

2.1.1 Maillage structuré

Un maillage structuré est un maillage où il existe une ligne de maillage par direction d'espace, de telle sorte que chaque nœud du maillage peut être repéré par un doublet (i, j) en dimension 2 ou par un triplet (i, j, k) en dimension 3. Dans le cas de la dimension 2, un bloc de maillage est construit en donnant :

- deux entiers $i_m + 1$ et $j_m + 1$
- $(i_m + 1) * (j_m + 1)$ coordonnées dans les directions d'espace x et y
- $i_m * j_m$ le nombre de volumes de contrôle qui sont alors repérés implicitement.

Le problème des maillages structurés est qu'ils ne permettent pas de mailler en un seul bloc des géométries complexes. Par exemple, il est impossible de mailler un disque par un maillage structuré à un seul bloc, sauf au prix de volumes très aplatis aux quatre angles ($i = 1, i = i_{max}, j = 1, j = j_{max}$). En aérodynamique avion, pour mailler une aile 3D, il est nécessaire d'utiliser plusieurs blocs structurés afin de mailler le domaine autour de l'aile. De plus, les lignes de maillage doivent se propager jusqu'aux bords du domaine. Dans le cas d'un profil d'aile à bord de fuite mince, le raffinement de la couche limite autour de l'aile se propage jusqu'à l'aval et donc le nombre de cellules devient rapidement très important comme on peut le voir en Fig. 2.1.

L'intérêt majeur de cette approche est la facilité de repérage des volumes, des nœuds, des interfaces... à l'aide d'un couple (i, j) pour chaque bloc, il s'agit d'un adressage direct des données. De plus, l'utilisation de maillages structurés permet d'aligner les directions du maillage avec les directions privilégiées de l'écoulement. En contrepartie, le temps de génération d'un maillage peut devenir rapidement prohibitif (typiquement de plusieurs semaines).

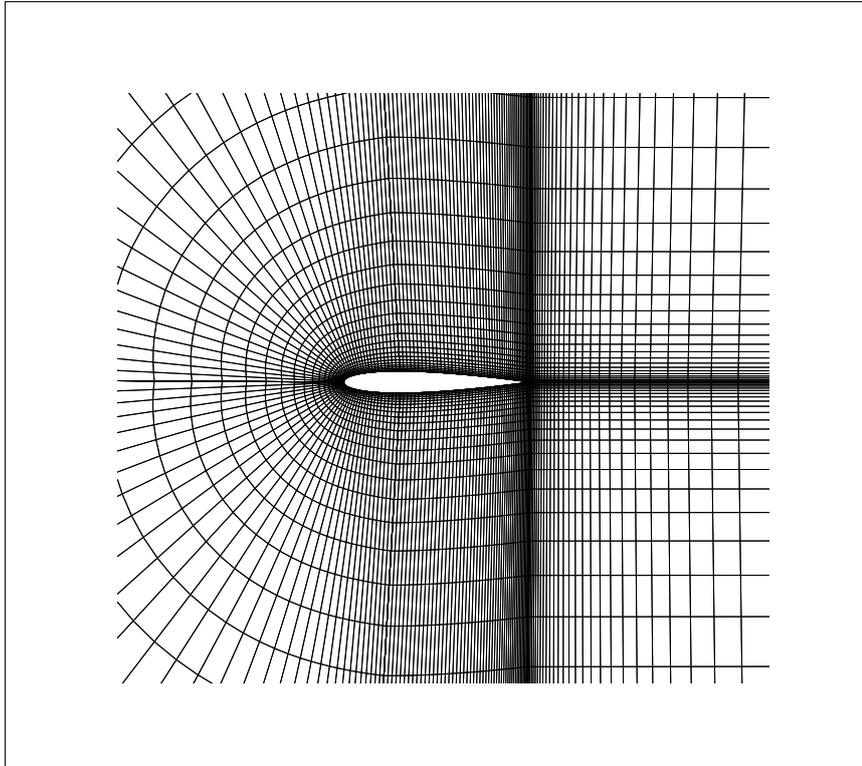


FIGURE 2.1 – Aperçu du maillage d’une aile d’avion en structuré

2.1.2 Maillage non structuré

Un maillage non structuré se construit au minimum avec les éléments suivants :

- le nombre de nœuds du maillage et chaque nœud étant repéré par les coordonnées (x_i, y_i, z_i)
- le nombre de volumes du maillage et chaque volume étant défini par les n sommets de la cellule. C’est la table de connectivité des éléments du maillage.

Dans ce cas, l’adressage des données est indirect, c’est-à-dire que pour une cellule la table de connectivité donne accès aux nœuds composant cette cellule, puis la liste des sommets donne accès à chaque coordonnée des nœuds. Il est donc beaucoup plus compliqué de récupérer des informations dans ce type de maillage. Dans le code *elsA*, les éléments géométriques pouvant composer un maillage sont des tétraèdres, des prismes, des pyramides, des hexaèdres ou un mélange de toutes ces briques élémentaires : on parle d’approche non structurée multi-éléments.

L’intérêt du maillage non structuré est le temps de création de ce maillage. Un maillage non structuré peut généralement être construit sur un ordinateur de bureau en quelques heures. Par contre, l’obtention d’un maillage de grande qualité (pour le solveur considéré) peut être une action de type essai / erreur car l’analyse et la visualisation de l’état des volumes et de leur alignement avec l’écoulement (supposé !) peut vite devenir une tâche très complexe, voire impossible sur des maillages avec beaucoup de volumes de contrôle.

2.1.3 Maillages hybrides

elsA permet dès maintenant de gérer des maillages contenant à la fois des zones structurées et des zones non structurées multi-éléments en (U-)RANS . Cette approche est dite *hybride*. Attention toutefois car la littérature appelle approche hybride une approche non structurée multi-éléments. Le raccord entre les zones structurées et non structurées peut être faite à points coïncidents ou à points non coïncidents. Dans la mesure où il n'existe pas encore de mailleur hybride, cette dernière approche est privilégiée au CERFACS car elle assure plus de flexibilité dans la création du maillage.

2.2 Formalisme mathématique pour *elsA*

En structuré, *elsA* est un code de calcul dit cell centered. Cela signifie que les volumes de contrôle de l'approche volumes finis sont les volumes du maillage. Les flux convectifs et diffusifs doivent en conséquence être évalués aux facettes de ces volumes. L'approche structurée rend très simple l'accès aux volumes voisins.

En non structuré, il a été choisi de conserver le formalisme cell centered pour l'approche multi-éléments. Cela permet de disposer d'un formalisme identique et de garantir aisément la compatibilité de l'approche non structurée avec l'historique en structuré. Ce point est crucial dans notre objectif de traiter des maillages hybrides.

2.3 Structure de données en non structuré

Dans la cadre d'une approche volumes finis cell centered, il faut évaluer des flux aux interfaces du maillage entre un volume à gauche et un volume à droite. Nous avons ainsi décidé de ne pas suivre un formalisme basé aux éléments pour la définition du maillage utilisé par *elsA*, mais d'utiliser plutôt le maillage équivalent écrit au format face-based. La structure de données en maillage non structuré se base donc sur 3 tableaux :

- La liste des faces du maillage et pour chaque face, la liste des sommets composant la face considérée,
- La liste des indices des volumes de gauche,
- La liste des indices des volumes de droite.

L'ordre de parcours des sommets de chaque face garantit que le vecteur normal est dirigé du volume de gauche vers le volume de droite. Les interfaces situées aux frontières de la zone considérée ne disposent pas a priori de volume à droite. Afin d'éliminer l'utilisation de tableaux de taille différente, le maillage initial est complété par un volume fictif (à droite) pour chaque interface frontière. À ces volumes fictifs sont associés des conteneurs pour les champs conservatifs qui permettent ici aussi d'avoir une approche consistante en taille : le nombre de champs est directement proportionnel au nombre de volumes vrais auquel on ajoute le nombre de volumes fictifs.

Remarque : La connectivité volumique n'est pas lue aujourd'hui par *elsA*. Ainsi, pour tout traitement géométrique non trivial, des tableaux temporaires doivent être alloués, utilisés puis détruits (si nécessaire) au début de la boucle en temps.

Théorie de la LES

Avec la Simulation aux Grandes Échelles (LES), les grosses structures tourbillonnaires sont directement calculées grâce aux équations de Navier-Stokes tandis que les effets des plus petites échelles sont modélisés. Les intérêts de cette méthode sont tout d'abord liés à une grande réduction des besoins informatiques par comparaison à l'approche DNS et également aux informations supplémentaires apportées par rapport à l'approche RANS.

3.1 Filtrage des échelles

L'opérateur de moyenne spatiale filtrée est défini de la manière suivante pour toute fonction ϕ du champ de l'écoulement :

$$\bar{\phi}(x, t) = \int \phi(x - r, t) G_{\Delta}(r, x) dr . \quad (3.1)$$

L'intégration précédente se fait sur le domaine entier et G_{Δ} désigne l'opérateur de filtrage spatial au point x de largeur Δ . De nombreux filtres peuvent être utilisés mais les principaux sont présentés dans le tableau 3.1. Lors d'une simulation numérique, le paramètre Δ définit la taille des échelles de fluctuation que l'on souhaite modéliser et est imposé par la taille des mailles.

Filtre	Espace physique	Espace fréquentiel
Général	$G(r)$	$\hat{G}(\kappa) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\kappa r) G(r) dr$
Boite	$\frac{1}{\Delta} H(\frac{1}{2}\Delta - r)$	$\frac{\sin(\frac{1}{2}\kappa\Delta)}{\frac{1}{2}\kappa\Delta}$
Gaussien	$\left(\frac{6}{\pi\Delta^2}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-6r^2}{\Delta^2}\right)$	$\exp\left(\frac{-\kappa^2\Delta^2}{24}\right)$
Porte	$\sin\left(\frac{\pi r/\Delta}{\pi r}\right)$	$H(\pi/\Delta - \kappa)$

TABLE 3.1 – Principaux filtres utilisés pour la séparation des échelles spectrales

Les effets du filtrage peuvent être considérés à l'aide du spectre de l'énergie cinétique. La séparation entre les échelles résolues et modélisées se situe à une fréquence de coupure κ_c dépendant du dimensionnement du filtre (Fig.3.1).

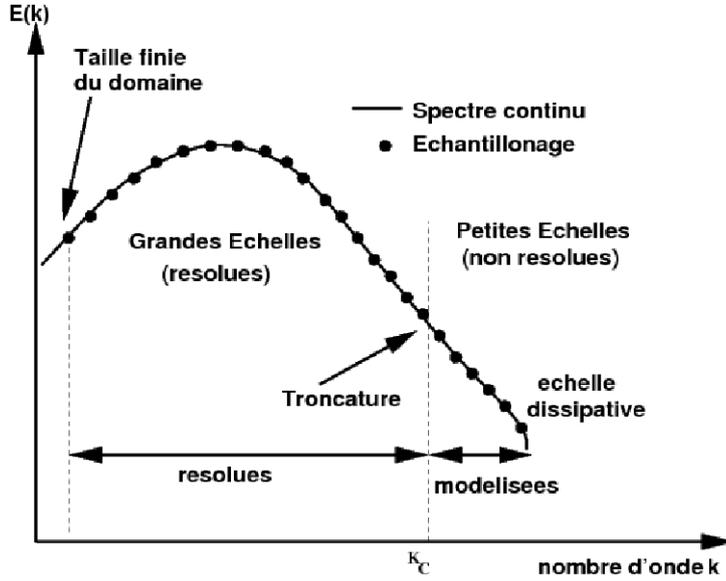


FIGURE 3.1 – Filtrage du spectre de l'énergie cinétique, [4]

Pour permettre un filtrage correct des équations de Navier-Stokes, le filtre doit vérifier les trois propriétés suivantes :

- Condition de normalisation : $\int G_{\Delta}(r, x) dr = 1$
- Linéarité : $\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g}$
- Commutativité pour la dérivation : $\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial x}$

Pour les écoulements à densité variable, on définit un filtre de Favre tel que pour toute fonction ϕ du champ de l'écoulement :

$$\tilde{\phi}(x, t) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x - r, t) \cdot \rho(x - r, t) G_{\Delta}(r, x) dx . \quad (3.2)$$

Ce filtre sera alors noté de la manière suivante :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} . \quad (3.3)$$

Désormais, on peut décomposer le champ de l'écoulement en deux parties, une partie filtrée et une partie fluctuante :

$$\phi(x, t) = \tilde{\phi}(x, t) + \phi''(x, t) . \quad (3.4)$$

Cette décomposition peut sembler similaire à celle faite en RANS, mais contrairement à la moyenne au sens de Reynolds un filtre n'est pas idempotent, c'est-à-dire :

$$\overline{\phi''}(x, t) = G_{\Delta}(1 - G_{\Delta})\phi(x, t) \neq 0 . \quad (3.5)$$

3.2 Equations de Navier-Stokes filtrées

L'opérateur de moyenne filtrée est appliqué aux équations de Navier-Stokes, ceci correspond en fait à un filtrage passe-bas en fréquence des équations. Les filtres sont considérés uniformes en espace de telle sorte que la filtrage et la dérivation commutent.

3.2.1 Équation de continuité

Pour cette équation, il n'y a pas de difficulté particulière étant donné la commutation du filtrage et de la dérivation. En partant de Eq. (1.10), on aboutit à :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.6)$$

3.2.2 Équation de la dynamique

A partir de Eq. (1.10), on obtient :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho U_i U_j}}{\partial x_j} = \overline{\rho F_i} - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} . \quad (3.7)$$

Dans Eq. (3.7), le terme non linéaire filtré $\overline{\rho U_i U_j}$ fait apparaître le tenseur des contraintes sous-maille τ_{ij}^k à partir de la décomposition suivante :

$$\overline{\rho U_i U_j} = \overline{\rho \tilde{U}_i \tilde{U}_j} + \overline{\rho \tilde{U}_i U_j''} + \overline{\rho U_i'' \tilde{U}_j} + \overline{\rho U_i'' U_j''} . \quad (3.8)$$

Les termes précédents ne pouvant pas être simplifiés (contrairement en RANS), une décomposition supplémentaire est proposée par Leonard [13] :

$$\overline{\rho \tilde{U}_i \tilde{U}_j} = \left(\overline{\rho \tilde{U}_i \tilde{U}_j} - \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j \right) + \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j = L_{ij} + \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j . \quad (3.9)$$

Puis en regroupant les différentes termes de Eq. (3.8), on obtient le tenseur des contraintes sous-maille :

$$\tau_{ij}^k = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} , \quad (3.10)$$

avec le tenseur :

- de Leonard : $L_{ij} = \overline{\rho \tilde{U}_i \tilde{U}_j} - \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j = \overline{\rho \tilde{U}_i \tilde{U}_j} - \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j$
- des tensions croisées : $C_{ij} = \overline{\rho \tilde{U}_i U_j''} + \overline{\rho U_i'' \tilde{U}_j} = \overline{\rho \tilde{U}_i U_j''} + \overline{\rho U_i'' \tilde{U}_j}$
- de Reynolds sous-maille : $R_{ij} = \overline{\rho U_i'' U_j''} = \overline{\rho U_i'' U_j''}$

Les tenseurs précédents représentent les interactions à toutes les échelles du milieu fluide. Le tenseur de Leonard L_{ij} représente les interactions entre les grandes échelles, c'est le seul calculable directement, les deux autres doivent être modélisés. Le tenseur des tensions croisées C_{ij} prend en compte les interactions entre les grandes et les petites échelles. Quant au tenseur de Reynolds sous-maille, il exprime les interactions entre les petites échelles.

Pour les termes visqueux $\bar{\tau}_{ij}$, la formulation suivante est généralement utilisée [11] car si l'on suppose que les fluctuations de température sont faibles, que les non-linéarités dues à la

viscosité peuvent être négligés pour les écoulements à grand nombre de Reynolds et que le filtrage de Reynolds du tenseur de déformation est égal au filtrage de Favre alors on admet :

$$\bar{\tau}_{ij} \approx \tilde{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{U}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (3.11)$$

Finalement, la modélisation comporte donc des termes supplémentaires contenus dans le terme τ_{ij}^k . Le système est donc ouvert et le problème de fermeture en LES consiste à schématiser τ_{ij}^k en fonction des variables de base.

3.2.3 Équation de l'énergie

L'application du filtrage de Favre sur l'équation de l'énergie pose plus de problème car celle-ci dépend de la formulation initiale et du choix des variables. Plusieurs écritures différentes sont envisageables mais dans notre cas les termes de sous-maïlles seront regroupés sous deux tenseurs. En filtrant Eq. (1.10), on aboutit à :

$$\frac{\partial \overline{\rho E}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho U_j E}}{\partial x_j} = \overline{\rho U_j F_i} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij} U_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i}. \quad (3.12)$$

L'énergie totale E s'exprime de la manière suivante :

$$\rho E = \rho C_v T + \frac{1}{2} \rho U_i U_i. \quad (3.13)$$

En remplaçant dans Eq. (3.12) et en développant le terme de contrainte σ_{ij} on obtient :

$$\frac{\partial \overline{\rho E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho U_j \left(C_v T + \frac{1}{2} U_i U_i \right)} \right) + \frac{\partial \overline{P U_j}}{\partial x_j} = \overline{\rho U_j F_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij} U_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i}. \quad (3.14)$$

Etant donné que pour un gaz parfait :

$$\bar{P} = \bar{\rho} R \tilde{T}. \quad (3.15)$$

En combinant l'énergie interne et le terme de pression-vitesse et avec Eq. (3.15), on peut réécrire :

$$\begin{aligned} \overline{\rho C_v T U_j} + \overline{P U_j} &= \bar{\rho} C_v \tilde{T} \tilde{U}_j + \bar{P} \tilde{U}_j + \overline{\rho C_v T U_j} + \overline{\rho R T U_j} - \left(\bar{\rho} C_v \tilde{T} \tilde{U}_j + \bar{\rho} R \tilde{T} \tilde{U}_j \right) \\ &= \bar{\rho} C_v \tilde{T} \tilde{U}_j + \bar{P} \tilde{U}_j + q_{ij}^k. \end{aligned} \quad (3.16)$$

où le flux de chaleur sous-maïlle q_{ij}^k est défini par Erlebacher [7] de la manière suivante :

$$q_{ij}^k = \overline{\rho C_v T U_j} - \bar{\rho} C_v \tilde{T} \tilde{U}_j. \quad (3.17)$$

Erlebacher explique également que les non-linéarités dans les flux de chaleur sont négligées à haut nombre de Reynolds, donc :

$$\bar{q}_i \approx \tilde{q}_i = -\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}. \quad (3.18)$$

Concernant les termes visqueux de Eq. (3.12), sachant que leur contribution est négligeable à petites échelles, on peut les réécrire comme :

$$\overline{\tau_{ij}U_i} \approx \tilde{\tau}_{ij}\tilde{U}_i . \quad (3.19)$$

Le terme d'énergie cinétique $\frac{1}{2}\rho u_i u_i$ reste donc à modéliser. D'après [11], en faisant une analogie avec l'approche statistique de la turbulence et en négligeant certaines tensions, on aboutit à l'approximation suivante :

$$\overline{\frac{1}{2}\rho U_i U_i U_j} \approx \frac{1}{2}\bar{\rho}\widetilde{U_i U_i U_j} - \bar{\tau}_{ii}^k \tilde{U}_j . \quad (3.20)$$

Cette approximation comporte tout de même une incertitude de justification. En combinant Eq. (3.16) et Eq. (3.20), on obtient l'expression :

$$\overline{\rho E U_j} + \overline{P U_j} = \bar{\rho}\tilde{E}\tilde{U}_j + \bar{P}\tilde{U}_j + q_{ij}^k , \quad (3.21)$$

où l'énergie totale résolue est donnée par :

$$\bar{\rho}\tilde{E} = \bar{\rho}C_v\tilde{T} + \frac{1}{2}\bar{\rho}\widetilde{U_i U_i} . \quad (3.22)$$

Et le terme final d'énergie cinétique $\bar{\rho}\widetilde{U_i U_i}$ s'exprime alors à l'aide du tenseur des tensions de sous-maille comme $\bar{\rho}\widetilde{U_i U_i} = \bar{\rho}\tilde{U}_i\tilde{U}_i - \bar{\tau}_{ii}^k$.

3.2.4 Système d'équations filtrées

Les équations de Navier-Stokes filtrées s'écrivent donc :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{U}_i\tilde{U}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}^k}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}^k}{\partial x_j} \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{E}\tilde{U}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{P}\tilde{U}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}^k \tilde{U}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{q}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}^k \tilde{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_{ij}^k}{\partial x_j} \quad (3.25)$$

Les termes restant à modéliser sont le tenseur des corrélations de vitesse de sous-maille τ_{ij}^k et le flux de chaleur de sous-maille q_{ij}^k .

3.3 Fermeture des équations

Afin de fermer le système des équations de Navier-Stokes filtrées, il est nécessaire de trouver une relation entre les quantités de sous-mailles τ_{ij}^k , q_{ij}^k et les variables résolues par le modèle sous-maille. Avant de présenter les deux modèles intégrés et utilisés dans le code *elsA*, le concept de viscosité de sous-maille sera introduit afin de mieux comprendre leur modélisation.

3.3.1 Concept de viscosité de sous-maille

Afin de modéliser la cascade directe d'énergie des grandes échelles vers les échelles de sous-maille, une analogie avec la cinétique des gaz est effectuée. On suppose que le mécanisme de transfert d'énergie des échelles résolues vers les échelles de sous-maille peut être représenté par un terme de diffusion grâce à l'utilisation d'une viscosité de sous-maille μ_{sm} . Une formulation de type Boussinesq [2] est utilisée, dans laquelle la partie déviatrice du tenseur des contraintes de sous-maille est reliée au tenseur de déformation du champ résolu par :

$$\tau_{ij}^\kappa - \frac{1}{3}\tau_{kk}^\kappa\delta_{ij} = -2\mu_{sm}\overline{\mathcal{T}}_{ij}, \quad (3.26)$$

avec la partie déviatrice du tenseur de déformation de la forme :

$$\mathcal{T}_{ij} = S_{ij} - \frac{1}{3}S_{kk}\delta_{ij}. \quad (3.27)$$

La viscosité de sous-maille μ_{sm} doit être modélisée. Le second terme étant de trace nulle, le terme $\frac{1}{3}S_{kk}$, qui correspond à l'énergie cinétique de sous-maille est ôté du premier membre afin d'assurer la validité de la relation en cas de contraction des indices. La trace τ_{kk}^κ peut être soit modélisée, soit négligée. Dans cette étude on suppose que cette quantité est absorbée par le terme de pression. On redéfinit donc un terme de pression modifiée Θ_P et de température modifiée Θ_T tels que :

$$\Theta_P = \bar{P} - \frac{1}{3}S_{kk} \quad (3.28)$$

$$\Theta_T = \tilde{T} - \frac{1}{2\bar{\rho}C_v}\tau_{kk}^\kappa. \quad (3.29)$$

D'après [11], l'équation s'écrit :

$$\Theta_P \approx \bar{\rho}R\Theta_T. \quad (3.30)$$

La modélisation d'une viscosité sous-maille μ_{sm} obtenue à partir de Eq. (3.26) peut se construire avec une échelle de longueur l_0 et une échelle temporelle t_0 caractéristiques des quantités sous-maille. Les modèles doivent donc être capables de déterminer ces échelles caractéristiques.

Quant au terme de flux de chaleur, celui-ci est modélisée en utilisant l'hypothèse d'un nombre de Prandtl turbulent constant ($Pr_t = 0.9$), ce qui donne :

$$q_{ij}^\kappa = -\frac{\mu_{sm}C_p}{Pr_t}\frac{\partial\Theta_T}{\partial x_i} = -\lambda_{sm}\frac{\partial\Theta_T}{\partial x_i}, \quad (3.31)$$

où λ_{sm} coefficient de conductivité thermique de sous-maille.

Finalement les équations de Navier Stokes filtrées se réécrivent :

$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{U}_i\tilde{U}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{\Theta}_P}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_{sm})\tilde{\mathcal{T}}_{ij} \right) \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{E}\tilde{U}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{\Theta}_P\tilde{U}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_{sm})\tilde{\mathcal{T}}_{ij}\tilde{U}_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\lambda + \lambda_{sm})\frac{\partial\Theta_T}{\partial x_i} \right) \quad (3.34)$$

Pour fermer ces équations, il faut maintenant déterminer l'expression de la viscosité de sous-maille $\mu_{sm} = \rho\nu_{sm}$; c'est le rôle des modèles suivants. Les deux modèles présentés étaient codés dans *elsA* en structuré et ont été étendus au non structuré.

3.3.2 Modèle de Smagorinsky

Le modèle le plus simple est celui de Smagorinsky (1963) et est également à la base de nombreux autres modèles. Il est basé sur les échelles résolues et utilise une approche semblable au modèle de longueur de mélange de Prandtl. L'échelle de longueur l_0 est obtenue en supposant que la longueur de coupure Δ imposée par le filtre est représentative des modes de sous-maille :

$$l_0 = C_s \Delta , \quad (3.35)$$

où C_s est la constante du modèle à déterminer. L'évaluation de l'échelle de temps suppose qu'il existe un équilibre local entre le taux de production d'énergie, le taux de dissipation de cette énergie par viscosité en énergie interne et le flux d'énergie cinétique à travers la coupure imposée par le filtre. Le temps caractéristique des échelles de sous-maille est alors égal à celui des échelles résolues. Il correspond au temps de retournement d'une grosse structure donné par :

$$\frac{1}{t_0} = (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2} , \quad (3.36)$$

avec $\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right)$ (car modèle développé dans un cadre incompressible).

La viscosité tourbillonnaire s'écrit alors :

$$\nu_{sm} = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} . \quad (3.37)$$

En supposant que la turbulence de l'écoulement obéit aux lois de cascade énergétique de Kolmogorov, la constante C_s est évaluée de façon à ce que la dissipation de sous-maille soit équivalente à la dissipation des échelles non-résolues [12] :

$$C_s = \frac{1}{\pi} \left(\frac{3C_k}{2} \right)^{-3/4} \approx 0.18 , \quad (3.38)$$

avec $C_k = 1.4$ constante de Kolmogorov. En pratique ce modèle est connu pour être trop dissipatif pour des écoulement où un cisaillement moyen est présent (type couche limite par exemple). De plus, la constante C_s doit être modifié selon le type d'écoulement étudié et ce modèle est incapable de prédire la dynamique des écoulements faiblement turbulents ou transitionnels.

3.3.3 Modèle WALE

Le modèle WALE (Wall Adapting Local Eddy-Viscosity) est basé sur l'approche de Smagorinsky pour lequel l'échelle de temps caractéristique des échelles de sous-maille est construite à la fois avec le tenseur de déformation \bar{S}_{ij} et le tenseur de rotation $\bar{\Omega}_{ij}$. Cette nouvelle formulation permet de prendre en compte les régions turbulentes où la vorticit  est sup rieure au taux de d formation et de fournir le bon comportement de la viscosit  sous-maille ν_{sm} au voisinage des parois, sans utiliser de fonction d'amortissement. Nicoud et Ducros [6] proposent d' crire la viscosit  de sous-maille telle que :

$$\nu_{sm} = (C_w \Delta)^2 \overline{OP}(\mathbf{x}, t) , \quad (3.39)$$

où C_w constante du modèle et OP un opérateur spatial et temporel, homogène à une fréquence et défini à partir du champ résolu. L'opérateur du modèle de WALE est invariant par translation ou rotation et est fonction des taux de déformation et de rotation. Nicoud et Ducros [6] définissent la partie symétrique sans trace du carré du tenseur gradient de vitesse telle que :

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_k} \right)^2 . \quad (3.40)$$

La viscosité de sous-maille s'écrit alors en utilisant l'opérateur précédent :

$$\nu_{sm} = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} , \quad (3.41)$$

avec $C_w \approx 10.6 C_s^2$. Ce modèle est capable de détecter les structures turbulentes à fort taux de déformation et/ou à fort taux de rotation. La viscosité turbulente qui en résulte est très faible dans le cas d'un cisaillement pur ou d'une couche limite laminaire, autorisant la simulation de la transition à la turbulence.

Schémas numériques

Le code *elsA* utilise uniquement la méthode des volumes finis et c'est un code cell-center, c'est-à-dire que les champs sont stockés au centre des cellules et non sur les noeuds du maillage. Afin de simuler numériquement les équations de Navier-Stokes, il est d'abord nécessaire de discrétiser ces équations. La résolution se ramène ensuite au calcul des flux aux interfaces du maillage. Les flux sont classés en deux grandes catégories, les flux convectifs et diffusifs. Ces deux types de flux sont résolus par des solveurs différents qui sont brièvement présentés dans la suite.

4.1 Solveurs diffusifs

4.1.1 En structuré

La présentation des solveurs diffusifs en structuré restera très succincte étant donné que ces solveurs sont déjà implémentés et validés *elsA* [14]. Il existe trois méthodes dans *elsA* pour calculer les gradients aux interfaces :

- La méthode 3p : elle utilise directement la cellule décalée autour de l'interface pour calculer par circulation le gradient à l'interface.
- La méthode 5p : elle évalue le gradient à l'interface comme la moyenne arithmétique des gradients moyens dans les cellules adjacentes. Le gradient moyen d'une cellule est calculé par circulation sur le contour de la cellule, en prenant comme valeur du champ à l'interface la moyenne arithmétique des champs dans les cellules adjacentes.
- La méthode 5p_cor : elle utilise une moyenne des gradients des cellules pondérée par les volumes des cellules adjacentes et corrige le gradient obtenu en se basant sur des flux calculés sur une cellule décalée autour de l'interface.

La problématique de la méthode 5p est qu'elle produit un découplage pair-impair. En 1D par exemple, il est très facile de montrer que le bilan de flux sur un volume donné ne dépend pas des volumes adjacents. Dans une région où les phénomènes diffusifs sont prépondérants, cela peut poser des problèmes d'oscillation point à point. La technique 5p_cor sert essentiellement à s'affranchir de ces problèmes de découplage pair / impair et améliore la dissipation du schéma dans les hautes fréquences (non résolues par la LES). Pour commencer, à l'aide de la formule de Green, la méthode calcule des gradients centrés ∇W dans les cellules du maillage. Ensuite, ces gradients servent à calculer un gradient moyen sur l'interface Σ en tenant compte des volumes V des cellules de part et d'autre :

$$\nabla W_{\Sigma} = V_{(i,j)} \nabla W_{(i,j)} + V_{(i-1,j)} \nabla W_{(i-1,j)}.$$

A partir de maintenant, ce sont les corrections de gradient qui sont évaluées. La première concerne le flux à travers la surface de vecteur normal $\mathbf{n}_{(i+1,j)}$:

$$\mathcal{F}_{ip1} = \frac{1}{2}(W_{(i+1,j)} + W_{(i,j)})\mathbf{n}_{(i+1,j)}.$$

Ensuite, une correction par rapport au flux entrant à travers la surface de vecteur normal $\mathbf{n}_{(i-1,j)}$ est utilisée :

$$\mathcal{F}_{im1} = \frac{1}{2}(W_{(i-1,j)} + W_{(i-2,j)})\mathbf{n}_{(i-1,j)}.$$

Enfin, deux corrections utilisant les valeurs et les vecteurs normaux aux interfaces du volume décalé qui sont parallèles à l'interface sont calculées :

$$\mathcal{F}_{(i,j)} = W_{(i,j)}(\mathbf{n}_{(i,j)} + \mathbf{n}_{(i+1,j)}) \text{ et } \mathcal{F}_{(i-1,j)} = W_{(i-1,j)}(\mathbf{n}_{(i,j)} + \mathbf{n}_{(i+1,j)}).$$

Finalement :

$$\nabla W_{\mathbf{n}_{(i,j)}} = \frac{1}{2V_{int}} \left(\nabla W_{\Sigma} - \mathcal{F}_{ip1} + \mathcal{F}_{im1} + \mathcal{F}_{(i,j)} - \mathcal{F}_{(i-1,j)} \right) \mathbf{n}_{(i,j)},$$

avec V_{int} volume de la cellule décalée :

$$V_{int} = \frac{1}{2} \left(V_{(i,j)} + V_{(i-1,j)} \right).$$

Pour l'industriel, le coût numérique de cette méthode par rapport à une approche 5p classique reste acceptable.

4.1.2 En non structuré

Dans le cas d'un maillage non structuré, il est plus difficile de mettre en place une méthode remplissant toutes les conditions de stabilité, de précision, de robustesse et de performance.

Méthode "5p"

La méthode "5p" s'adapte facilement au non structuré et est identique au structuré. Notons K un volume et $i = 1, \dots, n_K$ ses faces, le gradient centré de W en K s'écrit :

$$\nabla W_K = \frac{1}{|K|} \sum_{i=1}^{n_K} \frac{1}{2} (W_K + W_i) \cdot \mathbf{n}_i, \quad (4.1)$$

où $|K|$ correspond au volume de la cellule, W_K indique la valeur du champ dans le volume K , W_i la valeur du champ dans la cellule adjacente à K par la face i et \mathbf{n}_i la normale à la face i dirigée vers l'extérieur du volume K . Le gradient sur l'interface Σ , interface entre les volumes G et D situés respectivement à gauche et à droite de l'interface, s'écrit alors :

$$\overline{\nabla W_{\Sigma}} = \frac{1}{2} (\nabla W_G + \nabla W_D). \quad (4.2)$$

Toutefois cette méthode utilise deux différences centrées et pose un problème de découplage pair-impair comme expliqué précédemment.

Méthode “5pcor”

Bien que le nom de la méthode soit identique à celle du structuré, l’implémentation est complètement différente. L’approche 5pcor apporte une correction permettant de supprimer l’indépendance au volume adjacent et ainsi supprime le découplage pair / impair. Le principe de la méthode 5pcor est simple : le gradient calculé par la méthode “5p” est corrigé suivant la direction du vecteur reliant les deux centres des cellules adjacentes. Le gradient de l’interface Σ s’écrit alors :

$$\nabla W_\Sigma = \overline{\nabla W_\Sigma} - \left(\overline{\nabla W_\Sigma} \cdot \overrightarrow{C_G C_D} - (W_D - W_G) \right) \frac{\overrightarrow{C_G C_D}}{\|\overrightarrow{C_G C_D}\|^2}, \quad (4.3)$$

où $\overline{\nabla W_\Sigma}$ représente le gradient obtenu par la méthode “5p”, C_G et C_D les centres des volumes G et D situés respectivement à gauche et à droite de l’interface.

4.2 Solveurs convectifs

Le calcul du flux convectif se fait à chaque interface et pour les calculs (U-)RANS, deux solveurs sont en général utilisés : le solveur de Jameson et le solveur de Roe. La présentation de ces schémas sera faite dans le cas d’un approche structurée en une dimension, ce cas étant facilement généralisable aux dimensions supérieures. Pour expliciter ces schémas, on utilisera l’équation d’advection suivante :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \alpha \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad (4.4)$$

où U variable conservative et α la vitesse d’advection constante. Pour la résolution par volumes finis, on intègre Eq. (4.4) sur une cellule C_i du maillage.

$$\int_{C_i} \frac{\partial U}{\partial t} dx + \alpha \int_{C_i} \frac{\partial U}{\partial x} dx = 0. \quad (4.5)$$

Le second terme de Eq. (4.5) se réécrit alors :

$$\int_{C_i} \frac{\partial U}{\partial x} dx = \int_{\partial C_i} U \mathbf{n} dx, \quad (4.6)$$

avec ∂C_i contour de la cellule et \mathbf{n} normale sortante de la cellule C_i . Ainsi, en une dimension, l’expression du terme convectif devient :

$$\int_{C_i} \frac{\partial U}{\partial x} dx = f_{i+1/2} - f_{i-1/2}, \quad (4.7)$$

où $f_{i+1/2}$ représente le flux à l’interface $i + \frac{1}{2}$. Pour la suite, nous noterons Δx la longueur (supposée constante) de chaque volume élémentaire C_i .

Nous verrons par la suite que le schéma centré est le seul schéma disponible dans la version hybride du solveur et capable de servir en simulations aux grandes échelles.

4.2.1 Schéma centré de Jameson

Afin d'évaluer la valeur du flux à l'interface, on utilise un développement en série de Taylor à l'interface $i + \frac{1}{2}$.

$$f_i = f_{i+1/2} + f'_{i+1/2}(x_i - x_{i+1/2}) + o(\Delta x/2)^2 \quad (4.8)$$

$$f_{i+1} = f_{i+1/2} + f'_{i+1/2}(x_{i+1} - x_{i+1/2}) + o(\Delta x/2)^2 \quad (4.9)$$

En sommant les deux équations précédentes, on obtient :

$$f_i + f_{i+1} = 2f_{i+1/2} + f'_{i+1/2}\left(-\frac{\Delta x}{2} + \frac{\Delta x}{2}\right) + o(\Delta x)^2 . \quad (4.10)$$

Donc :

$$\frac{f_i + f_{i+1}}{2} = f_{i+1/2} + o(\Delta x)^2 . \quad (4.11)$$

Ce schéma est centré d'ordre 2 en espace mais il est instable numériquement. Jameson, Schmidt et Turkel [9] proposent donc de rajouter une dissipation numérique ou dissipation artificielle. L'expression du flux à l'interface $i + \frac{1}{2}$ devient :

$$f_{i+1/2} = \frac{f_i + f_{i+1}}{2} - d_{i+1/2} , \quad (4.12)$$

avec d_{i+1} terme de dissipation artificielle tel que :

$$d_{i+1/2} = r_{i+1/2} \left[\varepsilon_{i+1/2}^{(2)}(f_{i+1} - f_i) - \varepsilon_{i+1/2}^{(4)}(f_{i+2} - 3f_{i+1} + 3f_i - f_{i-1}) \right] . \quad (4.13)$$

Le facteur d'échelle $r_{i+1/2}$, fonction du flux convectif et de la taille de la cellule est défini de la manière suivante :

$$r_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\lambda(A)_i^I + \lambda(A)_{i+1}^I) , \quad (4.14)$$

où $\lambda(A)_i^I$ rayon spectral de la matrice jacobienne du flux physique. Le rayon spectral est défini comme le plus grand module des valeurs propres d'une matrice. De plus, les deux termes de dissipation $\varepsilon_{i+1/2}^{(2)}$ et $\varepsilon_{i+1/2}^{(4)}$ s'expriment :

$$\varepsilon_{i+1/2}^{(2)} = k^{(2)}\nu_{i+1/2} \quad (4.15)$$

$$\varepsilon_{i+1/2}^{(4)} = \max(0, k^{(4)} - \varepsilon_{i+1/2}^{(2)}) , \quad (4.16)$$

avec $k^{(2)}$ et $k^{(4)}$ constantes à fixer selon le cas étudié et $\nu_{i+1/2} = \max(\beta_i, \beta_{i+1})$ sachant que :

$$\beta_i = \left| \frac{p_{i+1} - 2p_i + p_{i-1}}{p_{i+1} + 2p_i + p_{i-1}} \right| . \quad (4.17)$$

4.2.2 Schéma décentré de Roe

Contrairement au schéma de Jameson, le schéma de Roe ne prend pas la moyenne entre les états dans cellules voisines de l'interface mais prend la valeur de la cellule précédent l'interface (selon le signe de la vitesse d'advection α), soit :

$$f_{i+1/2} = \begin{cases} f_i & \text{si } \alpha > 0 \\ f_{i+1} & \text{si } \alpha < 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

En 1D, f_i représente un gradient qui est approché par une différence finie au premier ordre. Ainsi :

$$\alpha \frac{\partial U}{\partial x} \simeq \begin{cases} \alpha^+ \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} & \text{si } \alpha > 0 \text{ (valeur calculée en } i - 1) \\ \alpha^- \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} & \text{si } \alpha < 0 \text{ (valeur calculée en } i + 1) \end{cases}$$

C'est une approximation d'ordre 1. Posons :

$$\alpha^+ = \max(0, \alpha)$$

$$\alpha^- = \min(\alpha, 0)$$

$$\alpha = \alpha^+ + \alpha^-$$

$$\bar{\alpha} = \alpha^+ - \alpha^-$$

L'équation d'advection peut alors se réécrire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} + (\alpha^+ + \alpha^-) \frac{\partial U}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial U}{\partial t} + \alpha^+ \left(\frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} \right) + \alpha^- \left(\frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} \right) &= 0 \\ \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\alpha + \bar{\alpha}}{2} \left(\frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} \right) + \frac{\alpha - \bar{\alpha}}{2} \left(\frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} \right) &= 0 \\ \frac{\partial U}{\partial t} + \alpha \left(\frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2\Delta x} \right) - \bar{\alpha} \Delta x \left(\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{2(\Delta x)^2} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \left[\alpha \left(\frac{U_{i+1} + U_i}{2\Delta x} \right) - \bar{\alpha} \left(\frac{U_{i+1} - U_i}{2\Delta x} \right) \right] - \left[\alpha \left(\frac{U_i + U_{i-1}}{2\Delta x} \right) - \bar{\alpha} \left(\frac{U_i - U_{i-1}}{2\Delta x} \right) \right] = 0 .$$

En identifiant l'équation précédente avec l'équation d'advection discrétisée par la méthode des volumes finis (Eq. (4.20)) :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \left(\frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} \right) = 0 . \quad (4.20)$$

On obtient :

$$f_{i+1/2} = \alpha \left(\frac{U_{i+1} + U_i}{2} \right) - \bar{\alpha} \left(\frac{U_{i+1} - U_i}{2} \right). \quad (4.21)$$

Le schéma décentré de Roe est finalement un schéma qui s'écrit sous la forme d'une partie centrée et d'un terme supplémentaire dépendant de la vitesse d'advection. En fait, en reprenant Eq. (4.19), on se rend compte que le dernier terme est un terme à l'origine de diffusion numérique (ou de dissipation) qui s'apparente à un laplacien. En effet, on a :

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x f'(u) + \frac{(\Delta x)^2}{2} f''(u) + o((\Delta x)^3),$$

et

$$u_{i-1} = u_i - \Delta x f'(u) + \frac{(\Delta x)^2}{2} f''(u) + o((\Delta x)^3),$$

en sommant les deux expressions précédentes, on obtient :

$$f''(u) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{(\Delta x)^2} + o(\Delta x).$$

Ainsi, le schéma de Roe est donc naturellement dissipatif : il va avoir tendance à diminuer l'amplitude des modes propres de l'écoulement. Pour effectuer des LES, un schéma de Roe aura tendance à détruire les fluctuations de l'écoulement, et donc à laminariser l'écoulement. En pratique, le schéma de Roe ne pourra pas être utilisé en LES.

Vérification et validation

Les cas tests présentés dans la suite ont pour objectif de comparer les résultats obtenus en structuré et en non structuré avec le modèle de simulation aux grandes échelles. Ces cas tests correspondent à des géométries simples et connues permettant de simuler des écoulements turbulents instationnaires.

5.1 Minimum channel

Ce cas test permet de présenter un modèle d'écoulement turbulent dans un canal. Le domaine de simulation est constitué de deux parois parallèles et les autres faces sont périodiques deux à deux suivant leurs directions normales.

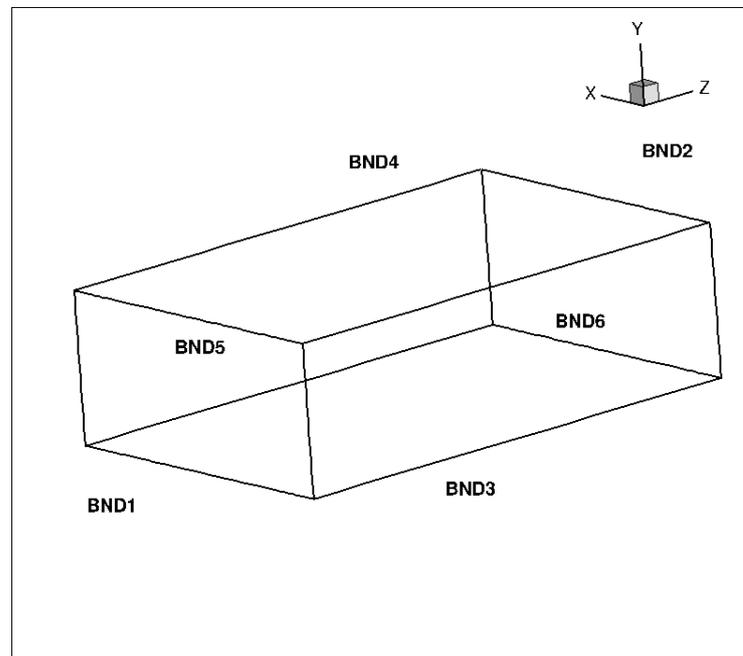


FIGURE 5.1 – Configuration générale du Minimum Channel

Fig. 5.1, présente l'aspect général du canal, où BND5 et BND6 sont des parois isothermes et BND1 et BND3 respectivement périodiques avec BND2 et BND4.

Le tableau suivant 5.1 donne les dimensions caractéristiques du canal. La direction pri-

Dimension	Nombre de mailles
L_x, L_y, L_z	N_x, N_y, N_z
2, 3.1416, 6.2832	100, 80, 80

TABLE 5.1 – Dimensions du domaine

vilégiée de l'écoulement est la direction \mathbf{z} . Afin de réduire les temps de calcul de ce cas test, on divise le canal en 16 tranches selon la direction \mathbf{z} . On obtient donc 16 blocs de dimension $N_x = 100, N_y = 80, N_z = 5$. La figure 5.2 représente ce maillage avec \mathbf{x} la hauteur du canal.

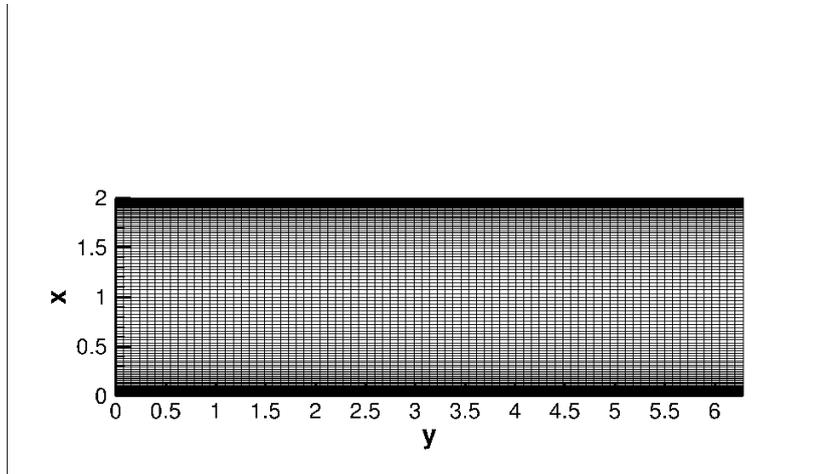


FIGURE 5.2 – Aperçu du maillage LES

Afin d'assurer une turbulence dans le canal et en accord avec quelques publications [5], [10], la simulation est réalisée à un nombre de Reynolds turbulent égal à 395 ($Re_\tau = 395$). Formellement, le Reynolds local est équivalent au Reynolds turbulent au carré, on obtient alors un Reynolds de l'ordre de $15 * 10^4$. Le nombre de Prandtl ($Pr = \mu C_p / \lambda$) est fixé à 0.72 pour l'ensemble des simulations. Le modèle LES choisit pour l'ensemble des simulations est celui de WALE. Les simulations sont effectuées avec le schéma de Jameson pour lequel le terme de dissipation n'est pas pris en compte : la convection est traitée par un schéma purement centré d'ordre 2. Pour la diffusion, les schémas "5p" et "5pcor" seront utilisés et les résultats obtenus analysés.

Pour que la turbulence soit maintenue tout au long de la simulation, le terme source utilisé n'est pas constant mais est calculé à chaque itération afin que le terme de rappel "réanime" la turbulence au cas où l'écoulement se laminarise. Ces termes de forçage, introduits par Cabrit [3], sont des termes constants en espace mais instationnaires. Pour le terme massique, on utilise la formulation suivante :

$$S_m^{t+1} = \frac{\rho_{ref} - \frac{S_m^t}{V}}{\tau_{relax}}, \quad (5.1)$$

où S_m^{t+1} est le terme source imposé à l'instant $t + \Delta t$, ρ_{ref} la masse volumique de référence, V le volume du domaine et τ_{relax} une constante de temps de relaxation (prise égale à 1 dans notre cas). De la même manière, pour le terme de quantité de mouvement, on utilise une formulation dynamique qui rappelle l'écoulement vers un débit désiré $\rho_{ref}U_{ref}$:

$$S_x^{t+1} = S_x^{ref} + \frac{\rho_{ref}U_{ref} - \frac{S_x^t}{V}}{\tau_{relax}}, \quad (5.2)$$

où S_x^{t+1} est le terme source imposé à l'instant $t + \Delta t$ et S_x^{ref} une constante en espace et en temps (permettant d'accélérer la convergence du calcul si bien choisie mais égale à 0 dans notre cas). Pour l'équation de l'énergie, on utilise un terme de forçage dynamique qui se rapproche de la température de mélange de la simulation vers une température de référence T_{ref} :

$$Q^{t+1} = Q^{ref} + \frac{T_{ref} - \frac{Q^t}{S_x^t}}{\tau_{relax}}, \quad (5.3)$$

avec Q^{ref} une constante en espace et en temps (également fixée à 0 dans notre cas). L'intérêt des termes dynamiques 5.2 et 5.3 est double. D'une part, on maîtrise le nombre de Reynolds d'une simulation. Ceci facilite la comparaison avec des corrélations quand on fait varier le nombre de Prandtl ou le gradient de température (inutile dans notre cas). D'autre part, par rapport à l'emploi de termes de forçage constants, la phase transitoire du calcul est réduite car la simulation converge plus vite vers un état statistiquement stationnaire.

Ce terme source était uniquement codé en structuré, l'implémentation de celui-ci en non structuré a donc été nécessaire pour assurer la turbulence dans le canal.

Dans le but de comparer les résultats obtenus en non structuré et en structuré, les résultats seront d'abord présentés avec la méthode '5p' (dont le code est identique en structuré et non structuré) puis avec la méthode '5pcor' qui diffère pour les deux. Afin d'obtenir des résultats comparables, les champs présentés dans la suite sont tous moyennés temporellement et également spatialement. Étant donné que les profils de vitesse qui nous intéressent se situent entre les deux parois ; la moyenne spatiale est effectuée selon les directions \mathbf{y} et \mathbf{z} .

5.1.1 Résultats '5p'

Dans un premier temps, les champs conservatifs sont étudiés, c'est-à-dire la masse volumique, la quantité de mouvement suivant \mathbf{z} et l'énergie cinétique. Pour cela, on récupère les champs moyennés temporellement et spatialement et on étudie l'évolution en fonction de la hauteur du canal.

Bien que les résultats aient des allures similaires, ils diffèrent tout de même sur plusieurs points. La figure 5.3 montre l'une des principales différences. La simulation non structuré induit des oscillations au niveau de la paroi pour la masse volumique. De plus, la valeur maximale de la masse volumique est légèrement plus importante pour la simulation sur maillage structuré. Concernant les quantités de mouvement, seule celle suivant \mathbf{z} est identique en structuré et non structuré (cf. Fig. 5.4). Celle suivant \mathbf{x} n'est pas du tout semblable mais est tout de même négligeable car les variations sont trois ordres de grandeur inférieures à celles suivant \mathbf{z} .

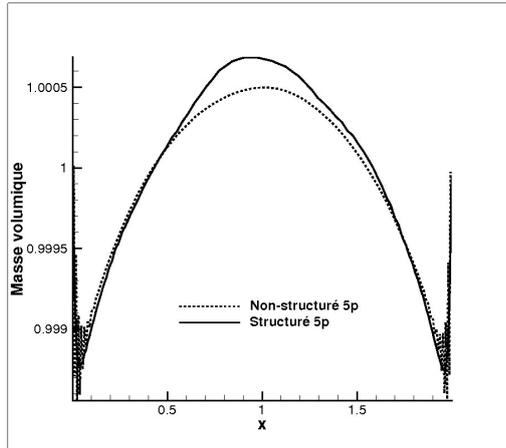


FIGURE 5.3 – Évolution de la densité ρ

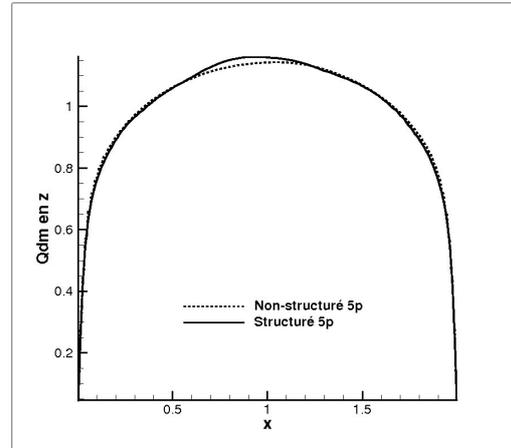


FIGURE 5.4 – Évolution de la quantité de mouvement ρU_z

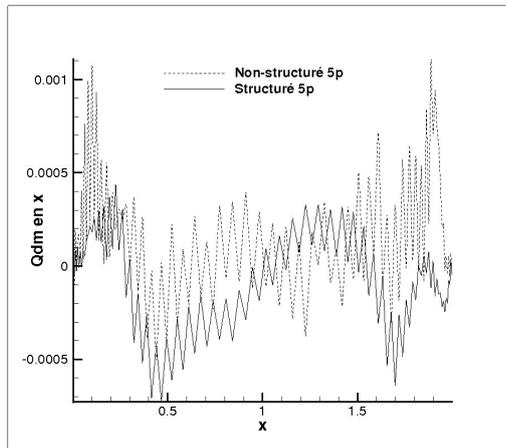


FIGURE 5.5 – Évolution de la quantité de mouvement ρU_x

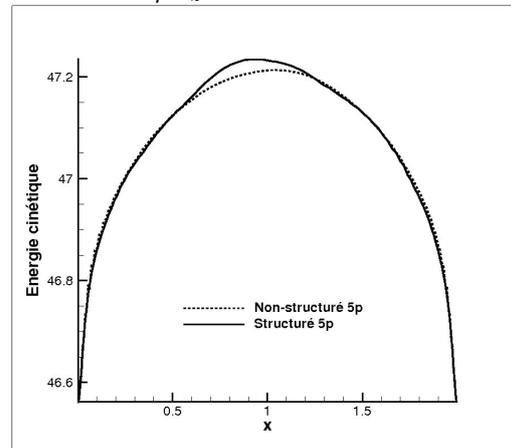


FIGURE 5.6 – Évolution de l'énergie cinétique E

Ensuite, les autres résultats observables sont les valeurs du tenseur des contraintes visqueuses à la paroi. Il a tout d'abord fallu coder dans *elsA* afin d'extraire ces données des simulations non structurées (cf. Annexe B). Pour comparer les résultats structurés et non structurés, la contrainte visqueuse dans la direction \mathbf{z} est moyennée sur toute la paroi (moyenne suivant \mathbf{y} et \mathbf{z}). Au final, on obtient un réel par simulation. Notons Cf_s et Cf_{uns} ces coefficients pour les simulations structurées et non structurées avec la méthode 5p, leurs valeurs sont alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} Cf_s = 0.00281465 \\ Cf_{uns} = 0.002817361 \end{array} \right. ,$$

L'erreur relative pour le coefficient de contrainte visqueuse entre les deux simulations est donc d'environ 1 %.

En conclusion, cette étude montre que les résultats LES sont sensiblement identiques mais pas égaux. Cela se justifie par plusieurs points :

- Les calculs LES sont sensibles à l’ordonnancement des opérations, notamment sur des petits réels. Cela n’est pas suprenant compte tenu de l’arithmétique des calculateurs.
- Les métriques en structuré et en non structuré ne sont pas évaluées de la même manière, ce qui a nécessairement une influence sur les résultats. Il est prévu d’effectuer une simulation à iso-métrie prochainement.

5.1.2 Résultats '5pcor'

Dans cette partie, les résultats étudiés sont les mêmes que précédemment mais les simulations ont été réalisées avec la méthode 5p_cor, différente pour la partie structurée et non structurée.

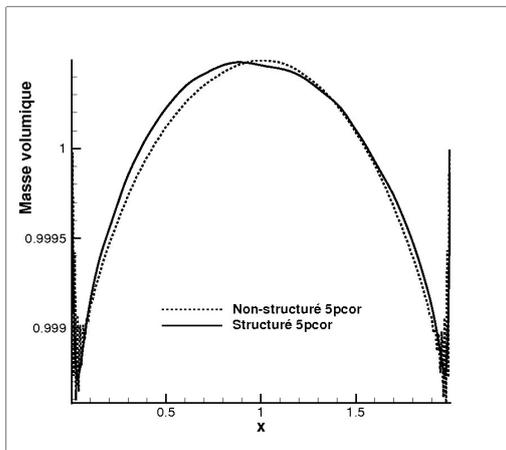


FIGURE 5.7 – Évolution de la densité ρ

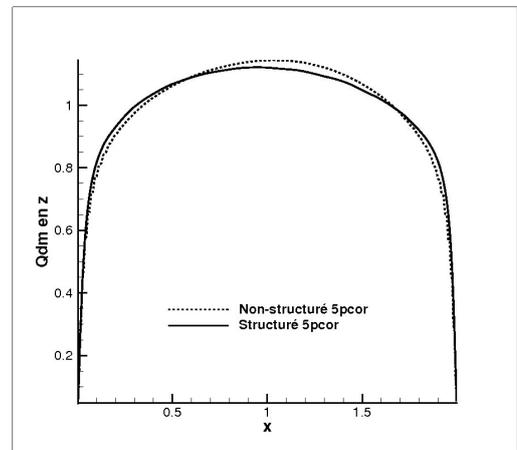


FIGURE 5.8 – Évolution de la quantité de mouvement ρU_z

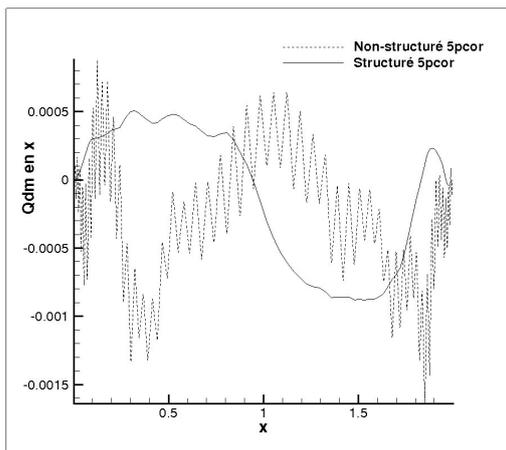


FIGURE 5.9 – Évolution de la quantité de mouvement ρU_x

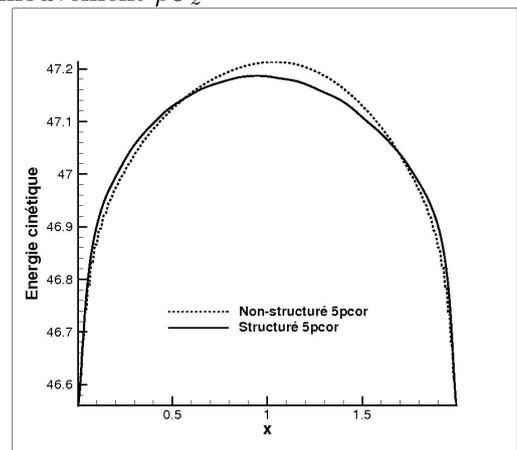


FIGURE 5.10 – Évolution de l’énergie cinétique E

Dans ce cas, les résultats sont plus proches qu’avec la méthode 5p. Les maxima de toutes les variables conservatives sont mieux reproduits. Il reste tout de même le problème des oscillations

de la masse volumique au voisinage de la paroi pour la simulation non structurée.

Pour ce qui est des valeurs des coefficients des contraintes visqueuses à la paroi, on obtient les résultats suivants pour la méthode 5p_cor :

$$\left\{ \begin{array}{l} Cf_s = 0.003099253 \\ Cf_{uns} = 0.00280922 , \end{array} \right.$$

L'erreur relative est donc de l'ordre de 10 %, soit 10 fois supérieure au résultat obtenu pour la méthode 5p. Ceci paraît normal étant donné que les schémas diffusifs sont différents entre le structuré et le non structuré et que le coefficient de frottement pariétal est un excellent indicateur de la qualité du schéma diffusif. Cet écart s'explique donc de la manière suivante :

- Le coefficient de frottement est un indicateur de la précision du schéma numérique considéré.
- En structuré, le schéma 5pcor construit un gradient à l'interface sur un demi volume qui s'appuie sur la paroi et qui passe par le centre du volume. Cette approche a été validée depuis longtemps pour les calculs de LES.
- En non structuré, on n'utilise pas de demi-volume : le gradient dans le premier volume au dessus de la paroi est simplement extrapolé (à l'ordre 0) à la paroi.

En conclusion, il sera nécessaire de mettre en place rapidement un schéma numérique pour les maillages non structurés conduisant à un gradient calculé à l'interface comme en structuré.

Conclusion

Le but du stage était d'établir un état des lieux de *elsA* pour la simulation aux grandes échelles sur maillage non structuré afin de participer à la réalisation d'une version hybride du code. Le travail a notamment consisté en la comparaison des versions structurée et non structurée du code pour le cas test du 'Minimum Channel'. Afin d'arriver à ce stade, il a été nécessaire de comprendre le fonctionnement du code *elsA*, de mettre en place le cas test en structuré et non structuré et également de programmer dans *elsA* afin de permettre l'exploitation des résultats.

Afin de rendre la Simulation aux Grandes Échelles opérationnelle en non structuré, il reste encore certains points à implémenter. Tout d'abord, les extractions de données ne sont pas totalement codées, des informations ne sont pas encore accessibles en non structuré comme les corrélations de vitesse ou la température. Toutefois, les données utilisées ont permis d'identifier ou de conforter des axes de travail. En particulier, nous avons focalisé notre attention sur le schéma diffusif et il semble qu'il sera nécessaire de mettre en œuvre prochainement une approche permettant de calculer un gradient directement à l'interface paroi. Parmi les schémas analysés lors d'un stage précédent, des schémas diamant et demi diamant ont été retenus et seront mis en œuvre dans *elsA* prochainement. Ils sont numériquement coûteux car ils nécessitent de reconstruire des valeurs aux noeuds du maillage par interpolation ou moindre carrés. Cela implique en particulier de calculer efficacement une connectivité dédiée à ce calcul.

Ensuite, les travaux amont concernant la LES doivent être complétés au minimum par un cas de Turbulence Homogène Isotrope. Il a été décidé dès le début du stage d'analyser plutôt les comportements des schémas diffusifs au voisinage des parois, mais le cas de THI sera traité dès que possible. Le principe de la THI consiste à analyser le spectre de l'énergie cinétique turbulente. En particulier, des comportements non physiques peuvent être obtenus lors de l'utilisation de schémas numériques diffusifs non adaptés à la LES (on ne retrouve pas le comportement théorique d'évolution de l'énergie cinétique turbulente en fonction du nombre d'onde). Enfin, une fois la THI correcte, des cas plus industriels seront traités : on s'appuiera alors sur les travaux effectués au CERFACS en LES pour les pales de turbomachines.

Finalement, afin de profiter du "temps perdu" lors des simulations en fin de stage, il a été implanté dans *elsA* la construction d'un stencil à 4 points. L'idée est ici de disposer des volumes "à gauche du gauche" et "à droite du droit" afin d'implanter des schémas convectifs comme en structuré. Ce travail n'est pas en liaison directe avec le sujet du stage, mais il constitue clairement une préparation des travaux futurs sur les schémas convectifs d'ordre élevé dédiés à la LES (schéma centré d'ordre 4, schéma du troisième ordre basé sur un formalisme de type MUSCL faisant intervenir des gradients centrés et upwinds...). Ce travail géométrique est décrit en détails en annexe.

La théorie de Kolmogorov

Dans cette annexe seront présentées les hypothèses de Kolmogorov et la cascade d'énergie. En résumé, l'idée de la cascade d'énergie (introduite par Richardson en 1922) est que l'énergie cinétique est produite par la turbulence aux plus grandes échelles des tourbillons. Par la suite, cette énergie est transférée vers de plus petites en plus petites échelles, et quand cette énergie est portée par les plus petites échelles elle est dissipée par les forces visqueuses. Kolmogorov a repris cette idée et a réussi à quantifier les plus petites échelles de la turbulence.

Pour expliquer au mieux les hypothèses de Kolmogorov, considérons un écoulement turbulent à nombre de Reynolds élevé, ayant une vitesse caractéristique U et une longueur caractéristique L . Le nombre de Reynolds s'exprime alors $Re = UL/\nu$ où ν représente la viscosité cinématique du fluide.

Le premier concept de la cascade d'énergie est que la turbulence est composée de tourbillons de plusieurs tailles. Ceux de taille l ont une vitesse caractéristique de $u(l)$ et un temps caractéristique de $\tau(l) = l/u(l)$. Les tourbillons des plus grandes échelles sont caractérisés par une longueur l_0 (comparable à la longueur caractéristique de l'écoulement L) et une vitesse $u_0 = u(l_0)$ (comparable à U) et donc un nombre de Reynolds Re_0 élevé et comparable à celui de l'écoulement. Dans ce cas les effets directs des forces visqueuses sont négligeables.

Cette théorie repose sur le fait que les plus gros tourbillons sont instables et se scindent en plusieurs plus petits tourbillons, tout en leur transférant leur énergie cinétique. Ces plus petits tourbillons réitèrent cette opération jusqu'à ce que le nombre de Reynolds $Re(l) = u(l)l/\nu$ soit suffisamment petit pour que le tourbillon associée soit stable. À ce moment, la viscosité moléculaire est plus importante et dissipe l'énergie cinétique.

Ensuite le taux de dissipation ε est calculé à partir du premier transfert d'énergie cinétique des plus grands tourbillons. Ces tourbillons ont une énergie de l'ordre de u_0^2 et un temps caractéristique de $\tau_0 = u_0/l_0$, donc le taux de transfert d'énergie peut être de l'ordre de $u_0^2/\tau_0 = u_0^3/l_0$. À ce niveau le taux de dissipation ε a la même échelle que u_0^3/l_0 , indépendant de ν (pour un Reynolds important).

Kolmogorov propose trois hypothèses pour étayer cette théorie, il se base sur le fait que la vitesse $u(l)$ et le temps $\tau(l)$ diminuent en même temps que la longueur l . La première hypothèse concerne l'isotropie des petites échelles. En général, les gros tourbillons sont anisotropes et sont affectés par les conditions aux limites de l'écoulement. Kolmogorov soutient que les directions privilégiées des grandes échelles se perdent dans la réduction des échelles. Dans la cascade d'énergie, le transfert d'énergie et la dissipation visqueuse sont les deux processus dominants. L'hypothèse plausible est donc que les paramètres importants sont le taux d'énergie reçu des petites échelles par les grandes échelles (noté \mathcal{T}_E) et la viscosité cinématique ν . Étant donné que le taux de dissipation ε est déterminé par le taux de transfert d'énergie \mathcal{T}_E , ces deux

sont alors équivalents (i.e. $\varepsilon \approx \mathcal{T}_E$). La deuxième hypothèse de Kolmogorov est que l'état des petites échelles est statistiquement déterminé par ν et \mathcal{T}_E . A partir de cette hypothèse sont alors définies les échelles de Kolmogorov :

$$\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4} , \quad (\text{A.1})$$

$$u_\eta = (\varepsilon\nu)^{1/4} , \quad (\text{A.2})$$

$$\tau_\eta = (\nu/\varepsilon)^{1/2} . \quad (\text{A.3})$$

Ces échelles définissent les plus petites et dissipatives échelles de la turbulence. Tout d'abord, le nombre de Reynolds de celles-ci est unitaire $\eta u_\eta/\nu = 1$, ce qui confirme que la cascade d'énergie continue jusqu'à ce que le nombre de Reynolds soit assez petit pour que la dissipation soit dominante. Ensuite le taux de dissipation est donné par :

$$\varepsilon = \nu(u_\eta/\eta)^2 = \nu/\tau_\eta^2 , \quad (\text{A.4})$$

et la relation $(u_\eta/\eta) = 1/\tau_\eta$ fournit une caractérisation consistante des gradients de vitesse des échelles dissipatives.

Les ratios des petites échelles aux grandes échelles sont déterminés à l'aide des relations de Kolmogorov et de l'équivalence $\varepsilon \approx u_0^3/l_0$. On obtient alors :

$$\eta/l_0 = Re^{-3/4} , \quad (\text{A.5})$$

$$u_\eta/u_0 = Re^{-1/4} , \quad (\text{A.6})$$

$$\tau_\eta/\tau_0 = Re^{-1/2} . \quad (\text{A.7})$$

On remarque alors que lorsque le nombre de Reynolds augmente, le rapport η/l_0 diminue. En conséquence, pour un nombre de Reynolds suffisamment élevé, il existe des échelles l qui sont très petites devant l_0 et toujours très grandes devant η , c'est-à-dire $\eta \ll l \ll l_0$. Étant donné que ces échelles sont toujours plus grande que les échelles dissipatives, et que leur nombre de Reynolds associé est grand, alors leur mouvement est peu affecté par la viscosité. De cela découle la troisième hypothèse de Kolmogorov. Dans tous les écoulements à nombre de Reynolds suffisamment important, les mouvements des échelles l telles que $\eta \ll l \ll l_0$ sont uniquement déterminés par ε et indépendant de ν .

Il existe donc trois zones principales, la zone produisant l'énergie cinétique et correspondant aux plus grandes échelles, la zone dissipative correspondant aux plus petites échelles et la zone intermédiaire qui est une zone d'inertie et où la dissipation n'intervient pas. Dans cette dernière zone, la vitesse caractéristique et le temps caractéristique peuvent uniquement être déterminés à l'aide de ε .

$$u(l) = (\varepsilon l)^{1/3} = u_\eta(l/\eta)^{1/3} \approx u_0(l/l_0)^{1/3} , \quad (\text{A.8})$$

$$\tau(l) = (l^2/\varepsilon)^{1/3} = \tau_\eta(l/\eta)^{2/3} \approx \tau_0(l/l_0)^{2/3} . \quad (\text{A.9})$$

En conséquent, $u(l)$ et $\tau(l)$ diminuent lorsque l diminue. A l'aide de Eq. (A.8) et Eq. (A.9), on obtient la relation suivante :

$$u(l)^2/\tau(l) = \varepsilon . \quad (\text{A.10})$$

La relation précédente montre alors que le taux de transfert d'énergie (équivalent au taux de dissipation) est indépendant de l lorsqu'il appartient à la zone inertielle.

Programmation et Algorithmique

Une grande partie de ce stage a été consacré à la prise en main du code de simulation *elsA* et à la programmation. Les simulations en non structuré dans *elsA* ne sont possibles qu'en utilisant des bases CGNS (*CFD General Notation System*) [1]. Ces bases regroupent les informations nécessaires à la simulation, comme le maillage, la solution initiale, les raccords de blocs et les conditions aux limites.

Passage du structuré au non structuré

Le premier travail de programmation a consisté à créer un programme prenant en paramètre une base CGNS structurée et à la transformer en base non structurée. Il s'agit donc de récupérer les coordonnées du maillage structuré et de le transformer en une table de connectivité des éléments pour le maillage non structuré, et une table de connectivité des faces pour les bords du domaine (raccords plus conditions aux limites). L'algorithme pour créer la table de connectivité est le suivant :

```
int count = 0;
int* Cell = (int *) malloc (8*nCell*sizeof(int));

for (int k=1;k<=kMax-1;k++)
  for (int j=1;j<=jMax-1;j++)
    for (int i=1;i<=iMax-1;i++)
      {
        Cell[count] = (i-1) + (j-1)*iMax + (k-1)*iMax*jMax+1;
        Cell[count+1] = i + (j-1)*iMax + (k-1)*iMax*jMax+1;
        Cell[count+2] = i + j*iMax + (k-1)*iMax*jMax+1;
        Cell[count+3] = (i-1) + j*iMax + (k-1)*iMax*jMax+1;
        Cell[count+4] = (i-1) + (j-1)*iMax + k*iMax*jMax+1;
        Cell[count+5] = i + (j-1)*iMax + k*iMax*jMax+1;
        Cell[count+6] = i + j*iMax + k*iMax*jMax+1;
        Cell[count+7] = (i-1) + j*iMax + k*iMax*jMax+1;

        count += 8;
      }
```

Étant donné qu'il s'agit de passer d'un maillage structuré à non structuré, tous les éléments sont donc des hexaèdres et il est alors facile d'allouer la mémoire requise pour la table de connectivité. L'algorithme est quasiment identique pour la table de connectivité des faces, la seule différence est que l'on traite des éléments à quatre sommets (faces des hexaèdres).

Taille caractéristique des cellules

Par la suite, du codage à l'intérieur du logiciel *elsA* a été nécessaire. Le code de simulation *elsA* associe trois langages de programmation différents. Les classes sont implémentées en C++, les boucles de calcul sont codées en Fortran et l'interface utilisateur est en Python. Dans un premier temps, une boucle de calcul Fortran a été mise en place afin de calculer les tailles caractéristiques des cellules en non structuré. Cette taille caractéristique est utilisée dans la résolution LES en particulier avec le modèle WALE où la dimension de chaque cellule est utilisée. Pour implémenter cet algorithme, il faut différencier le type de cellule pour calculer la taille caractéristique. Par exemple pour un tétraèdre, notons d_i la distance du centre de la face i au sommet opposé. Alors la taille caractéristique l_{cell} sera :

$$l_{cell} = \left(\prod_{i=1}^4 d_i \right)^{1/4} \quad (\text{B.1})$$

Dans le cas d'une pyramide à base carrée, notons d_1 la distance du centre de la base carrée au sommet opposé et d_i , $i = 2..5$ la distance du centre d'une face triangulaire au milieu de l'arête opposée. Dans ce cas là, la taille caractéristique est :

$$l_{cell} = \left(\prod_{i=1}^5 d_i \right)^{1/5} \quad (\text{B.2})$$

Pour le prisme à base triangulaire, on note d_1 et d_2 les distances du centre d'une face triangulaire au centre de la face triangulaire opposée et d_3 , d_4 et d_5 les distances du centre d'une face rectangulaire au milieu de l'arête opposée. La taille caractéristique est donc également calculé par Eq. (B.2). Pour les hexaèdres, d_i correspond à la distance entre le centre d'une face et le centre de la face opposée et donc la taille caractéristique est calculée par :

$$l_{cell} = \left(\prod_{i=1}^6 d_i \right)^{1/6} \quad (\text{B.3})$$

La difficulté de l'implémentation de cet algorithme consiste à passer d'une table de connectivité éléments-faces à une table de connectivité éléments-sommets afin de pouvoir accéder à toutes les informations nécessaires au calcul (définition des faces opposées en particulier).

Extraction de données

En non structuré, les seuls résultats pouvant être extraits du calcul sont des champs instantanés. Ces champs ne sont donc pas représentatif de la totalité de l'écoulement et ne peuvent pas être comparés à la simulation structurée du problème. Il a donc été nécessaire de coder deux fonctions dans *elsA* permettant d'une part de faire une moyenne temporelle des champs conservatifs tout au long de la simulation et également de récupérer les valeurs du tenseur des contraintes visqueuses sur les parois. Pour calculer la moyenne temporelle, à chaque itération les champs sont multipliés par le pas de temps physique (fixé par la condition CFL) et sommés avec les résultats précédents. A la fin de la simulation, la somme de tous les champs est divisée par le temps physique final et on aboutit donc à un résultat moyenné en temps sur l'ensemble de la simulation qui est écrit dans un fichier formaté Tecplot. Pour sortir le tenseur

des contraintes visqueuses, on accède à celui par le tenseur des contraintes totales noté *tensgen* (tenseur symétrique comportant les contraintes de pression et les contraintes visqueuses). L'algorithme suivant permet alors de retrouver l'expression du tenseur des contraintes visqueuses sur la paroi.

```

for (int ii=0; ii<taille;ii++)
{
    E_Int cell = cellborder[ii];
    E_Int bord = indicB[ii];

    E_Float ds = surfNorm[bord];
    E_Float sx = surf(bord,1)/ds;
    E_Float sy = surf(bord,2)/ds;
    E_Float sz = surf(bord,3)/ds;

    tonxyz(ii,1) = tensgen(cell,1)*sx + tensgen(cell,2)*sy + tensgen(cell,3)*sz;
    tonxyz(ii,2) = tensgen(cell,2)*sx + tensgen(cell,4)*sy + tensgen(cell,5)*sz;
    tonxyz(ii,3) = tensgen(cell,3)*sx + tensgen(cell,5)*sy + tensgen(cell,6)*sz;
    tonn = tonxyz(ii,1)*sx + tonxyz(ii,2)*sy + tonxyz(ii,3)*sz;

    result(ii,1) = -(tonxyz(ii,1) - tonn*sx);
    result(ii,2) = -(tonxyz(ii,2) - tonn*sy);
    result(ii,3) = -(tonxyz(ii,3) - tonn*sz);
}

```

La boucle de calcul se fait sur le nombre de cellules en contact avec la paroi (c'est-à-dire le nombre de faces frontières). Les entiers *cell* et *bord* indiquent l'indice respectif de la cellule et de la face frontière. Le vecteur (sx, sy, sz) correspond au vecteur surface normal et unitaire. L'algorithme permet ensuite de retraduire la formule suivante exprimant le tenseur des contraintes visqueuses τ_t :

$$\tau_t = -[\tau \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{n} \cdot \tau \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}] \quad (\text{B.4})$$

Le résultat obtenu est ensuite écrit dans un fichier formaté Tecplot et peut donc être exploité.

Recherche des deuxièmes voisins

Pour augmenter la précision des schémas numériques, une manière de procéder consiste à faire intervenir plus de points dans le calcul du flux à l'interface : on parle de stencil étendu. Cette approche fonctionne en structuré car il est très facile de classer les éléments dans le voisinage d'un volume donné. En non structuré, il s'agit de stocker dans des tableaux les deuxièmes cellules voisines à chaque face au début de la simulation. Il est ensuite aisé de connaître l'indice de ces cellules lorsque l'on veut calculer le flux sur une interface. L'idée générale est présentée ci-dessous.

Deux configurations sont possibles, la deuxième cellule est liée à la première par une face et il est donc facile de récupérer son indice (cellule C, Fig. B.1) ou alors elle est liée par un sommet. Dans ce deuxième cas, il faut donc parcourir toutes les cellules entourant ce sommet et retenir celle la plus alignée avec la première. Pour cela, on retient le plus grand produit scalaire entre le vecteur liant les deux centres des cellules voisines à l'interface et le vecteur liant les centres de la cellule voisine et l'éventuelle deuxième voisine. Dans l'exemple précédent on effectue donc les produits scalaires $\overline{BA} \cdot \overline{AD}$ et $\overline{BA} \cdot \overline{AE}$ normalisés par les longueurs des vecteurs et on retient la plus grande valeur (on se rapproche de $\cos(\eta) = 1$).

Pour les faces frontières physiques de blocs, il n'est pas possible de définir directement un second volume. Dans ce cas, le second volume prend l'indice du premier.

Pour les faces raccord de bloc, il y a deux manières de procéder. La première consiste à reprendre toute la mise en œuvre numérique dans *elsA* afin de prendre en compte l'existence d'une seconde rangée

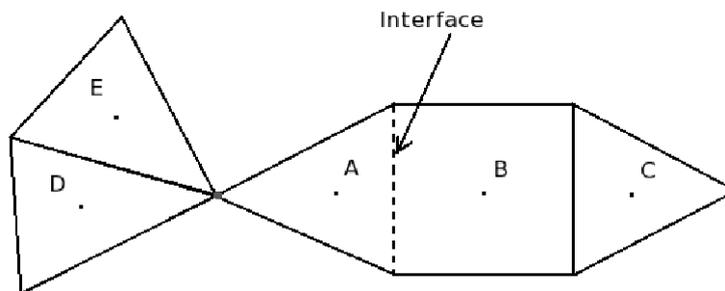


FIGURE B.1 – Configurations possibles pour le repérage des deuxièmes cellules voisines

de cellules fantômes qui servira de conteneur pour les champs supplémentaires nécessaires à effectuer le traitement des faces internes comme celui des faces de raccord. Cette approche n'a pas été retenue pour *elsA*.

Il semble plus prometteur d'effectuer un traitement particulier sur les faces raccord de bloc. Il s'agit d'écrire le schéma numérique sous la forme de 2 contributions distinctes : une contribution venant du bloc courant et une contribution venant du bloc opposé. On peut alors associer les contributions du bloc opposé à l'indice du volume fantôme : c'est une approche compatible avec l'existence d'une seule rangée de ghostcells. Par contre, la prise en compte d'une telle approche en parallèle pose quelques difficultés : il faut définir de nouveaux conteneurs dans *elsA*. Compte tenu de la complexité de la tâche, ce point n'a pas été abordé pour les calculs parallèles durant le stage.

Dans la suite l'algorithme est détaillé de manière plus précise. Le code a été réalisé en Fortran (comme la plupart des boucles de calcul de *elsA*) et les variables utilisées sont les suivantes :

C Input variables

```

INTEGER_E ncell, nbnode, nbint      !Number of cell, nodes and interface
INTEGER_E volL(0:nbint-1)          !Index of left-hand-side (lhs) neighbour cell
INTEGER_E volR(0:nbint-1)          !Index of right-hand-side (rhs) neighbour cell
INTEGER_E nbint3p, nbint4p          !Number of three and four nodes interfaces
INTEGER_E nbint3pb, nbint4pb        !Number of three and four nodes boundary interfaces
INTEGER_E intmeshnodes(4,0:nbint-1) ! list of mesh nodes for each interface
REAL_E coordcenter(0:ncell-1,3)    ! cell center coordinates

```

C Output Variables

```

INTEGER_E volLL(0:nbint-1)         ! Index of second lhs neighbour cell
INTEGER_E volRR(0:nbint-1)         ! Index of second rhs neighbour cell

```

C Local variables

```

INTEGER_E facesofcell(0:ncell-1,7) !List of interfaces for each cell
INTEGER_E iL, iR                    !Index of lhs and rhs
INTEGER_E iface, icell, inode        !Indexes for loops
INTEGER_E i, j, k, iloc              !Indexes for loops
INTEGER_E is(4)                     !Coordinates of the local interface
INTEGER_E isFound1, isFound2         !Flags

```

```

INTEGER_E inpoel(9,0:ncell-1)      !List of mesh nodes for each cell (1..8)
                                     ! and number of nodes for each cell (9)
INTEGER_E esup1(8*ncell), esup2(nbnode+1) !Linked lists : esup1 stores elements, and
                                     !the ordering is such that the elements surrounding
                                     !point i are stored in locations esup2(i)+1 to esup2(i)
INTEGER_E ipoin, istor, point
REAL_E    xl, yl, zl, xr, yr, zr, xnew, ynew, znew
REAL_E    cosL, cosR, normL, normR
REAL_E    prodsL, prodsR, maxcosL, maxcosR
INTEGER_E cellLL, cellRR
INTEGER_E face, oppface, indicvol

```

La création de la table de connectivité des éléments est faite de la manière suivante :

```

DO iface = 0, nbint-1
  iL = voll(iface)
  iR = volr(iface)

  facesofcell(iL,1) = facesofcell(iL,1) + 1
  facesofcell(iR,1) = facesofcell(iR,1) + 1

  facesofcell(iL,facesofcell(iL,1)+1) = iface
  facesofcell(iR,facesofcell(iR,1)+1) = iface

  is(1)=intmeshnodes(1,iface)
  is(2)=intmeshnodes(2,iface)
  is(3)=intmeshnodes(3,iface)
  is(4)=intmeshnodes(4,iface)

DO i=1,4
  isFound1 = 0
  isFound2 = 0

  IF (is(i).NE.-1) THEN

C    FOR IL
      IF (inpoel(9,iL).EQ.-1) THEN
        inpoel(9,iL) = inpoel(9,iL)+2
        inpoel(inpoel(9,iL),iL)=is(i)
      ELSE
        DO j=1,inpoel(9,iL)
          IF (is(i).EQ.inpoel(j,iL)) THEN
            isFound1=1
          ENDIF
        ENDDO
        IF (isFound1.EQ.0) THEN
          inpoel(9,iL) = inpoel(9,iL)+1
          inpoel(inpoel(9,iL),iL)=is(i)
        ENDIF
      ENDIF

C    FOR IR
      IF (inpoel(9,iR).EQ.-1) THEN

```

```

        inpoel(9,iR) = inpoel(9,iR)+2
        inpoel(inpoel(9,iR),iR)=is(i)
    ELSE
        DO j=1,inpoel(9,iR)
            IF (is(i).EQ.inpoel(j,iR)) THEN
                isFound2=1
            ENDIF
        ENDDO
    IF (isFound2.EQ.0) THEN
        inpoel(9,iR) = inpoel(9,iR)+1
        inpoel(inpoel(9,iR),iR)=is(i)
    ENDIF
    ENDIF
ENDDO
ENDDO

```

Cette table de connectivité n'est tout de même pas suffisante pour repérer les deuxièmes cellules voisines. Il s'agit maintenant de créer deux listes liées permettant d'accéder à tous les éléments en contact avec un nœud donné.

```

DO icell=1,ncell
    DO inode=1,inpoel(9,icell-1)
        ipoin=inpoel(inode,icell-1)+1
        esup2(ipoin)=esup2(ipoin)+1
    ENDDO
ENDDO

DO ipoin = 2, nbnode + 1
    esup2(ipoin) = esup2(ipoin) + esup2(ipoin-1)
ENDDO

DO icell = 1, ncell
    DO inode = 1, inpoel(9,icell-1)
        ipoin = inpoel(inode,icell-1)
        istor = esup2(ipoin)+1

        esup2(ipoin) = istor
        esup1(istor) = icell
    ENDDO
ENDDO

DO ipoin = nbnode+1,2,-1
    esup2(ipoin) = esup2(ipoin-1)
ENDDO
esup2(1) = 0

```

Maintenant, il est désormais possible de repérer n'importe quelle cellule à l'aide des tables de connectivité et des listes chaînées. Il faut ensuite différencier l'algorithme de recherche selon le type d'élément traité (tétraèdre, pyramide, prisme, hexaèdre). Tous les cas ne seront pas présentés, on se limitera uniquement aux tétraèdres et aux hexaèdres (méthodes similaires pour les autres géométries). Le code mis en place est le suivant :

```

DO iface=0,nbint-1

```

```

iL=voll(iface)
iR=volR(iface)

maxcosL=0
maxcosR=0

xl = coordcenter(iL,1)
yl = coordcenter(iL,2)
zl = coordcenter(iL,3)
xr = coordcenter(iR,1)
yr = coordcenter(iR,2)
zr = coordcenter(iR,3)

is(1)=intmeshnodes(1,iface)
is(2)=intmeshnodes(2,iface)
is(3)=intmeshnodes(3,iface)
is(4)=intmeshnodes(4,iface)

```

C Case Tetra

```

IF (inpoel(9,iL).EQ.4) THEN
  DO i=1,4
    IF ((inpoel(i,iL).NE.is(1)).AND.
&      (inpoel(i,iL).NE.is(2)).AND.
&      (inpoel(i,iL).NE.is(3))) THEN
      point = inpoel(i,iL)
    ENDIF
  ENDDO
  DO ipoin=esup2(point)+1,esup2(point+1)
    IF (esup1(ipoin).NE.iL) THEN
      xnew=coordcenter(esup1(ipoin),1)
      ynew=coordcenter(esup1(ipoin),2)
      znew=coordcenter(esup1(ipoin),3)

      prodsL = (xl-xr)*(xnew-xl)+(yl-yr)*(ynew-yl)+
&             (zl-zr)*(znew-zl)
      normL = SQRT((xnew-xl)**2 + (ynew-yl)**2 +
&                (znew-zl)**2)
      cosL = prodsL/normL
      IF (cosL.GT.maxcosL) THEN
        maxcosL = cosL
        cellLL = esup1(ipoin)
      ENDIF
    ENDIF
  ENDDO
  voll(iface) = cellLL

```

C Case Hexa

```

ELSEIF (inpoel(9,iL).EQ.8) THEN
  DO i=1,6
    iloc=0

```

```

    face=facesofcell(iL,i+1)
    DO j=1,4
      DO k=1,4
        IF (intmeshnodes(j,face).EQ.is(k)) THEN
          iloc = iloc + 1
        ENDIF
      ENDDO
    ENDDO
    IF (iloc.EQ.0) THEN
      oppface = face
    ENDIF
  ENDDO
  indicvol = volL(oppface)
  IF (indicvol.EQ.iL) THEN
    volLL(iface) = volR(oppface)
  ELSE
    volLL(iface) = indicvol
  ENDIF
ENDIF
ENDDO

```

L'implémentation numérique de la recherche de la seconde rangée des éléments a été validée sur un cas simple (construit à la main). Ensuite, nous nous sommes intéressés à effectuer cette analyse pour un maillage hexaédrique autour d'un profil RAE2822. Il s'agit d'un calcul RANS simple et rapide (moins d'une demi-heure de calcul sur 1 processeur). Afin de valider l'approche, on compare le coefficient de pression pariétal C_p issu du calcul avec des données expérimentales. Les données à l'infini amont ont été choisies en accord avec les recommandations des auteurs de [8]. Le cas choisi est qualifié de Cas 9. La fermeture par modèle de turbulence s'appuie sur le modèle à une seule équation de transport de Spalart et Allmaras.

À partir des champs conservatifs à la paroi, il est possible de calculer la pression P :

$$P = (\gamma - 1) \left(\rho E - \rho \frac{\|u\|^2}{2} \right), \quad (\text{B.5})$$

avec $\gamma = 1.4$ coefficient polytropique (constant). Puis le coefficient de pression C_p est calculé à l'aide de la pression, de la masse volumique et de la vitesse calculés en amont (infini) :

$$C_p = \frac{P - P_\infty}{\frac{1}{2} \rho_\infty U_\infty^2}. \quad (\text{B.6})$$

On montre sur Fig. B.2 l'évolution du C_p le long du profil. On compare en particulier l'approche directionnelle avec l'implémentation MUSCL non directionnelle initialement implantée en non structuré. Les résultats sont très proches.

Cette étude préliminaire sera complétée par la suite par une analyse sur un cas industriel, lorsque l'approche MUSCL directionnelle sera rendue compatible avec les calculs parallèles. Enfin, le fait de rendre possible la mise en œuvre de stencils à 4 points directionnels ouvre de nombreuses possibilités pour la LES. Par exemple, il sera possible de mettre en œuvre rapidement un schéma de type centré du 4-ième ordre.

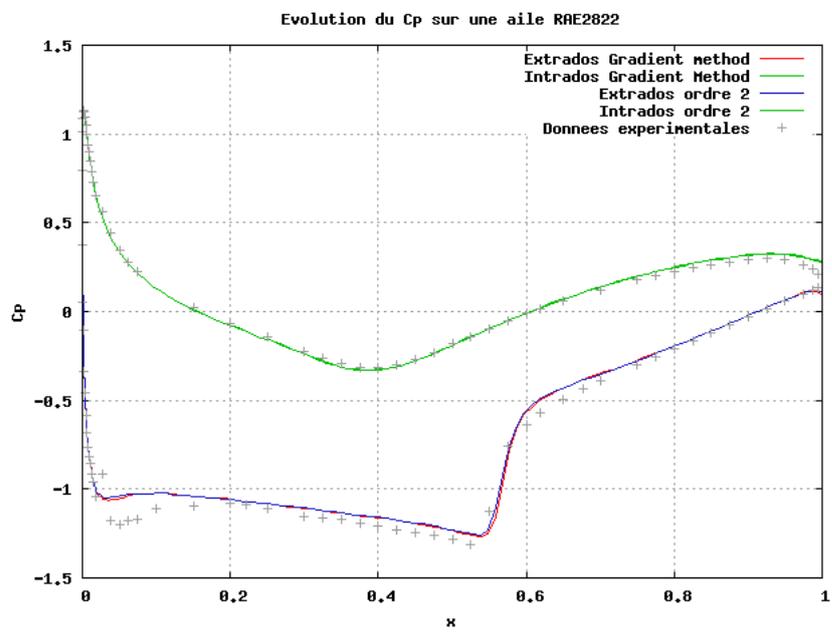


FIGURE B.2 – Coefficients de pression sur l'intrados et l'extrados

Bibliographie

- [1] Documentation about CFD General Notation System. <http://cgns.sourceforge.net/>, 1994.
- [2] Joseph Boussinesq. *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes à grande section*, volume Volume I-II. Gauthier Villars, Paris, 1897.
- [3] O. Cabrit. *Modélisation des flux pariétaux sur les tuyères des moteurs à propergol solide - TH/CFD/09/109*. PhD thesis, Université Montpellier II - DOCTORALE ISS - Spécialité Mathématiques et Modélisation, 2009.
- [4] Bastien Caruelle. *Simulations d'écoulements instationnaires turbulents en aérodynamique : Application à la simulation du phénomène de tremblement*. PhD thesis, ENSICA, Toulouse, 2000.
- [5] Yu-Hong Dong and Xi-Yun Lu. Large Eddy Simulation of a thermally stratified turbulent channel flow with temperature oscillation on the wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004.
- [6] F. Ducros and F. Nicoud. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 62, Number 3, 183-200, 1999.
- [7] G. Erlebacher, M.Y. Hussaini, C.G. Speziale, and T.A. Zang. Toward the Large Eddy Simulation of compressible turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 238, 155-185, 1992.
- [8] T. Hellström, L. Davidson, and A. Rizzi. Reynolds stress transport modelling of transonic flow around the RAE2822 airfoil. In *32nd Aerospace Sciences Meeting, Reno, Jan 1994*, 1994. AIAA paper 94-0309.
- [9] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. In *AIAA 14th Fluid and Plasma Dynamic Conference, June 23-25, Palo Alto, California*, 1981. AIAA paper 1981-1259.
- [10] H. Kawamura, H. Abe, and Y. Matsuo. DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 1999.
- [11] Florent Laporte. *Simulation numérique appliquée à la caractérisation et aux instabilités des tourbillons de sillage d'avions de transport*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, 2002.
- [12] D.K. Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids*, Vol. A 4(3), 1992.

- [13] Stephen B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [14] Arnaud Fosso Pouangué. Mise en oeuvre d'une approche non structurée dans *elsA*. Rapport de stage WN/CFD/07/88, Cerfacs, 2007.